

**Universidade Federal de Juiz de Fora**  
**Pós-Graduação em Ciências Exatas**  
**Mestrado em Física**

DANILO TOSCANO

**Estudo via simulação computacional da formação  
de vórtice e do modo girotrópico em nanodiscos**

Juiz de Fora  
Fevereiro de 2011

DANILO TOSCANO

# **Estudo via simulação computacional da formação de vórtice e do modo girotrópico em nanodiscos**

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

Orientador: Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel

Co-orientador: Prof. Dr. Rodrigo Alves Dias

Juiz de Fora

Fevereiro de 2011

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

TOSCANO, DANILO .

Estudo via simulação computacional da formação de vórtice e do modo girotrópico em nanodiscos / DANILO TOSCANO. -- 2011.

139 f. : il.

Orientador: Sidiney de Andrade Leonel

Coorientador: Rodrigo Alves Dias

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Física, 2011.

1. Nanodiscos magnéticos. 2. Vórtice magnético. 3. Modo girotrópico. I. Leonel, Sidiney de Andrade, orient. II. Dias, Rodrigo Alves, coorient. III. Título.



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO E DO DESPORTO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA  
Instituto de Ciências Exatas  
Departamento de Física

UFJF  
Programa de  
Pós-Graduação  
em Física

A presente dissertação, intitulada “**Estudo via simulação computacional da formação de vórtice e do modo girotrópico em nanodiscos**” de autoria de **Danilo Toscano**, submetida à Comissão Examinadora abaixo assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **MESTRE EM FÍSICA – área de concentração: Física** em 28 de fevereiro de 2011.

Juiz de Fora, 28 de fevereiro de 2011.

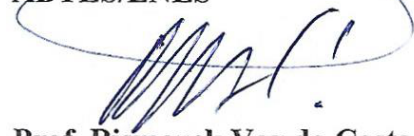


**Prof. Dr. Sidney de Andrade Leonel**  
Orientador


Departamento de Física/UFJF



**Prof. Dr. Flávio Garcia**  
ABTLS/LNLS



**Prof. Bismarck Vaz da Costa**  
Departamento de Física/UFMG



**Prof. Dr. Rodrigo Alves Dias**  
Departamento de Física/UFJF

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE  
TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO,  
PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

# *Agradecimentos*

- Aos meus pais pela compreensão e paciência;
- Ao meu orientador, o professor Sidiney, pelo apoio e confiança no meu trabalho. Sou muito grato a ele por ter me apresentado ao tema nanodiscos magnéticos e pela sua ajuda na realização desta dissertação;
- Ao meu co-orientador, o professor Rodrigo, que muito me ajudou durante o desenvolvimento do código computacional;
- Ao professor Pablo pela colaboração em diversos momentos;
- Ao professor Sato com quem aprendi a linguagem Fortran-90 e, em especial, pela sua dedicação ao Laboratório de Simulação e Computação;
- À Pós-graduação e ao grupo de pesquisa pela ajuda financeira para a participação em eventos e visitas a outras instituições;
- Ao professor Rodrigo, Geraldo e Evandro (Presuntinho) que me ajudaram com a escrita em Latex;
- Aos colegas da Pós-graduação que se revelaram verdadeiros amigos, que não apenas nos momentos felizes estiveram presentes como também nos momentos difíceis.

# Resumo

Recentemente foi mostrado que filmes finos magnéticos em nanoescala podem exibir um vórtice no seu estado fundamental. O vórtice pode diminuir sua energia através do desenvolvimento de uma magnetização fora do plano, perpendicular ao plano do filme, a direção  $z$ , que pode ser para cima ou para baixo. Devido a estrutura de vórtice ser muito estável, essa degenerescência de dois estados abre a possibilidade de usar um nanodisco magnético como um bit de memória em dispositivos eletrônicos. A manipulação do vórtice e a forma de controlar a magnetização do núcleo é um assunto de extrema importância. Resultados recentes sugerem que a polaridade do vórtice pode ser invertida através da aplicação de um campo magnético aplicado no plano do disco. Um outro efeito importante induzido por um campo magnético externo devido a componente da magnetização fora do plano no núcleo do vórtice é o modo girotrópico. O modo girotrópico é o movimento elíptico ao redor do centro do disco executado pelo núcleo do vórtice sob a influência de um campo magnético. No presente trabalho usamos simulações numéricas para estudar o estado fundamental bem como o comportamento dinâmico de vórtices magnéticos em nanodiscos finos. Consideramos um modelo em que os momentos magnéticos interagem através dos potenciais de troca ( $-J\sum\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j$ ) e dipolar ( $D\sum\{\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j - 3(\vec{S}_i\cdot\hat{r}_{ij})\times(\vec{S}_j\cdot\hat{r}_{ij})\}/(r_{ij})^3$ ). Investigamos as condições para a formação do núcleo do vórtice com a sem uma magnetização fora do plano como função da intensidade da interação de dipolar  $D$ , da extensão e da espessura do nanodisco magnético. Nossos resultados foram consistentes com a existência de duas fases de vórtices separados por uma linha de *crossover*  $[(D_c - D)^\alpha]$ . Observamos que  $D_c$  não depende do raio do nanodisco mas depende da espessura. O expoente  $\alpha$  encontrado foi  $\alpha = 0.55(2)$ . O movimento girotrópico é estudado através da aplicação de um campo magnético externo paralelo ao plano do nanodisco magnético. Nossos resultados mostram que existe um valor mínimo para o módulo da magnetização do núcleo do vórtice fora do plano, a partir da qual podemos excitar o modo girotrópico. Esse valor mínimo depende da espessura do nanodisco. Esse resultado sugere que uma forma experimental de melhorar a estabilidade do processo de inversão da magnetização pode ser através do controle da espessura. Também observamos que a frequência do modo girotrópico aumenta com a razão entre espessura e raio, que está qualitativamente de acordo com resultados teóricos e experimentais. Finalmente, apresentamos resultados teóricos para nanodiscos de Permalloy obtidos do nosso modelo, que também estão em boa concordância com resultados experimentais.

Palavras-chave: Nanodiscos magnéticos. Vórtice magnético. Modo girotrópico.

# *Abstract*

Recently it was shown that magnetic thin films with nanoscale dimensions can exhibit a vortex as its ground state. The vortex can lower its energy by developing an out-of-plane magnetization perpendicular to the plane of the film, the  $z$  direction, which can be “up” or “down”. Because the vortex structure is very stable this twofold degeneracy opens up possibility of using a magnetic nanodisk as a bit of memory in electronic devices. The manipulation of the vortex and way to control the core magnetization is a subject of paramount importance. Recent results have suggested that the polarity of a vortex core could be switched by applying a pulsed magnetic field in the plane of the disk. Another important effect induced by an external magnetic field due to the component out-of-plane in the vortex-core is the gyrotropic mode. The gyrotropic mode is the elliptical movement around the disk center executed by the vortex-core under the influence of a magnetic field. In the present work we used numerical simulations to study the ground state as well as the dynamical behavior of magnetic vortices in thin nanodisks. We have considered a model where the magnetic moments interact through exchange ( $-J\sum\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j$ ) and dipolar ( $D\sum\{\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j - 3(\vec{S}_i\cdot\hat{r}_{ij})\times(\vec{S}_j\cdot\hat{r}_{ij})\}/(r_{ij})^3$ ) potentials. We have investigated the conditions for the formation of the vortex-core with and without an out-of-plane magnetization as a function of the strength of the dipole interaction  $D$  and the size and the thickness of the magnetic nanodisks. Our results were consistent with the existence of two vortex phases separated by a crossover line  $[(D_c - D)^\alpha]$ . We have observed that  $D_c$  does not depend on the radius of nanodisk but depends on its thickness. The exponent  $\alpha$  was found to be  $\alpha = 0.55(2)$ . The gyrotropic motion is studied by applying an external magnetic field parallel to the plane of the magnetic nanodisk. Our results show that there is a minimum value for the modulus of the out-of-plane vortex-core magnetization, from which we can excite the gyrotropic mode. This minimum value depends on the thickness of the nanodisk. This result suggests that an experimental way to improve the stability of the process of switching may be through the thickness control. We also observed that the gyrotropic mode frequency increases with the aspect ratio, which is in qualitative accordance with theoretical and experimental results. Finally, we present theoretical results for Permalloy nanodisks obtained from our model, which are also in good agreement with experimental results.

Keywords: Magnetic nanodisks. Magnetic vortex. Gyrotropic mode.



# *Lista de Figuras*

Figura 1.1 - Representação do estado de vórtice em nanodiscos magnéticos. Figura retirada da referência [1]. . . . .	18
Figura 1.2 - Degenerescência do estado de vórtice para um nanodisco, as quatro possíveis combinações de quiralidade e polaridade (c,p). Figura retirada da referência [2]. . . . .	18
Figura 1.3 - Microscopia de Lorentz: (a) Imagens Fresnel de nanodiscos de diâmetro entre 180 - 900 [nm]; (b) O sentido da rotação da magnetização deflete os elétrons incidentes para o centro do disco (ou para longe dele), conduzindo a um ponto claro (ou escuro) no centro do disco; (c) Imagem Fresnel ampliada. Figura retirada da referencia [4]. . . . .	20
Figura 1.4 - Representação esquemática da deflexão sofrida por um feixe eletrônico ao atravessar um nanodisco no estado de vórtice. Figura retirada da referencia [7]. . . . .	20
Figura 1.5 - (a) Imagens Fresnel de três discos de Py com diferentes quiralidades na presença ou não de campo aplicado; (b) Representação esquemática do estado de vórtice num campo magnético externo e a campo nulo. Figura retirada da referência [4]. . . . .	21
Figura 1.6 - (a) Micrografia MFM de três discos de Py com diferentes polaridades; (b) Sinal de MFM ao longo da linha tracejada em (a). Figura retirada da referência [7] . . . . .	22
Figura 3.1 - Célula convencional de uma rede FCC, suas arestas medem $a_0$ . Figura retirada da referência [26] . . . . .	44
Figura 3.2 - Particionamento de uma caixa em células . . . . .	45
Figura 3.3 - Representação esquemática do método micromagnético . . . . .	48

Figura 4.1 - Uma rede bidimensional quadrada, mostrando os primeiros vizinhos do sítio $i$ . Figura retirada da referência [32]. . . . .	57
Figura 4.2 - Parametrização das componentes de spin através do parâmetros $\phi$ e $m$ . . . . .	60
Figura 4.3 - configuração de vórtice com $Q = 1$ e $C = 0$ . . . . .	67
Figura 4.4 - Trajetórias no espaço de fase para o caroço do vórtice com carga topológica $Q = 1$ . O Sistema é conservativo $D = 0$ . (a) e (b) num campo magnético externo $\vec{B} = (0, 2)$ , o caroço parte da origem e gira no sentido horário ou anti-horário dependendo da sua polaridade. O ponto fixo, no qual ele gira depende do sentido do campo e também da sua quiralidade. Em (c) o campo magnético externo é nulo. Se o caroço está na origem ele permanece, se ele está deslocado, ele gira. . . . .	76
Figura 4.5 - Trajetórias no espaço de fase para o caroço do vórtice com carga topológica $Q = 1$ . O Sistema é dissipativo $D = -0.025$ . O núcleo é caracterizado por $(p = 1, c = 1)$ e o campo externo é $\vec{B} = (2, 0)$ . . . . .	80
Figura 4.6 - Trajetórias no espaço de fase para o caroço do vórtice com carga topológica $Q = 1$ . O Sistema é conservativo $D = 0$ . O núcleo é caracterizado por $(p = 1, c = 1)$ e o campo externo é $\vec{B} = (0, 2)$ , $\kappa = 1$ e $M = 0.01$ . Embora a trajetória seja elíptica ela apresenta ondulações. Se a massa é muito pequena essas ondulações são praticamente imperceptíveis. . . . .	84
Figura 4.7 - Trajetórias no espaço de fase para o caroço do vórtice com carga topológica $Q = 1$ . O Sistema é dissipativo $D = -0.01$ . O núcleo é caracterizado por $(p = 1, c = 1)$ e o campo externo é $\vec{B} = (0, 2)$ , $\kappa = 1$ e $M = 0.01$ . Embora a trajetória seja elíptica ela apresenta ondulações. Se a massa é muito pequena essas ondulações são praticamente imperceptíveis. . . . .	84
Figura 5.1 - Possíveis configurações para o estado fundamental de um nanodisco com espessura muito menor do que o diâmetro. Em (a) o estado cebola. Em (b) o estado de vórtice. . .	86

Figura 5.2 - Diagrama de fase retirado da referência [48]. No eixo x representada o tamanho, no eixo y o parâmetro da interação dipolar. Os símbolos quadrados e losangos representam o estado fundamental de nanodiscos modelados sobre as redes quadrada e hexagonal, respectivamente. No topo a direita é mostrado resultados para uma rede triangular. Nas regiões I e III, os estados fundamentais apresentam as configurações cebola e vórtice, respectivamente. A região II, área hachurada, representa uma região onde a configuração mais estável apresenta uma componente fora do plano no centro do disco.	88
Figura 5.3 - Gráficos mostrando o efeito do parâmetro de damping na obtenção do estado fundamental do sistema. . . . .	94
Figura 5.4 - Estrutura tridimensional de momentos magnéticos no estado de vórtice num nanodisco cilíndrico. A partícula no centro de cada camada localiza o núcleo do vórtice, seu momento magnético é a média dos momentos localizados nos vértices da plaqueta que contém o núcleo do vórtice. A componente z do momento magnético da partícula é rotulada como $S_{core}^z$ . . . . .	95
Figura 5.5 - Gráficos das trajetórias do núcleo do vórtice, quando o modo girotrópico é excitado num disco de $d = 175$ [nm] e $l=10$ [nm]. Na figura (a) é mostrada apenas a trajetória do núcleo do vórtice na camada mais externa, ressalta-se que os núcleos em diferentes camadas estão fortemente acoplados. . . . .	96
Figura 5.6 - Gráfico da componente z da magnetização do núcleo do vórtice em função do diâmetro para várias espessuras, em nanodiscos de Py-79. . . . .	97
Figura 5.7 - Gráfico da componente z da magnetização do núcleo do vórtice em função da espessura para vários diâmetros, em nanodiscos de Py-79. . . . .	97
Figura 5.8 - Gráficos da componente z dos momentos magnéticos localizados nos sítios da camada mais externa para 4 valores de espessura em nanodiscos de Py-79 com diâmetro $d = 175$ [nm]. . . . .	99

Figura 5.9 - Gráficos da componente z dos momentos magnéticos localizados nos sítios da camada mais externa para 4 valores de diâmetro em nanodiscos de Py-79 com espessura $l = 20$ nm. . . . .	99
Figura 5.10 - Gráficos do comportamento da componente fora do plano, $S_{z_{core}}$ , em função do parâmetro $D/J$ , para vários diâmetros. . . . .	101
Figura 5.11 - Gráficos do comportamento crítico do $\ln[S_{z_{core}}^z]$ em função do $\ln[(D_c - D)/J]$ para valores de $D/J$ próximos a $D_c/J$ . . . . .	103
Figura 5.12 - O movimento girotrópico em nanodiscos com $L = 20$ e $z = 2$ . . . . .	105
Figura 5.13 - O movimento girotrópico em nanodiscos com $L = 20$ e $z = 3$ . . . . .	106
Figura 5.14 - O movimento girotrópico em nanodiscos com $L = 20$ e $z = 4$ . . . . .	107
Figura 5.15 - O movimento girotrópico em nanodiscos de Py-79 com diâmetros $d = 175$ [nm]. . . . .	110
Figura 5.16 - O movimento girotrópico em nanodiscos de Py-79 com espessuras $l = 10$ [nm]. . . . .	111
Figura 5.17 - Gráfico da frequência do modo girotrópico em função da razão entre espessura e raio em nanodiscos de Py-79. . . . .	112
Figura A.1 - Movimento de precessão do momento magnético de um elétron num campo magnético estático. Figura retirada da referência [68]. . . . .	116
Figura A.2 - O torque de precessão e o torque de damping agindo sobre o momento magnético de um elétron num campo magnético estático. Figura retirada da referência [68]. . . . .	116
Figura A.3 - Comportamento qualitativo do momento magnético de um elétron num campo magnético estático. Na presença de damping positivo, o momento espirala e o alinhamento no sentido do campo ocorre gradualmente. O módulo do momento permanece constante, a seta do vetor $\vec{m}$ descreve sua trajetória sobre uma superfície de uma esfera. Quando o alinhamento é feito, ambos os torques se anulam, e o sistema atinge um estado de equilíbrio. Figura retirada da referência [68]. . . . .	119

Figura A.4 - Comportamento qualitativo do momento magnético de um elétron num campo magnético estático. Na presença de damping negativo, o momento espirala e o alinhamento no sentido contrário ao do campo ocorre gradualmente. Enquanto, o sistema “caminha” para um estado de equilíbrio ele vai ganhando energia. Figura retirada da referência [68].	120
Figura B.1 - Vórtices com carga topológica $Q = 1$ com diferentes valores para a constante $C$ .	122
Figura B.2 - Antivórtices com carga topológica $Q = -1$ com diferentes valores para a constante $C$ .	123
Figura B.3 - Gráfico da energia dipolar em função da diferença de fase, para $Q = 1$ .	124
Figura B.4 - Vórtices com diferentes cargas topológicas, $Q = 2, 3, 4$	125
Figura B.5 - Antivórtices com diferentes cargas topológicas, $Q = -2, -3, -4, -5$	126
Figura B.6 - Gráfico da Energia de exchange em função da carga topológica.	127
Figura B.7 - Gráfico da energia total em função da carga topológica.	127
Figura B.8 - Gráfico da energia dipolar em função da carga topológica.	128
Figura B.9 - Um par vórtice-antivórtice com $ Q  = 1$ . Para várias distâncias relativas. Note que a carga topológica dessa estrutura é nula, $Q = 1 - 1 = 0$ . Em (a) O centro do vórtice coincide com o do antivórtice. De (b) até (d) o vórtice está à direita e a distância relativa do par aumenta.	129
Figura B.10 - Gráfico da energia de exchange em função da distância relativa do par vórtice-antivórtice com carga topológica $Q = 1$ .	130
Figura B.11 - Gráfico da energia dipolar em função da distância relativa do par vórtice-antivórtice com carga topológica $Q = 1$ .	130
Figura B.12 - Gráfico da energia total em função da distância relativa do par vórtice-antivórtice com carga topológica $Q = 1$ .	131

Figura B.13 -Um vórtice com carga topológica $Q = 1$ . Em (a) O centro do vórtice coincide com centro geométrico do material, a origem do sistema de coordenadas. Em (b) e (c) o vórtice foi transladado para a direita, no seu centro há um ponto $(x_{v_0},0)$ que localiza sua posição. . . . .	132
Figura B.14 -Gráfico da energia total em função da coordenada $x$ do núcleo do vórtice com carga topológica $Q = 1$ . . . . .	133
Figura B.15 -Gráfico da energia de exchange em função da coordenada $x$ do núcleo do vórtice com carga topológica $Q = 1$ . . . . .	133
Figura B.16 -Gráfico da energia dipolar em função da coordenada $x$ do núcleo do vórtice com carga topológica $Q = 1$ . . . . .	134

# *Sumário*

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>17</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO DE CONCEITOS FUNDAMENTAIS EM MAGNETISMO</b>	<b>24</b>
2.1	MAGNETISMO NA MATÉRIA . . . . .	24
2.2	MODELO DE HEISENBERG . . . . .	28
2.2.1	INTERAÇÃO DE TROCA . . . . .	28
2.2.2	INTERAÇÃO DIPOLAR . . . . .	31
2.2.3	INTERAÇÃO ZEEMAN . . . . .	33
2.3	CAMPO LOCAL EFETIVO . . . . .	33
<b>3</b>	<b>MODELAGEM COMPUTACIONAL DE UM NANODISCO MAGNÉTICO</b>	<b>36</b>
3.1	DINÂMICA DE SPINS . . . . .	36
3.2	O LIMITE CLÁSSICO . . . . .	40
3.3	ESTIMATIVA DO NÚMERO TOTAL DE SPINS NUM NANODISCO COM DIMENSÕES TÍPICAS . . . . .	44
3.4	SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA . . . . .	46
3.5	INTEGRAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE MOVIMENTO . . . . .	53
<b>4</b>	<b>ESTRUTURA DE VÓRTICES MAGNÉTICOS E MOVIMENTO GIROTROPICO VIA EQUAÇÃO DE THIELE</b>	<b>56</b>

4.1	O LIMITE CONTÍNUO . . . . .	56
4.2	VÓRTICES E ANTIVÓRTICES . . . . .	62
4.3	EQUAÇÃO DE THIELE PARA NANODISCOS . . . . .	68
4.3.1	SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE THIELE . . . . .	72
4.3.2	SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE THIELE GENERALIZADA . . . . .	81
<b>5</b>	<b>FORMAÇÃO DO VÓRTICE MAGNÉTICO E MOVIMENTO GIROTRÓPICO EM NANODISCOS</b>	<b>85</b>
5.1	VÓRTICES EM NANODISCOS MAGNÉTICOS . . . . .	85
5.2	DETALHES DAS SIMULAÇÕES . . . . .	89
5.3	RESULTADOS E DISCUSSÕES . . . . .	97
5.3.1	ESTADO FUNDAMENTAL . . . . .	97
5.3.2	MODO GIROTRÓPICO . . . . .	104
<b>6</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>113</b>
6.1	PERSPECTIVAS FUTURAS . . . . .	114
	<b>Apêndice A – AS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS DE LANDAU-LIFSHITZ E DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT</b>	<b>115</b>
	<b>Apêndice B – EFEITOS DA ANISOTROPIA DE FORMA EM FERROMAGNE- TOS QUASE-BIDIMENSIONAIS</b>	<b>121</b>
	<b>Referências</b>	<b>135</b>



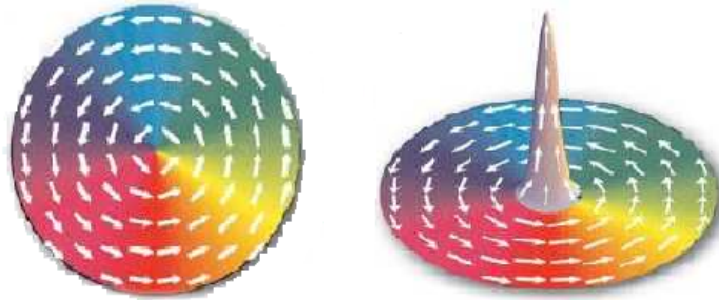
# *1 INTRODUÇÃO*

Materiais magnéticos são empregados em inúmeras aplicações tecnológicas, dentre as quais se destaca a produção de meios para gravação magnética de dados. A crescente demanda por meios de gravação cada vez mais rápidos e de alta capacidade de armazenamento têm impulsionado o desenvolvimento de materiais magnéticos nanoestruturados, conhecidos como nanomagnetos. Tais estruturas podem ser modeladas para apresentarem diferentes estados de magnetização, dependendo basicamente do material e das suas características geométricas.

Além do interesse científico em nanomagnetos, devido a novas propriedades magnéticas, há também interesse tecnológico. Por exemplo, uma matriz de nanomagnetos pode ser empregada como meio de gravação de dados em futuros discos rígidos (HD - “hard disk”) ou memórias magnéticas de acesso aleatório (MRAM - “magnetic random access memory”). Num meio litografado, a informação pode ser armazenada em elementos discretos, as chamadas partículas monodomínios. Cada elemento pode armazenar 1 bit de dados.

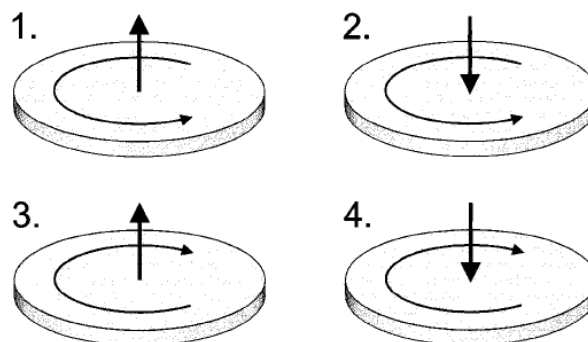
O ferromagnetismo é observado em sólidos quando os momentos magnéticos de muitos átomos se alinham paralelamente devido ao intenso campo de troca e, consistem de um grande número de domínios magnéticos que se formam para minimizar a energia magnetostática. Reduzindo o tamanho do sistema, tanto o número quanto tamanho dos domínios magnéticos diminuem. Quando o tamanho do material é reduzido à nanoescala, o custo em energia para a formação de uma parede de domínio é superior a correspondente redução da energia magnetostática, conseqüentemente, o sistema se apresenta com todos os momentos alinhados. Em outras palavras, forma-se uma partícula monodomínio, ou seja, um dipolo magnético gigante.

Desde que a nanoestrutura apresente algumas características bem peculiares, tais como geometria, dimensões e material, uma configuração rotacional aparece como um estado intermediário entre os regimes de mono e multidomínio. Nanomagnetos macios na forma de disco ou quadrado, em que a anisotropia efetiva têm sua principal contribuição na anisotropia de forma, exibem um vórtice magnético no estado remanente.



**Figura 1.1** – Representação do estado de vórtice em nanodiscos magnéticos. Figura retirada da referência [1].

A configuração de vórtice apresenta necessariamente um fluxo fechado da magnetização. A **quiralidade** é a propriedade estrutural que determina o sentido da circulação da magnetização, esta pode ser horária ou anti-horária. O núcleo do vórtice pode apresentar uma componente da magnetização perpendicular ao plano da estrutura. A **polaridade** determina o sentido da componente da magnetização fora do plano, que pode ser para cima ou para baixo. A polaridade e a quiralidade são independentes, de forma que o estado de vórtice é **quadruplamente degenerado**, se a polaridade for não nula.



**Figura 1.2** – Degenerescência do estado de vórtice para um nanodisco, as quatro possíveis combinações de quiralidade e polaridade (c,p). Figura retirada da referência [2].

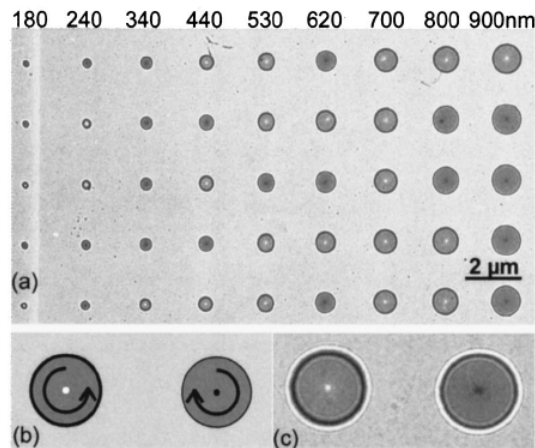
Da degenerescência do estado de vórtice e da estabilidade da estrutura sob a influência

de campos magnéticos externos surge a possibilidade de se empregar um nanodisco com a configuração de vórtice como elemento de memória em dispositivos magneto-eletrônicos, podendo armazenar até 2 bits de dados. Uma outra vantagem é que nanodiscos com estado de vórtice são fabricados e caracterizados à temperatura ambiente. Vórtices ocorrem em nanomagnetos “grandes”, mas em compensação, apresentam a capacidade de armazenar o dobro de informação em relação a uma partícula monodomínio.

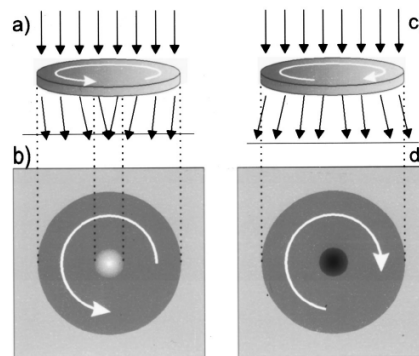
A existência de vórtices magnéticos foi prevista teoricamente na década de 70, através de modelos de Heisenberg com anisotropia planar e em conexão com a transição de fase BKT [3]. Entretanto, sua evidência experimental em nanodiscos surgiu apenas na última década [4, 5, 6], com o desenvolvimento das técnicas de fabricação e caracterização de materiais nanoestruturados.

Para detectar a quiralidade, pode-se usar a Microscopia de Lorentz (L.M. - “Lorentz microscopy”), na qual a mostra é atravessada por um feixe de elétrons num microscópio eletrônico, a interação dos elétrons incidentes com o campo magnético local gerado pelos momentos magnéticos da amostra causa a deflexão do feixe incidente via a força de Lorentz. A figura (1.3) mostra micrografias de nanodiscos de Py obtidas na referência [4]. Uma outra técnica capaz de detectar a quiralidade é a Microscopia eletrônica de foto-emissão (PEEM - “photoemission electron microscopy”).

Foi verificado experimentalmente que ao aplicar um campo magnético uniforme paralelo ao plano do disco, o núcleo do vórtice desloca-se da posição de equilíbrio (centro do disco) perpendicularmente à direção definida pelo campo aplicado, sendo o sentido desse deslocamento determinado pela quiralidade, veja a figura (1.5). Portanto, uma possível forma de detectar a quiralidade é aplicar um campo paralelo ao plano do disco e observar o deslocamento do núcleo ao longo da direção perpendicular definida pelo campo externo.



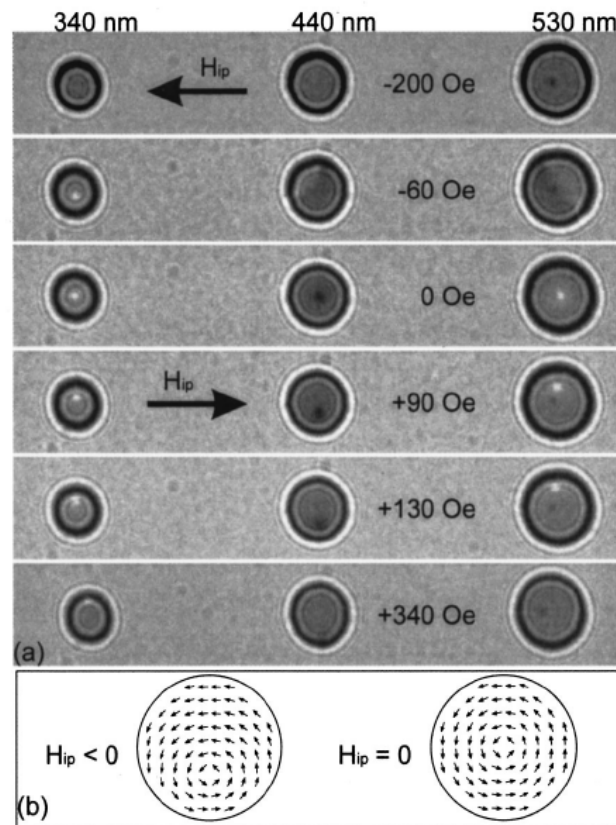
**Figura 1.3** – Microscopia de Lorentz: (a) Imagens Fresnel de nanodiscos de diâmetro entre 180 - 900 [nm]; (b) O sentido da rotação da magnetização deflete os elétrons incidentes para o centro do disco (ou para longe dele), conduzindo a um ponto claro (ou escuro) no centro do disco; (c) Imagem Fresnel ampliada. Figura retirada da referencia [4].



**Figura 1.4** – Representação esquemática da deflexão sofrida por um feixe eletrônico ao atravessar um nanodisco no estado de vórtice. Figura retirada da referencia [7].

A polaridade pode ser detectada através da Microscopia de Força Magnética (MFM - e “magnetic force microscopy”) [7, 6]. Nesta técnica uma “agulha” magnetizada (“cantilever”) varre a amostra magnética e, através de atração ou repulsão, o sinal de MFM poder gerar uma imagem do “relevo” magnético da amostra. Ver figura (1.6).

Devido a suas características únicas, o vórtice magnético apresenta uma dinâmica não-trivial. Um fenômeno muito interessante ocorre devido a componente da magnetização fora do plano, conhecido como **modo girotrópico**, no qual o núcleo do vórtice exibe um movimento elíptico em torno de um ponto fixo [8, 9]. Esse movimento rotacional do núcleo do vórtice ocorre quando o estado de vórtice é perturbado por um campo magnético fraco, aplicado no

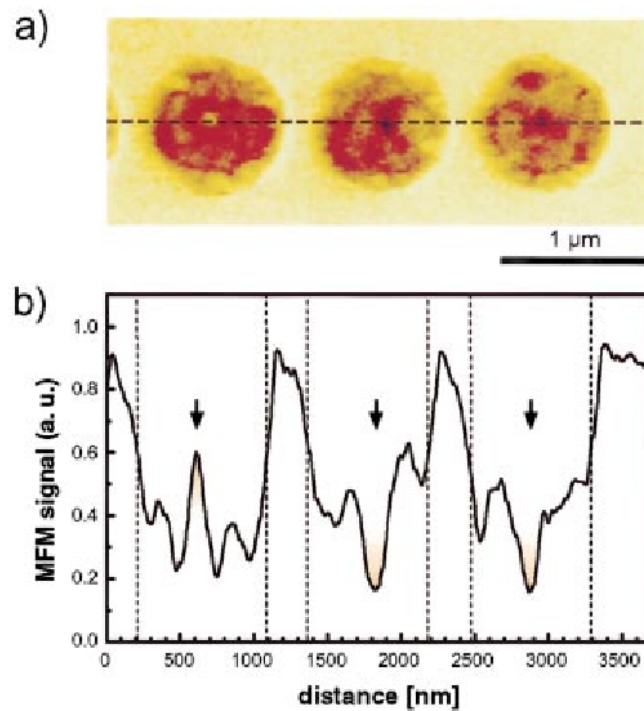


**Figura 1.5** – (a) Imagens Fresnel de três discos de Py com diferentes quiralidades na presença ou não de campo aplicado; (b) Representação esquemática do estado de vórtice num campo magnético externo e a campo nulo. Figura retirada da referência [4].

plano do disco.

Durante os últimos anos, muito trabalho tem sido dedicado para manter o movimento do núcleo do vórtice dentro dos nanodisco e também controlar o “switching”, ou seja, o mecanismo pelo qual o sistema muda de um estado para outro, mediante alguma perturbação externa.

A inversão da polaridade, mediante a aplicação de um campo perpendicular ao plano do nanodisco e sentido contrário à polaridade, foi reportado na referência [10]. Essa forma de controlar a polaridade apresenta a vantagem de que o núcleo do vórtice permanece estático na sua posição de equilíbrio, entretanto, ela requer amplitudes de campo muito altas. Para se ter uma ideia, de acordo com a referência [10], um disco de permalloy (Py,  $Ni_{80}Fe_{20}$ ) com diâmetro de 1  $[\mu m]$  e espessura 80 [nm], a amplitude do campo necessário para ocorrer o “switching” foi da ordem de 2.5 [kOe]  $\approx$  0.25 [T]. Simulações numéricas performadas com pulsos de campo



**Figura 1.6** – (a) Micrografia MFM de três discos de Py com diferentes polaridades; (b) Sinal de MFM ao longo da linha tracejada em (a). Figura retirada da referência [7]

magnético muito curtos [ps] e intensos 0.5 [T], aplicados nessa mesma direção, mostram que é possível controlar o “switching” da quiralidade em nanodiscos [11]. Uma forma alternativa para a inversão da quiralidade pode ser encontrada na referência [12], em que um campo magnético não homogêneo é aplicado no plano do disco, os resultados foram obtidos via simulação. O controle da inversão da polaridade do vórtice frente a aplicação de um campo magnético oscilatório no plano do nanodisco de Py foi observado experimentalmente [13]. Esse esquema de inverter a polaridade, exige amplitudes pouco intensas, da ordem de [mT], representando um grande avanço em relação aos métodos que empregam campos perpendiculares ao plano do disco. O “switching” da polaridade frente a aplicação de um corrente de spin polarizada foi previsto teoricamente [14] e observado experimentalmente [15]. As principais características do controle da polaridade podem ser encontradas nas referências [13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21], onde pode ser constatado que, o “switching” induzido por um campo no plano ou por uma corrente de spin polarizada, envolve a criação de um par vórtice-antivórtice e a subsequente aniquilação do antivórtice com o vórtice inicial, restando o vórtice que foi criado com a polaridade invertida.

Nos parágrafos acima, tentou-se apresentar um panorama geral do estado da arte dos nanodiscos magnéticos. Nesta dissertação, o interesse está na formação do estado vórtice e na excitação do modo girotrópico em nanodiscos. Tal estudo é feito através da abordagem computacional e resultou na publicação de um artigo [22], que sintetiza os principais resultados aqui obtidos. Simulações computacionais têm sido usadas em várias áreas do conhecimento, conduzindo tanto a desenvolvimentos teóricos quanto a observações experimentais. O simulador micromagnético (OOMMF) têm sido usado em muitos trabalhos científicos, entretanto, optamos por desenvolver um código próprio, escrito em linguagem Fortran 90. Utilizando parâmetros reais para Py-79, conseguimos reproduzir observações experimentais. No próximo capítulo, é feita uma discussão dos conceitos básicos sobre magnetismo envolvidos neste trabalho. No capítulo 3 apresenta-se a modelagem computacional de um nanodisco magnético. O capítulo 4 é dedicado às propriedades estáticas e dinâmicas de vórtices magnéticos. Finalmente, o capítulo 5 exhibe o resultado central deste trabalho, o comportamento e a influência da componente da magnetização fora do plano no modo girotrópico em nanodiscos magnéticos.

## 2 REVISÃO DE CONCEITOS FUNDAMENTAIS EM MAGNETISMO

Os fundamentos do modelo teórico empregado para descrever um nanodisco magnético são apresentados nesse capítulo. Inicialmente, faz-se uma rápida revisão dos conceitos básicos em magnetismo. Em seguida, discute-se os hamiltonianos de spins descrevendo as principais interações magnéticas. Por fim, é apresentada a noção de campo magnético efetivo local.

### 2.1 MAGNETISMO NA MATÉRIA

O comportamento dos materiais magnéticos num campo magnético externo é determinado pela origem dos seus momentos magnéticos e pela natureza das interações entre eles. Os momentos magnéticos atômicos têm origem nos momentos angulares (orbital e spin) dos elétrons nos íons ou átomos que formam a matéria. Em Mecânica Quântica, a relação entre momento magnético atômico  $\vec{\mu}$  e momento angular total  $\vec{J}$ , é dada por

$$\vec{\mu} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{J} = \gamma \vec{J} \quad (2.1)$$

onde  $\gamma$  é a razão giromagnética,  $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} [J.s]$  é a constante de Planck normalizada.  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,27 \cdot 10^{-24} [A.m^2 = J.T^{-1}]$  é denominado magnéton de Bohr, a unidade usual de momento magnético.  $g$  é adimensional, denominado fator de Landé, dado por

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



onde os números  $L, S, J$  são obtidos aplicando-se as regras de Hund [23].

Se o momento angular total de um átomo é nulo, o átomo é classificado como *diamagnético*, (Cu, Ag, Au). Por outro lado, se o momento angular total atômico for diferente de zero, o átomo pode ser paramagnético, (Al, Pt, O) ou ferromagnético, (Fe, Ni, Co). Portanto, materiais magnéticos são formados por átomos que possuem momento magnético resultante, ou seja, átomos com camadas eletrônicas incompletas. Por exemplo, elementos de metais de transição, tais como Fe, Ni, Co, etc, apresentam elétrons desemparelhados, porém, camadas incompletas em átomos isolados não garantem a existência de momentos magnéticos em cristais.

Considere uma porção de matéria. Particionando o volume desse material em elementos de volume  $\Delta V$  mesoscópicos, isto é, infinitesimais do ponto de vista macroscópico, mas suficientemente grandes para conter muitos átomos ou moléculas do material. A grandeza macroscópica que representa o estado magnético de um material é o vetor magnetização  $\vec{M}$

$$\vec{M}(\vec{r}) = \frac{1}{\Delta V} \sum_i \vec{\mu}_i \quad (2.3)$$

Sendo a unidade de momento magnéticos expressa em termos do magnéton de Bohr, vemos que a unidade da magnetização é  $[A/m]$ . Tratando-se de uma grandeza vetorial, para que haja magnetização, é preciso que haja momentos magnéticos, e que estes, em média, apontem na mesma direção.

Além da magnetização  $\vec{M}$ , a descrição macroscópica do magnetismo na matéria envolve outros duas quantidades, a indução magnética  $\vec{B}$  e o campo magnético  $\vec{H}$ . A relação entre essas grandezas é

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) \quad (2.4)$$

onde  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} [N/A^2]$  é a permeabilidade magnética do vácuo. Desta relação, vemos que a unidade de  $\vec{H}$  é a mesma de  $\vec{M}$ , ou seja  $[A/m]$ . Assim, a unidade de  $\vec{B}$  é o tesla  $[\frac{N}{Am}] = [T]$ .

Para alguns materiais é possível escrever a seguinte relação linear

$$\vec{M} = \chi \vec{H} \quad (2.5)$$

onde  $\chi$  é a susceptibilidade magnética, substituindo (2.5) em (2.4), obtêm-se

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (2.6)$$

onde  $\mu = \mu_0(1 + \chi)$  é a permeabilidade magnética do meio. As relações (2.5) e (2.6) são válidas somente se o meio magnético for linear e isotrópico. Se o meio for linear mas anisotrópico, as constantes de proporcionalidade devem ser substituídas por suas equivalentes tensoriais. Note que  $\mu$  é a resposta da indução magnética enquanto que  $\chi$  é a resposta da magnetização a uma perturbação externa.

Tradicionalmente, materiais magnéticos são classificados de acordo com sua resposta a aplicação de campos magnéticos. Tal resposta pode ser quantificada através da susceptibilidade magnética. Podemos classificar as diversas fases magnéticas de acordo com a origem microscópica de sua magnetização e de suas interações internas. *Diamagnetismo*, em geral, corresponde ao tipo mais fraco de resposta magnética de um sistema, sendo caracterizado por um valor pequeno e negativo de  $\chi$ , de modo que seu efeito é diminuir o módulo do campo no interior do material. Todos os materiais apresentam este comportamento, mas ele só é observado quando não existem outros tipos de comportamento superpostos. Os átomos de materiais diamagnéticos possuem momento angular nulo  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \vec{0}$ , ou seja, não apresentam momento magnético intrínseco, os momentos magnéticos são induzidos pelo campo magnético externo, sendo  $\vec{L}$  e  $\vec{S}$  os momentos angulares orbital e de spin, respectivamente. *Paramagnetismo* pode ocorrer em materiais cujos átomos possuem elétrons desemparelhados, os momentos magnéticos intrínsecos dos elétrons se orientam na direção e sentido do campo externo aplicado. Dessa forma, o estado paramagnético é caracterizado por um valor pequeno e positivo de  $\chi$ , que varia com a temperatura.

Em ambos os casos, Diamagnetismo e Paramagnetismo, a susceptibilidade é muito pequena,  $|\chi| \ll 1$  e, na ausência de campo magnético externo a magnetização é nula. Entretanto, alguns materiais apresentam “magnetização espontânea” abaixo de uma certa temperatura, ou seja, sua magnetização não aparece como resultado da aplicação de um campo externo. Os materiais ferromagnéticos sob a influência de um campo magnético externo, respondem da mesma

maneira que os paramagnéticos, porém, de forma mais eficiente, isto é,  $\chi \gg 1$ . Em geral, a susceptibilidade é uma função complicada do campo, da temperatura e da forma como a amostra foi preparada. *Ferromagnetismo* é observado em sólidos quando os momentos magnéticos de muitos átomos se alinham paralelamente. Qualquer material ferromagnético torna-se paramagnético a uma temperatura suficientemente elevada. Essa temperatura crítica na qual ocorre a transição de fase magnética é denominada temperatura de Curie  $T_C$ , e está na faixa de 100 - 1000 [K] para metais de transição e compostos de terras raras.

Em materiais paramagnéticos o alinhamento paralelo dos momentos magnético é atingido somente com campos externos muito intensos e para temperaturas não muito altas. Então o ordenamento espontâneo observado nos materiais ferromagnéticos pode ser entendido supondo a existência de um campo magnético interno muito forte. Foi notado que este campo interno não poderia ter origem na interação clássica dipolo-dipolo, porque esta não seria forte o suficiente para manter o ordenamento espontâneo dos ferromagnetos. Em 1928, Heisenberg mostrou que esse campo magnético interno é explicado pela Mecânica Quântica e surge da interação entre momentos magnéticos de átomos vizinhos. Mais especificamente, a interação de exchange ou de troca é uma consequência direta do princípio de exclusão de Pauli e da repulsão coulombiana entre elétrons.

Entretanto, ferromagnetos em escala macroscópica geralmente não ficam magnetizados de forma espontânea, porque a configuração dos momentos magnéticos procura ficar num estado que minimiza a energia magnetostática. Dessa forma, a magnetização do material divide-se em pequenas regiões, os chamados domínios magnéticos. Dentro de cada domínio, os momentos magnéticos se alinham praticamente na mesma direção devido ao intenso campo de troca, mas de um domínio para outro a direção do momento magnético resultante têm orientação diferente, o que em escala macroscópica desmagnetiza o material. Esse campo interno desmagnetizante origina-se da interação clássica dipolo-dipolo. É importante ressaltar que os domínios aparecem porque a interação dipolar, que é de longo alcance, prevalece para longas distâncias, sobre a interação de troca, que é de curto alcance. Em geral, a magnetização de um material ferromagnético só é observada se for aplicado um campo magnético externo.

## 2.2 MODELO DE HEISENBERG

O modelo de Heisenberg presume a existência de momentos magnéticos localizados, isto é, os elétrons responsáveis pelo magnetismo não são os elétrons de condução. Os momentos magnéticos permanecem fixos nos sítios de uma rede e interagem através da interação de troca direta ou indireta. No magnetismo de banda (magnetismo itinerante) os mesmos elétrons são responsáveis tanto pela condução quanto pelo magnetismo. Nesse caso, deve-se usar o modelo de Hubbard, que leva em conta também a contribuição da energia cinética dos elétrons, exemplos são, Fe, Ni, Co e suas ligas. O modelo de Heisenberg fornece uma ótima aproximação para materiais magnéticos isolantes, exemplos para ferromagnetos são  $\text{CrBr}_3$ ,  $\text{K}_2\text{CuF}_4$ ,  $\text{EuO}$ ,  $\text{EuS}$ ,  $\text{Rb}_2\text{CrCl}_4$  e  $\text{CdCr}_2$ , para antiferromagnetos são  $\text{EuTe}$ ,  $\text{MnO}$ ,  $\text{RbMnCl}_4$  e  $\text{RbMnF}_3$  e o exemplo para um material ferrimagnético é  $\text{EuSe}$  (informações obtidas da referência [24]). Para metais com magnetismo de banda, sob certas considerações, pode-se mostrar que o modelo de Hubbard é equivalente ao modelo de Heisenberg, para temperaturas inferiores a temperatura da transição de fase.

### 2.2.1 INTERAÇÃO DE TROCA

O ordenamento magnético dos momentos magnéticos ocorre devido à interação de troca, ou *exchange*, que segue do princípio de exclusão de Pauli e da repulsão coulombiana entre elétrons. Uma ótima discussão de que essa interação é do tipo  $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ , pode ser encontrada na referência [25]. Para um sistema constituído por muitos spins, o operador hamiltoniano da interação de troca é escrito como

$$H_{exc} = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -\frac{1}{\gamma^2 \hbar^2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j \quad (2.7)$$

onde  $\vec{S}_i$  é o operador de spin do íon localizado no sítio  $i$ , possui dimensão de momento angular, ou seja,  $\hbar$ . A constante de acoplamento  $J_{ij}$  possui dimensão de energia e, é denominada integral de troca e está relacionada com as integrais de “overlap” da função de onda espacial. No entanto, essas integrais decaem rapidamente com a distância entre os sítios, de forma que a contribuição

significante provêm das interações entre primeiros e segundos vizinhos. Portanto, trata-se de uma interação de curto alcance.

Uma boa aproximação é obtida ao considerar

$$J_{ij} = J_{ji} = \begin{cases} J, & \text{se } i, j \text{ são primeiros vizinhos} \\ 0, & \text{para demais casos} \end{cases} \quad (2.8)$$

O hamiltoniano da interação de troca (2.7) pode ser escrito da seguinte forma,

$$H_{exc} = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.9)$$

onde o fator 2 evita contar duas vezes a mesma interação e o símbolo  $\langle i, j \rangle$  indica que o somatório é feito sobre os spins vizinhos mais próximos.  $J < 0$  na equação (2.9) representa o acoplamento antiferromagnético, uma vez que a energia do sistema torna-se mínima quando os spins se alinham antiparalelamente ( $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -1$ ). Seguindo esse mesmo raciocínio, notamos que  $J > 0$  refere-se ao acoplamento ferromagnético, no qual a configuração de menor energia ocorre quando os spins se alinham paralelamente ( $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = +1$ ). A equação (2.9) em conjunto com o vínculo não linear

$$S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 \quad (2.10)$$

é conhecido na literatura como **modelo de Heisenberg isotrópico**. Ele explica o alinhamento dos spins, mas não especifica uma direção em particular.

Quando um sistema apresenta diferentes propriedades físicas dependendo da direção em que elas são estudadas, dizemos que o sistema apresenta anisotropia. Uma das principais características da anisotropia magnética é a orientação preferencial da magnetização espontânea do material. Isso ocorre porque tal orientação corresponde a um mínimo local da energia do sistema. Em geral, essa orientação é estável, mas a magnetização pode ser retirada deste estado através da aplicação de um campo externo.

Existem vários tipos de anisotropia magnética. A anisotropia cristalina ou magnetocristalina, refere-se a uma orientação preferencial da magnetização em relação aos eixos ou planos

do cristal.

Podemos definir um hamiltoniano mais genérico, que leve em conta a existência de uma direção fácil ou difícil para os spins apontarem, adicionando um termo na (2.9), ou seja,

$$H_{exc} = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \lambda S_i^z S_j^z) \quad (2.11)$$

Esse hamiltoniano em conjunto com o vínculo (2.10), é conhecido como **modelo de Heisenberg anisotrópico**, sendo  $\lambda$  o parâmetro de anisotropia. Dessa forma, para um ferromagneto, se  $\lambda = 0$ , recuperamos o modelo de Heisenberg isotrópico, Para  $0 < \lambda < 1$ , temos o modelo de Heisenberg de plano fácil, que é caracterizado pela preferência dos spins se alinharem paralelamente a um plano, que nesse caso é o plano-xy. Para  $\lambda = 1$ , temos o caso limite para um anisotropia fortemente planar, aqui distingue-se dois modelos, o modelo XY e do modelo do rotor planar, basta considerar spins com três ou duas componentes, respectivamente. Por outro lado, se  $\lambda < 0$ , temos o modelo Heisenberg de eixo-fácil, caracterizado pela preferência dos spins se alinharem perpendicularmente a um plano, o eixo-fácil neste caso é o eixo-z. Amostras com este tipo de anisotropia são conhecidos como materiais magnéticos duros. Materiais magnéticos moles são aqueles que apresentam anisotropia magnetocristalina muito pequena.

A anisotropia de forma, está relacionado à forma geométrica do material e manifesta-se em amostras finitas, devido ao campo desmagnetizante que surge dentro do material, gerando pólos nas superfícies. Um acoplamento anisotrópico deste tipo é conseguido levando-se em conta as interações dipolo-dipolo.

Além das anisotropias magnetocristalina e de forma existem várias outras. É possível que um sistema físico apresente mais de um tipo de anisotropia. Tal sistema apresenta uma competição de anisotropias e a expressão da energia de anisotropia efetiva será a soma da energia de anisotropia de cada parcela.

## 2.2.2 INTERAÇÃO DIPOLAR

A noção de momento de dipolo magnético ou simplesmente momento magnético é normalmente introduzida no contexto do Eletromagnetismo Clássico. Lembremos que o campo magnético num ponto  $\vec{r}_i$  gerado por um dipolo magnético pontual  $\vec{\mu}_j$  numa posição  $\vec{r}_j$  qualquer, é dado por

$$\vec{B}_j(\vec{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[ (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \frac{3(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \vec{\mu}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^5} - \vec{\mu}_j \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3} \right] \quad (2.12)$$

Definindo o versor

$$\hat{r}_{ij} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}} \quad (2.13)$$

vemos que o módulo do campo dipolar decresce com o cubo da distância entre o ponto fonte e o ponto de interesse, ou seja,

$$\vec{B}_j(\vec{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[ \hat{r}_{ij} 3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j) - \vec{\mu}_j \right] \quad (2.14)$$

Se no ponto de interesse  $\vec{r}_i$  há um outro momento de dipolo  $\vec{\mu}_i$  a energia de interação dipolo-dipolo é dada por

$$U = -\vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_j(\vec{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[ \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \right] \quad (2.15)$$

Suponha que existam  $N - 1$  dipolos interagindo com o dipolo  $\vec{\mu}_i$ , o campo gerados pelos outros dipolos no ponto  $\vec{r}_i$  é dado pela superposição dos campos gerados por cada momento de dipolo, isto é,

$$\vec{B}(\vec{r}_i) = \sum_{j=1}^{N-1} \vec{B}_j(\vec{r}_i) = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[ \hat{r}_{ij} 3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{\mu}_j) - \vec{\mu}_j \right] \quad (2.16)$$

Agora a energia de interação do dipolo  $\vec{\mu}_i$  com os demais será  $U_i = -\vec{\mu}_i \cdot \vec{B}(\vec{r}_i)$ , de forma que o hamiltoniano do sistema de N dipolos será

$$H_{dip} = \sum_{i=1}^N U_i = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[ \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \right] \quad (2.17)$$

Note que é preciso excluir termos que envolvem a interação do dipolo com ele mesmo,

pois um dipolo não interagem com seu próprio campo, além disso haveria uma divergência na energia total do sistema. O somatório pode ser escrito numa forma mais simétrica, definindo-se

$$\begin{aligned}
U_{ij} &= \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})] \\
&= \frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})] + \frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij}) + \frac{\mu_0}{4\pi r_{ji}^3} \vec{\mu}_j \cdot \vec{\mu}_i - 3(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ji})(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ji}) \right]
\end{aligned}$$

Agora os índices nos somatórios vão de 1 até N, o fator 1/2 evita a dupla contagem e, devemos lembrar que o caso  $i = j$  deve ser excluído. Portanto, a expressão (2.17), o hamiltoniano para a interação dipolar, torna-se

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[ \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \right] \quad (2.18)$$

Note-se que todas as distâncias relativas entre sítios podem ser escritas em termos do parâmetro de rede  $a_0$ . Assim, reescreve-se a equação (2.18) como

$$H_{dip} = \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \quad (2.19)$$

O primeiro termo na interação dipolar possui um caráter antiferromagneto, pois favorece o alinhamento antiparalelo dos spins. Enquanto que o segundo termo tende a alinhar os spins ao longo da direção que os unem, assim sempre que possível, os momentos magnéticos tenderão a ficar paralelos às bordas do material - daí o nome anisotropia de forma. Observa-se também que essa interação é de longo alcance, decaindo com o inverso do cubo da distância entre os sítios.



### 2.2.3 INTERAÇÃO ZEEMAN

O hamiltoniano da interação dos momentos magnéticos  $\vec{\mu}_i$  com um campo magnético externo é dado por

$$H_{ext} = - \sum_i \vec{\mu}_i \cdot \vec{B} \quad (2.20)$$

Substituindo a relação entre momento magnético e momento angular, obtêm-se

$$H_{ext} = -\gamma \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B} \quad (2.21)$$

Portanto, pelo hamiltoniano (2.21), vemos que para minimizar a energia da interação Zeeman, os momentos magnéticos devem se orientar paralelamente ao campo externo. Quando aplicamos um campo externo, realizamos trabalho e armazenamos energia no sistema.

## 2.3 CAMPO LOCAL EFETIVO

O hamiltoniano que descreve as interações entre momentos magnéticos num nanodisco feito de material magnético mole, deve conter a interação de troca (2.7) além da anisotropia de forma (2.18). A contribuição magnetocristalina é desprezível em materiais moles e não será considerada ( $\lambda \rightarrow 0$ ). Portanto, o hamiltoniano do sistema é

$$H = -\frac{J}{2\gamma^2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j + \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \quad (2.22)$$

É possível obter as expressões explícitas para os campo internos, de troca e dipolar, escrevendo esse hamiltoniano numa forma semelhante à interação Zeeman, ou seja,

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \gamma \vec{S}_i \cdot \left\{ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j \right\} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \gamma \vec{S}_i \cdot \left\{ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[ \frac{3(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij} - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \right\} \quad (2.23)$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_i^{exc} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_i^{dip} \quad (2.24)$$

Para uma dada configuração de spins, calcula-se os campos interno em cada sítio  $e$ , através dessa expressão determina-se a energia do sistema nessa configuração.

É fácil verificar que derivando o hamiltoniano da interação Zeeman (2.21) em relação a  $\vec{\mu}_n$ , ou seja, calculando o negativo do gradiente nas variáveis  $\mu_n^a$ ,

$$\vec{B}_n^{ext} = -\frac{\partial H_{ext}}{\partial \vec{\mu}_n} = -\vec{\nabla}_n H_{ext} \quad (2.25)$$

obtemos o campo magnético externo que atua no sítio  $n$ .

De forma análoga, os campos locais de exchange e dipolar podem também ser obtidos derivando-se as parcelas correspondentes na equação (2.22) em relação a  $\vec{\mu}_n$ , tal como na equação (2.25). A fim de verificar essa afirmação, vamos calcular a componente x do campo de troca no sítio  $n$ , ou seja,

$$\begin{aligned} -\frac{\partial H_{exc}}{\partial \mu_n^x} &= \frac{J}{2\gamma^2\hbar^2} \frac{\partial}{\partial \mu_n^x} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j \\ &= \frac{1}{2\gamma^2\hbar^2} \sum_{i,j} J_{ij} \frac{\partial}{\partial \mu_n^x} (\mu_i^x \mu_j^x + \mu_i^y \mu_j^y + \mu_i^z \mu_j^z) \\ &= \frac{1}{2\gamma^2\hbar^2} \sum_{i,j} J_{ij} (\delta_{in} \mu_j^x + \delta_{nj} \mu_i^x) \\ &= \frac{1}{2\gamma^2\hbar^2} \left( \sum_j J_{nj} \mu_j^x + \sum_i J_{in} \mu_i^x \right) \\ &= \frac{1}{2\gamma^2\hbar^2} (2 \sum_k J_{nk} \mu_k^x) \\ &= \frac{1}{\gamma\hbar^2} \sum_k J_{nk} S_k^x \\ &= \hat{x} \cdot \vec{B}_n^{exc} \end{aligned}$$

Portanto, o campo magnético efetivo local, incluindo os campos internos e externo, é dado por

$$\vec{B}_n = -\frac{\partial H}{\partial \vec{\mu}_n} = -\vec{\nabla}_n H \quad (2.26)$$

O modelo estendido, incluindo as interações de troca, dipolar e Zeeman, é dado pela hamiltoniana

$$H = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{\mu_0 \gamma^2}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \gamma \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} \quad (2.27)$$

### ***3    MODELAGEM COMPUTACIONAL DE UM NANODISCO MAGNÉTICO***

Em geral, sistemas magnéticos são constituídos por muitos momentos atômicos, o tratamento analítico de tais sistemas não é fácil, e na verdade nos deparamos com um problema de muitos corpos. A simulação computacional é uma ferramenta que ajuda a explicar as observações experimentais. Simulações numéricas podem ser calibradas para reproduzir e prever observações experimentais, utilizando os mesmos parâmetros e unidades empregados num laboratório. Neste capítulo descrevemos o método da Dinâmica de Spins e a Simulação Micro-magnética aplicados a um nanodisco magnético.

#### **3.1    DINÂMICA DE SPINS**

A dinâmica de spins é um método determinista que fornece a evolução temporal de sistemas magnéticos conservativos, ou seja, aqueles que não apresentam qualquer tipo de perda de energia. O sistema magnético é modelado por um hamiltoniano de spins. A evolução do sistema é governada pela equação de movimento de Heisenberg. Depois de obter o conjunto de equações diferenciais envolvendo operadores na representação de Heisenberg, toma-se o limite semi-clássico, no qual os operadores de spins são tratados como vetores. Uma vez especificada uma configuração inicial para o sistema, a dinâmica em tempo real é obtida através da integração do sistema de equações diferenciais através do método numérico.

Como um exemplo, considere um nanodisco magnético modelado numa rede de Bravais [26], em cada sítio da rede associa-se um operador de momento angular  $\vec{S}$ . Como vimos no

capítulo 2, esse sistema magnético pode ser descrito pelo hamiltoniano (2.27), ou seja,

$$H = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{\mu_0 \gamma^2}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \gamma \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{ext}$$

Então, para cada sítio têm-se uma equação de movimento de Heisenberg [27]

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_n}{dt} = [\vec{S}_n, H] \quad (3.1)$$

onde  $H$  é o Hamiltoniano do sistema e  $\vec{S}_n$  é o operador momento angular localizado no sítio  $n$  da rede,  $i = \sqrt{-1}$  é a unidade imaginária e  $[S_n^a, H] = S_n^a H - H S_n^a$  é o comutador de uma das componentes do momento angular com o hamiltoniano

Da mecânica quântica, sabemos que as componentes do momento angular estão sujeitas as regras de comutação:

$$[S_m^a, S_n^b] = i\hbar \epsilon^{abc} \delta_{mn} S_n^c \quad (3.2)$$

onde os índices superiores referem-se as componentes  $x, y, z$ , enquanto que o índices inferiores referem-se aos sítios.  $\delta_{mn}$  é o delta de Kronecker, um símbolo definido da seguinte maneira:

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & \text{se } m = n \\ 0, & \text{se } m \neq n \end{cases}$$

e  $\epsilon^{abc}$  é o símbolo anti-simétrico de Levi-Civita, definido da seguinte maneira:

$$\epsilon^{abc} = \begin{cases} 1, & \text{quando os valores numéricos de } abc \text{ estão numa ordem cíclica positiva} \\ 0, & \text{quando dois ou mais deles são repetidos} \\ -1, & \text{quando os valores numéricos de } abc \text{ estão numa ordem cíclica negativa} \end{cases}$$

A equação (3.1) escrita em termos de suas componentes, torna-se

$$i\hbar \frac{dS_n^a}{dt} = [S_n^a, H] = [S_n^a, H_{exc}] + [S_n^a, H_{dip}] + [S_n^a, H_{ext}] \quad (3.3)$$

Se  $a = x$ , o último termo em (3.3), torna-se,

$$\begin{aligned}
[S_n^x, H_{ext}] &= -\gamma \sum_i [S_n^x, S_i^x B_n^x + S_i^y B_n^y + S_i^z B_n^z] \\
&= -\gamma \left( \sum_i [S_n^x, S_i^x] B_n^x + \sum_i [S_n^x, S_i^y] B_n^y + \sum_i [S_n^x, S_i^z] B_n^z \right) \\
&= i\hbar\gamma \left( -\sum_i \delta_{ni} S_i^z \right) B_n^y + i\hbar\gamma \left( \sum_i \delta_{ni} S_i^y \right) B_n^z \\
&= i\hbar\gamma (S_n^y B_n^z - S_n^z B_n^y)
\end{aligned}$$

Este resultado pode ser generalizado para as demais componentes, através do símbolo  $\epsilon^{abc}$ , ou seja,

$$[S_n^a, H_{ext}] = i\hbar\gamma \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \epsilon^{abc} S_n^b B_n^c \quad (3.4)$$

Sendo possível identificar um produto externo, na forma vetorial, têm-se

$$[\vec{S}_n, H_{ext}] = i\hbar\gamma (\vec{S}_n \times \vec{B}_n) \quad (3.5)$$

Se  $a = x$ , o primeiro termo em (3.3), torna-se,

$$\begin{aligned}
[S_n^x, H_{exc}] &= -\frac{1}{2\hbar^2} \sum_i \sum_j J_{ij} \left( [S_n^x, S_i^x S_j^x] + [S_n^x, S_i^y S_j^y] + [S_n^x, S_i^z S_j^z] \right) \\
[S_n^x, H_{exc}] &= -\frac{1}{2\hbar^2} \sum_i \sum_j J_{ij} \left( S_i^y [S_n^x, S_j^y] + [S_n^x, S_i^y] S_j^y + S_i^z [S_n^x, S_j^z] + [S_n^x, S_i^z] S_j^z \right) \\
[S_n^x, H_{exc}] &= -\frac{i\hbar}{2\hbar^2} \sum_i \sum_j J_{ij} (\delta_{nj} S_i^y S_j^z + \delta_{ni} S_i^z S_j^y - \delta_{nj} S_i^z S_j^y - \delta_{ni} S_i^y S_j^z) \\
[S_n^x, H_{exc}] &= -\frac{i\hbar}{2\hbar^2} \sum_i \sum_j J_{ij} \delta_{nj} (S_i^y S_j^z - S_i^z S_j^y) - \frac{i\hbar}{2\hbar^2} \sum_i \sum_j J_{ij} \delta_{ni} (S_i^z S_j^y - S_i^y S_j^z) \\
[S_n^x, H_{exc}] &= -\frac{i\hbar}{2\hbar^2} \sum_i J_{in} (S_i^y S_n^z - S_i^z S_n^y) - \frac{i\hbar}{2\hbar^2} \sum_j J_{nj} (S_n^z S_j^y - S_n^y S_j^z)
\end{aligned}$$

Os índices dos somatórios são mudos, trocando  $i$  e  $j$  por  $k$ , temos que

$$[S_n^x, H_{exc}] = -\frac{i\hbar}{2\hbar^2} \sum_k J_{kn} (S_k^y S_n^z - S_k^z S_n^y) - \frac{i\hbar}{2\hbar^2} \sum_k J_{nk} (S_n^z S_k^y - S_n^y S_k^z)$$

Agora usamos o fato de que  $J_{kn} = J_{nk}$

$$[S_n^x, H_{exc}] = -\frac{i\hbar}{2\hbar^2} \sum_k J_{nk} (S_k^y S_n^z - S_k^z S_n^y + S_n^z S_k^y - S_n^y S_k^z)$$

$$[S_n^x, H_{exc}] = -\frac{i\hbar}{2\hbar^2} \sum_k J_{nk} (S_k^y S_n^z + S_n^z S_k^y) + \frac{i\hbar}{2\hbar^2} \sum_k J_{nk} (S_k^z S_n^y + S_n^y S_k^z)$$

Note-se os termos entre parênteses são anti-comutadores  $\{A, B\} = AB + BA = \{B, A\}$ .

$$[S_n^x, H_{exc}] = \frac{i\hbar}{2} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \frac{J_{nk}}{\hbar^2} (\{S_n^y, S_k^z\} - \{S_n^z, S_k^y\}) \quad (3.6)$$

Este resultado pode ser generalizado para as demais componentes através do símbolo  $\varepsilon^{abc}$ , ou seja

$$[S_n^a, H_{exc}] = \frac{i\hbar}{2} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \frac{J_{nk}}{\hbar^2} \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \varepsilon^{abc} \{S_n^b, S_k^c\} \quad (3.7)$$

Devido à relação de comutação (3.2), como  $k \neq n$  temos que  $[S_n^b, S_k^c] = 0$ .

O que implica em  $S_n^b S_k^c = S_k^c S_n^b$ .

E, portanto  $\{S_n^b, S_k^c\} = S_n^b S_k^c + S_k^c S_n^b = 2S_n^b S_k^c$ .

$$[S_n^a, H_{exc}] = i\hbar \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \varepsilon^{abc} \gamma S_n^b \left\{ \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \frac{J_{nk}}{\gamma \hbar^2} S_k^c \right\} \quad (3.8)$$

Ou ainda, na forma vetorial,

$$[\vec{S}_n, H_{exc}] = i\hbar \gamma \vec{S}_n \times \left\{ \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \frac{J_{nk}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_k \right\} \quad (3.9)$$

Finalmente, comparando o termo entre chaves da equação (3.9) com o primeiro da equação (2.24), identificamos que ele é o campo de troca gerado pelos spins da vizinhança do sítio  $n$ . Assim, podemos escrever,

$$[\vec{S}_n, H_{exc}] = i\hbar \gamma \vec{S}_n \times \vec{B}_n^{exc} \quad (3.10)$$

De forma análoga, porém mais trabalhosa, para o hamiltoniano da interação dipolar, é

possível mostrar que

$$[\vec{S}_n, H_{dip}] = i\hbar \gamma \vec{S}_n \times \vec{B}_n^{dip} \quad (3.11)$$

Substituindo as equações (3.10), (3.11), (3.5) na equação (3.1) obtemos

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_n}{dt} = [\vec{S}_n, H] = i\hbar \gamma \vec{S}_n \times (\vec{B}_n^{exc} + \vec{B}_n^{dip} + \vec{B}_n^{ext}) \quad (3.12)$$

ou seja,

$$\frac{d\vec{S}_n}{dt} = \gamma \vec{S}_n \times \vec{B}_n \quad (3.13)$$

Essa equação diferencial envolvendo os operadores de momento angular na representação de Heisenberg é uma generalização da equação clássica descrevendo a precessão de Larmor. Os momentos angulares precessam em torno de um campo efetivo local, incluindo os campos de troca, dipolar e externo.

A equação (3.13) é usualmente expressa como

$$\frac{d\vec{S}_n}{dt} = \gamma \vec{S}_n \times \vec{B}_n = -\gamma \vec{S}_n \times \frac{\partial H}{\partial \vec{\mu}_n} = \frac{\partial H}{\partial \vec{S}_n} \times \vec{S}_n \quad (3.14)$$

onde usamos a equação (2.26) e a relação entre momentos magnético e angular, ou seja,  $\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$ .

## 3.2 O LIMITE CLÁSSICO

O tratamento puramente quântico de sistema magnéticos torna-se muito complexo. Em alguns casos, os operadores de spins comportam-se como vetores clássicos. Por exemplo, em sistemas caracterizados por elevados números quânticos o número de estados discretos que o momento angular pode assumir torna-se grande. Assim, é de se esperar que no limite clássico os operadores de spin apresentem um contínuo de estados. O Princípio da Incerteza de Heisenberg é automaticamente desprezado se os spins são vetores tridimensionais, ou seja, é possível conhecer exatamente as três componentes de spins simultaneamente. Dessa forma, pode-se especificar uma condição inicial para o sistema.

Um exemplo em que os resultados obtidos através da dinâmica de spins estão em ótima



concordância com os resultados experimentais ocorre para o material antiferromagnético  $\text{RbMnF}_3$ , em que os íons  $\text{Mn}^{+2}$  têm spins  $S = 5/2$  e estão localizados numa rede cúbica simples. O ordenamento magnético ocorre abaixo da temperatura  $T_c = 83 \text{ K}$  e o valor experimental da constante de acoplamento entre primeiros vizinhos é  $J_{exp} = (-0.58 \pm 0.06) [\text{meV}]$ , veja a referência [28]. O sistema é modelado apenas pelo hamiltoniano de Heisenberg isotrópico e utiliza-se condições periódicas de contorno.

Daqui em diante, os operadores de spins, que apresentam dimensão de momento angular,  $\hbar$ , serão substituídos por vetores com a mesma dimensão e, assumiremos que seus módulos são iguais a  $\hbar S$ , isto é, faremos a seguinte transformação

$$\vec{S}_i \rightarrow \hbar S \hat{S}_i \quad (3.15)$$

onde  $S$  é adimensional e os  $\hat{S}_i$  são versores, ou seja, tem-se o vínculo  $|\hat{S}_i|^2 = \hat{S}_i \cdot \hat{S}_i = 1$ .

Fazendo a transformação (3.15) na equação (2.24), obtêm-se o campo efetivo, ou seja,

$$\vec{B}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij} S}{\gamma \hbar} \hat{S}_j + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0 \gamma \hbar S}{4\pi a_0^3} \left[ \frac{3(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij} - \hat{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \vec{B}_i^{ext} \quad (3.16)$$

E a equação (3.14) é reescrita como

$$\frac{d\hat{S}_n}{dt} = \gamma \hat{S}_n \times \vec{B}_n \quad (3.17)$$

Ainda com essa transformação, o hamiltoniano (2.27) torna-se

$$\begin{aligned} H &= -\frac{JS^2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + \frac{\mu_0 \gamma^2 \hbar^2 S^2}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - 3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \gamma \hbar S \sum_{i=1}^N \hat{S}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} \\ &= -\frac{JS^2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + \frac{\mu_0 g^2 \mu_B^2 S^2}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - 3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - g \mu_B S \sum_{i=1}^N \hat{S}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} \end{aligned}$$

Definindo o parâmetro da interação dipolar como

$$D = \frac{\mu_0 g^2 \mu_B^2}{4\pi a_0^3} \quad (3.18)$$

que possui dimensão de energia, ou seja, [J], obtêm-se

$$H = -\frac{JS^2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + \frac{DS^2}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - 3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - g\mu_B S \sum_{i=1}^N \hat{S}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} \quad (3.19)$$

o modelo de Heisenberg no limite clássico, incluindo anisotropia de forma e a interação com um campo externo.

A seguir, escreveremos as grandezas adimensionais correspondentes, a fim de tornar o sistema de equações (3.17) integrável do ponto de vista computacional. Iniciamos reescrevendo (3.19) como se segue

$$\begin{aligned} H &= -\frac{JS^2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + \frac{DS^2}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - 3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - g\mu_B S \sum_{i=1}^N \hat{S}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} \\ &= J \left\{ -\frac{S^2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + \frac{1}{2} \frac{DS^2}{J} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - 3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \frac{g\mu_B S}{J} \sum_{i=1}^N \hat{S}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} \right\} \end{aligned}$$

onde o termo entre chaves pode ser identificado como a hamiltoniana adimensional  $H'$ .

$$H = JH' \quad (3.20)$$

Pela equação (2.26), nota-se que,

$$\vec{B}_n = -\frac{\partial H}{\partial \vec{\mu}_n} = -\frac{J}{\gamma \hbar S} \frac{\partial H'}{\partial \hat{S}_n} = \frac{J}{\gamma \hbar S} \vec{b}_n \quad (3.21)$$

onde  $\vec{b}_n$  é o campo efetivo adimensional, dado por

$$\vec{b}_i = \frac{\gamma \hbar S}{J} \left\{ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar} \hat{S}_j + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0 \gamma \hbar}{4\pi a_0^3} \left[ \frac{3(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})\hat{r}_{ij} - \hat{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \vec{B}_i^{ext} \right\}$$

ou seja,

$$\vec{b}_i = S \left( \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N J'_{ij} \hat{S}_j + \frac{D}{J} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{3(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})\hat{r}_{ij} - \hat{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \frac{g\mu_B}{J} \vec{B}_i^{ext} \right) \quad (3.22)$$

onde definimos  $J'_{ij} = J_{ij}/J$ , e de acordo com (2.8), temos que

$$J'_{ij} = J'_{ji} = \begin{cases} 1, & \text{se } i, j \text{ são primeiros vizinhos} \\ 0, & \text{para demais casos} \end{cases} \quad (3.23)$$

Finalmente, a equação que descreve a dinâmica do sistema pode ser escrita numa forma adimensional, substituindo (3.21) em (3.17), obtêm-se

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{S}_n}{dt} &= \gamma \hat{S}_n \times \vec{B}_n = \frac{J}{\hbar S} \hat{S}_n \times \vec{b}_n \\ \frac{d\hat{S}_n}{d\tau} &= \hat{S}_n \times \vec{b}_n \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde definiu-se

$$d\tau = \frac{J}{\hbar S} dt \quad (3.25)$$

o incremento de tempo computacional, adimensional.

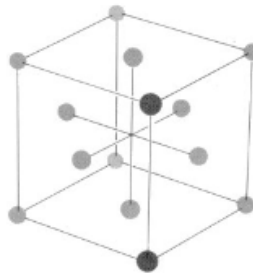
O fator de conversão entre intervalos de tempo, computacional e real, é dado por

$$\Delta t = \frac{\hbar S}{J} \Delta \tau \quad (3.26)$$

Vale ressaltar que a dinâmica de spins é um método microcanônico, pois a energia é conservada durante a integração das equações de movimento.

### 3.3 ESTIMATIVA DO NÚMERO TOTAL DE SPINS NUM NANODISCO COM DIMENSÕES TÍPICAS

Embora a solução aproximada da equação (3.24) possa ser obtida através de algum método numérico, especificando uma configuração inicial de spins, não se mencionou nada sobre o número total de spins que constituem o nanodisco. A seguir é feita uma estimativa para a quantidade de spins presentes num nanodisco de dimensões típicas, com diâmetro  $d = 200[nm]$  e espessura  $l = 20[nm]$ , feito de Py-79, ou seja, ( $Fe_{21}Ni_{79}$ ). De acordo com [29], esse material apresenta uma estrutura cúbica de face centrada (rede FCC), cujo parâmetro de rede de uma célula convencional é  $a_0 = 0.355 [nm]$ . Lembre-se que o número de coordenação, ou seja, o número de primeiros vizinhos, numa rede FCC, é  $z = 12$ .

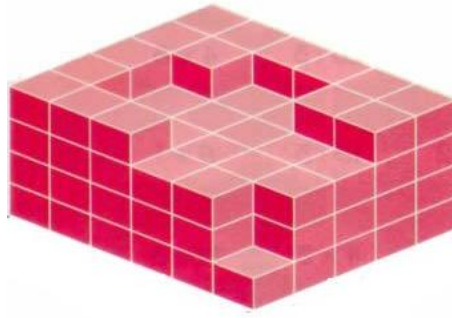


**Figura 3.1** – Célula convencional de uma rede FCC, suas arestas medem  $a_0$ . Figura retirada da referência [26]

Para uma estimativa é razoável aproximar o disco por um quadrado de lado  $d$  e espessura  $l$ . Para efeitos de cálculo usaremos o parâmetro de rede  $a_0 = 0.4[nm]$ . Para contar o número de spins, precisamos primeiro contar o número de células convencionais de parâmetro de rede  $a_0$ , que são necessárias para ocupar uma caixa de dimensões  $200 \times 200 \times 20[nm]^3$ .

Multiplicando-se o números de células que podem ser dispostas, lado a lado, ao longo das direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , obtemos que o número total de células convencionais é

$$N_{cel} = \frac{200}{0.4} * \frac{200}{0.4} * \frac{20}{0.4} = 12.5 * 10^6$$



**Figura 3.2** – *Particionamento de uma caixa em células*

Como cada célula convencional contribui com  $(1/8) * 8 + (1/2) * 6 = 4$  spins,  $(1/8$  em cada vértice e  $1/2$  em cada face) o número total de spins na caixa é

$$N_{spins} = 4 * N_{cel} = 50 * 10^6$$

Este resultado superestima o número de spins no nanodisco, porque este ainda não foi “recortado”, mas mesmo descontando os spins fora do disco, o resultado continua impressionando. Com essa estimativa vemos que o número de equações que temos que integrar é muito grande. Isso faz com que um nanodisco, de dimensões típicas e com parâmetros reais, seja difícil de ser tratado mesmo computacionalmente. Ressalta-se que a limitação não está na Dinâmica de Spins, que é uma poderosa ferramenta e se aplica tanto a sistemas magnéticos infinitos ou finitos (com ou sem condições periódicas de contorno), seja eles materiais ferro ou antiferromagnético. Conclui-se que a simulação de um nanodisco via Dinâmica de Spins torna-se inviável, sendo necessário buscar outros métodos ou fazer outras aproximações.

### 3.4 SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA

Micromagnetismo é uma teoria de campo dos sistemas magnéticos, que trata semi-classicamente materiais ferromagnéticos na escala de comprimento que vai desde algumas dezenas de nanômetros até algumas centenas de micrômetros. Tais sistemas tornariam-se complexos demais se fossem tratados através da Mecânica Quântica. O micromagnetismo descreve uma amostra magnética através de um campo clássico de vetores magnetização  $\vec{M}(\vec{r}, t)$ , que são as médias espaciais dos momentos magnéticos atômicos  $\vec{\mu}$ . Portanto, essa teoria não fornece informações sobre a distribuição local dos momentos atômicos, mas apenas sobre a magnetização local. Geralmente, procura-se determinar uma configuração de equilíbrio da magnetização para um dado sistema, sendo a evolução temporal do campo magnetização governada pela equação de Landau-Lifshitz-Gilbert <sup>1</sup>, que descreve a precessão amortecida do vetor magnetização local em torno de um campo magnético efetivo local, ficando estes dois vetores paralelos no equilíbrio termodinâmico [30].

A formulação contínua do micromagnetismo é dificultada porque a equação L.L.G é não-linear e, em geral só pode ser resolvida numericamente. Em simulações micromagnéticas, o sistema é particionado em células, cada qual contendo muitos momentos atômicos. Na figura (3.3) encontra-se esquematizada uma discretização em duas dimensões tomando uma rede quadrada para facilitar a visualização. Em geral, a discretização do material em células não precisa envolver necessariamente uma rede cúbica.

Em cada um desses volumes, “clusters”, existe um vetor magnetização local, [A/m], dada por

$$\vec{M}_i = \frac{1}{v_{cel}} \sum_k \vec{\mu}_k^{atom} = \frac{1}{v_{cel}} \vec{m}_i \quad (3.27)$$

onde  $v_{cel}$  é o volume da célula de trabalho e  $\vec{m}_i$  é o momento magnético da célula.

A discretização do material não é arbitrária ou conveniente. O volume da célula de trabalho deve ser pequeno o suficiente para que os momentos atômicos no seu interior estejam prati-

<sup>1</sup> Essa equação é discutida no apêndice A.

camente alinhados e, ao mesmo tempo, grande se comparado com as distâncias interatômicas, para conter muitos momentos atômicos.

O comprimento de troca fornece um “indicativo” do alcance da interação de troca, ou seja, até qual distância essa interação consegue manter o alinhamento dos momentos atômicos numa dada direção. O comprimento de troca [30], dado por,

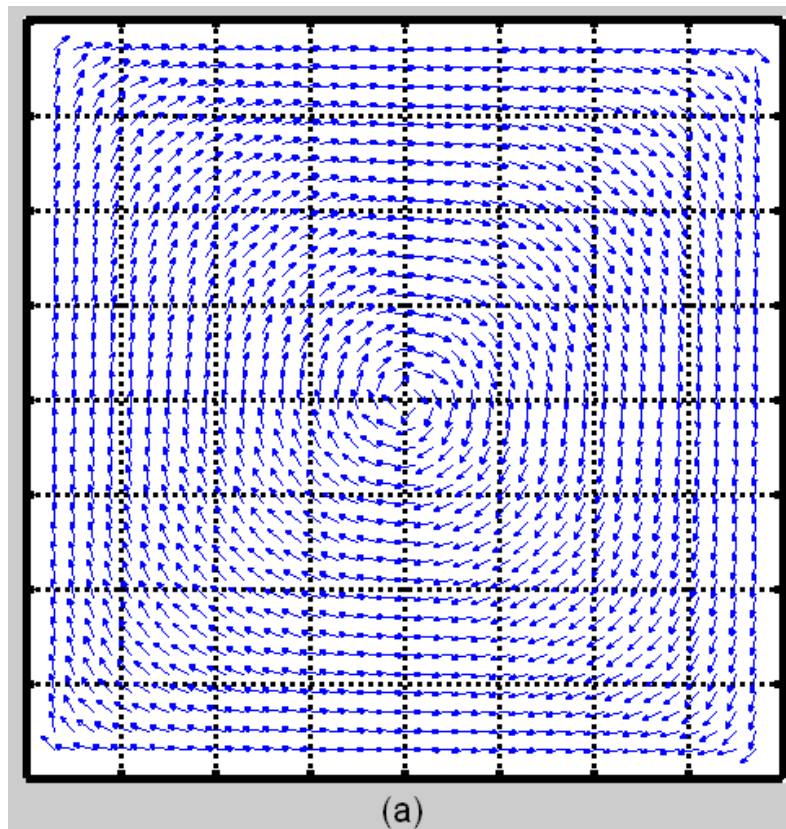
$$\lambda_{exc} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \quad (3.28)$$

depende apenas de parâmetros intrínsecos do material, denominados magnetização de saturação  $M_s$  e a constante de troca  $A$ , Por exemplo, para Py-79,  $A = 13 * 10^{-12} [J/m]$  e  $M_s = 8.6 * 10^5 [A/m]$ , fornecendo  $\lambda_{exc} \approx 5.3 [nm]$ .

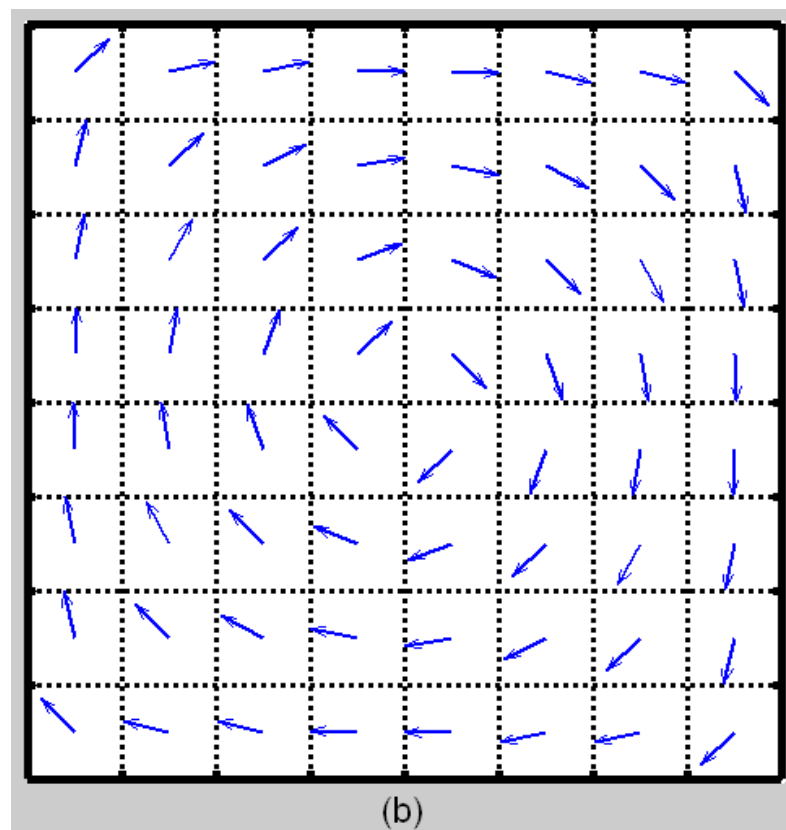
Se o tamanho da célula de trabalho é menor ou no máximo igual ao comprimento de troca,  $a \leq \lambda_{exc}$ , então a interação de troca é forte o suficiente para manter o alinhamento dos momentos atômicos em cada célula, ou seja, a magnetização está saturada. Como as células apresentam aproximadamente o mesmo número de momentos atômicos, é assumido que os vetores magnetização variam apenas suas direções de uma célula para outra, mantendo seus módulos constantes. Então, pode-se escrever os momentos magnéticos das células como

$$\vec{m}_i = v_{cel} \vec{M}_i = v_{cel} M_s \hat{m}_i = m_{cel} \hat{m}_i \quad (3.29)$$

onde  $\hat{m}_i$  é um versor na direção e sentido dessa saturação. Portanto, na aproximação micro-magnética, a discretização do material é ditada pelo comprimento de troca.



(a) Sistema real, constituído por muitos momentos atômicos



(b) Sistema equivalente do ponto de vista micromagnético, os vetores são as médias espaciais dos momentos atômicos nas células

**Figura 3.3** – Representação esquemática do método micromagnético



As interações magnéticas permanecem essencialmente as mesmas, porém ao modificar o parâmetro de rede, devemos renormalizar as constantes das interações.

A seguir definimos as interações entre as células. Partindo do limite contínuo do modelo de Heisenberg isotrópico sobre um rede cúbica simples [29],

$$H_{exc} = A \int dV (|\vec{\nabla} m_x|^2 + |\vec{\nabla} m_y|^2 + |\vec{\nabla} m_z|^2) \quad (3.30)$$

Para o momento magnético da célula localizada na origem, os primeiros vizinhos são  $\pm a\hat{x}$ ,  $\pm a\hat{y}$  e  $\pm a\hat{z}$ . A energia de troca dessa célula, na aproximação de mais baixa ordem no método de diferenças finitas para a equação (3.30), é

$$H_{exc}^{cel} = Av_{cel} \left[ \left( \frac{\vec{m}(a\hat{x}) - \vec{m}(0)}{a} \right)^2 + \left( \frac{\vec{m}(a\hat{y}) - \vec{m}(0)}{a} \right)^2 + \left( \frac{\vec{m}(a\hat{z}) - \vec{m}(0)}{a} \right)^2 \right] \quad (3.31)$$

onde usou-se apenas esses três vizinhos para evitar dupla contagem ao somar a contribuição de todas as células. Usando  $|\vec{A} - \vec{B}|^2 = |\vec{A}|^2 - 2\vec{A} \cdot \vec{B} + |\vec{B}|^2$  e agrupando os termos, obtemos

$$H_{exc}^{cel} = Aa [|\vec{m}(a\hat{x})|^2 + |\vec{m}(a\hat{y})|^2 + |\vec{m}(a\hat{z})|^2 + 3|\vec{m}(0)|^2 - 2\vec{m}(0) \cdot \{\vec{m}(a\hat{x}) + \vec{m}(a\hat{y}) + \vec{m}(a\hat{z})\}]$$

Mas os vetores magnetização que geram  $\vec{m} = \frac{1}{M_S} \vec{M}$  foram assumidos estar saturados a  $M_S$ . Isto significa que cada  $\vec{m}$  é um versor, então a contribuição para a energia por célula é

$$H_{exc}^{cel} = Aa [6 - 2\hat{m}(0) \cdot (\hat{m}(a\hat{x}) + \hat{m}(a\hat{y}) + \hat{m}(a\hat{z}))] \quad (3.32)$$

onde pode-se ver que a contribuição por ligação, (nas direções x,y,z) é

$$H_{exc}^{lig-x} = 2Aa [3 - \hat{m}(0) \cdot \hat{m}(a\hat{x})] \quad (3.33)$$

Isso demonstra que o acoplamento de exchange efetivo entre células, é

$$J_{cel} = 2Aa \quad (3.34)$$

Assim, a hamiltoniana micromagnética da interação de troca é escrita como

$$H_{exc} = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j \quad (3.35)$$

A hamiltoniana da interação dipolar é

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \frac{\mu_0 m_{cel}^2}{4\pi a^3} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right) \quad (3.36)$$

onde foi substituído  $\vec{m}_k = m_{cel} \hat{m}_k$ , de acordo com a relação (3.29). Definindo o parâmetro da interação dipolar como

$$D_{cel} = \frac{\mu_0 m_{cel}^2}{4\pi a^3} = \frac{\mu_0 M_S^2 a^3}{4\pi} = \frac{a^2}{4\pi} \left( \frac{\mu_0 M_S^2}{2A} \right) 2Aa \quad (3.37)$$

e usando a relação do comprimento de exchange (3.28), obtêm-se

$$D_{cel} = \frac{1}{4\pi} \left( \frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 J_{cel} \quad (3.38)$$

A Hamiltoniana de Zeeman é escrita como

$$H_{ext} = -m_{cel} \mu_0 M_S \left( \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} \right) \quad (3.39)$$

onde definindo-se o campo externo adimensional,

$$\vec{b}_i^{ext} = \frac{1}{\mu_0 M_S} \vec{B}_i^{ext} \quad (3.40)$$

Note-se que a constante da interação Zeeman, também pode ser escrita em termos de  $J_{cel}$ , ou seja,

$$m_{cel} \mu_0 M_S = \mu_0 M_S^2 a^3 = a^2 \left( \frac{\mu_0 M_S^2}{2A} \right) 2Aa = \left( \frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 J_{cel} \quad (3.41)$$

É fácil verificar que todas as constantes das interações têm dimensão de energia, [J]. A hamiltoniana micromagnética do sistema é dada pela soma de todas as contribuições,

$$\begin{aligned}
H = J_{cel} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{m_{cel} \mu_0 M_s}{J_{cel}} \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} + \right. \\
\left. + \frac{1}{2} \frac{D_{cel}}{J_{cel}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\} \quad (3.42)
\end{aligned}$$

ou, substituindo as constantes (3.38) e (3.41), obtêm-se

$$\begin{aligned}
H = J_{cel} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \left( \frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} + \right. \\
\left. + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi} \left( \frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \left[ \frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\} \quad (3.43)
\end{aligned}$$

O termo entre chaves é a hamiltoniana adimensional do sistema

$$H = J_{cel} H' \quad (3.44)$$

O campo efetivo local  $\vec{B}_i$ , medido em [T], é obtido derivando-se a hamiltoniana em relação às componentes dos momentos magnéticos das células  $\vec{m}_i$ , ou seja,

$$\vec{B}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i} = -\frac{J_{cel}}{m_{cel}} \frac{\partial H'}{\partial \hat{m}_i} = \frac{J_{cel}}{m_{cel}} \vec{b}_i \quad (3.45)$$

O campo efetivo local adimensional é dado por

$$\vec{b}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N C_{ij} \hat{m}_j + \frac{1}{4\pi} \left( \frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{3(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})\hat{r}_{ij} - \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} \right] + \left( \frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \vec{b}_i^{ext} \quad (3.46)$$

onde a constante  $C_{ij}$  é tal que

$$C_{ij} = C_{ji} = \begin{cases} 1, & \text{se } i, j \text{ são primeiros vizinhos} \\ 0, & \text{para demais casos} \end{cases} \quad (3.47)$$

A dinâmica do micromagnetismo é governada por equações diferenciais fenomenológicas. A equação de Landau-Lifshitz (L.L) e a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (L.L.G) são discutidas no Apêndice A. Neste trabalho, usamos a versão discreta da equação L.L. dada por

$$\frac{d\vec{m}_i}{dt} = \gamma \vec{m}_i \times \vec{B}_i - \frac{\alpha |\gamma|}{m_i} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{B}_i) \quad (3.48)$$

onde a constante fenomenológica,  $\alpha$ , denominado parâmetro de damping, é característico do material. A constante  $\gamma$  pode ser positiva ou negativa, assim, escrevemos  $\gamma = \pm |\gamma|$ . Note-se que a razão giromagnética  $\gamma$  é negativa para partículas com carga negativa. Por exemplo, para elétrons,

$$\gamma = \frac{g\mu_B}{\hbar} = \frac{ge\hbar}{2m_e\hbar} = -\frac{|e|}{m_e} \quad (3.49)$$

Substituindo as equações (3.29) e (3.45) na equação (3.48), obtêm-se

$$\frac{d\hat{m}_i}{dt} = |\gamma| \frac{J_{cel}}{m_{cel}} [\pm \hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i)] \quad (3.50)$$

$$= \omega_0 [\pm \hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i)] \quad (3.51)$$

A versão adimensional é

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = \pm \hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \quad (3.52)$$

onde definiu-se

$$d\tau = \omega_0 dt \quad (3.53)$$

o incremento de tempo computacional, adimensional. Note-se que  $\omega_0$  têm dimensão de inverso de tempo, [1/s], e pode ser reescrito como

$$\omega_0 = |\gamma| \frac{J_{cel}}{m_{cel}} = \frac{2aA}{M_s a^3} |\gamma| \left[ \frac{\mu_0 M_s}{\mu_0 M_s} \right] = \left[ \frac{2A}{\mu_0 M_s^2} \right] \frac{\mu_0 M_s |\gamma|}{a^2} = \left( \frac{\lambda_{exc}}{a} \right)^2 \mu_0 M_s |\gamma| \quad (3.54)$$

O fator de conversão entre intervalos de tempo, computacional e real, é dado por

$$\Delta t = \frac{1}{\omega_0} \Delta \tau \quad (3.55)$$

### 3.5 INTEGRAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE MOVIMENTO

Equações diferenciais não-lineares ordinárias são resolvidas numericamente. Na referência [31] pode-se encontrar os principais métodos numéricos bem como discussões sobre os possíveis erros em tais procedimentos.

Um sistema de equações diferenciais de primeira ordem, como as equações (3.52), apresenta a seguinte estrutura

$$\frac{d\vec{m}^x}{d\tau} = \vec{f}^x(\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z, \tau) \quad (3.56)$$

$$\frac{d\vec{m}^y}{d\tau} = \vec{f}^y(\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z, \tau) \quad (3.57)$$

$$\frac{d\vec{m}^z}{d\tau} = \vec{f}^z(\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z, \tau) \quad (3.58)$$

onde os vetores  $\vec{m}^a$  são de comprimento  $N$ , as componentes dos vetores  $\vec{f}^a$  são funções das componentes dos campos efetivos locais. Como existem  $N$  sítios, para integrar esse sistema temos que especificar  $3N$  condições iniciais,

$$\vec{m}^x(\tau_0) = \vec{m}^{x0} \quad (3.59)$$

$$\vec{m}^y(\tau_0) = \vec{m}^{y0} \quad (3.60)$$

$$\vec{m}^z(\tau_0) = \vec{m}^{z0} \quad (3.61)$$

Queremos determinar os valores aproximados dos vetores  $\vec{m}^a$  nos instantes  $\tau_n = \tau_0 + n\Delta$ , onde  $n = 1, 2, \dots$ ,  $\Delta$  é o incremento de tempo, em métodos de diferenças finitas,  $d\tau \rightarrow \Delta$ .

Para resolver este problema de valor inicial existem vários métodos numéricos, um dos mais utilizados é o método de Kunge-Kutta, por ser suficientemente preciso e relativamente fácil de se implementá-lo computacionalmente. Para passar de  $\tau_n$  para  $\tau_{n+1}$  têm-se o seguinte algoritmo

$$\vec{m}_{n+1}^a = \vec{m}_n^a + \frac{\Delta}{6}(\vec{C}_{n1}^a + 2\vec{C}_{n2}^a + 2\vec{C}_{n3}^a + \vec{C}_{n4}^a) \quad (3.62)$$

onde

$$\vec{C}_{n1}^a = \vec{f}^a(\vec{m}_n^a, \tau_n) \quad (3.63)$$

$$\vec{C}_{n2}^a = \vec{f}^a(\vec{m}_n^a + 0.5 \Delta \vec{C}_{n1}^a, \tau_n + 0.5\Delta) \quad (3.64)$$

$$\vec{C}_{n3}^a = \vec{f}^a(\vec{m}_n^a + 0.5 \Delta \vec{C}_{n2}^a, \tau_n + 0.5\Delta) \quad (3.65)$$

$$\vec{C}_{n4}^a = \vec{f}^a(\vec{m}_n^a + \Delta \vec{C}_{n3}^a, \tau_n + \Delta) \quad (3.66)$$

Supondo que uma configuração inicial seja especificada, calcula-se o campo efetivo dessa configuração e os coeficientes  $\vec{C}_{n1}^a$  são determinados. Antes que um passo de tempo seja dado, é necessário computar o campo efetivo em instantes intermediários, ou seja, determinar os coeficientes  $\vec{C}_{n2}^a$ ,  $\vec{C}_{n3}^a$  e  $\vec{C}_{n4}^a$ .

Nos **métodos de passo simples** ou **métodos de partida**, como o método de Runge-Kutta, o valor aproximado da solução em qualquer instante depende somente dos dados no instante precedente. Os métodos que usam informação em mais de um instante, além do último, são denominados **métodos de passo múltiplos**, como exemplo, cita-se o método de previsão e correção de Adams-Bashforth-Moulton. Um vez que as configurações  $\vec{m}_{n-3}^a$ ,  $\vec{m}_{n-2}^a$ ,  $\vec{m}_{n-1}^a$  e  $\vec{m}_n^a$  são conhecidas, calcula-se  $\vec{f}_{n-3}^a$ ,  $\vec{f}_{n-2}^a$ ,  $\vec{f}_{n-1}^a$  e  $\vec{f}_n^a$ . Em seguida, usa-se o algoritmo de Adams-Bashforth (previsão)

$$\vec{m}_{n+1}^a = \vec{m}_n^a + \frac{\Delta}{24}(55 \vec{f}_n^a - 59 \vec{f}_{n-1}^a + 37 \vec{f}_{n-2}^a - 9 \vec{f}_{n-3}^a) \quad (3.67)$$

para obter um valor aproximado de  $\vec{m}_{n+1}^a$ . Em seguida, calcula-se  $\vec{f}_{n+1}^a$  e usa-se o algoritmo de Adams-Moulton (correção)

$$\vec{m}_{n+1}^a = \vec{m}_n^a + \frac{\Delta}{24}(9 \vec{f}_{n+1}^a + 19 \vec{f}_n^a - 5 \vec{f}_{n-1}^a + \vec{f}_{n-2}^a) \quad (3.68)$$

que a essa altura não é implícito, para obter um valor mais preciso de  $\vec{m}_{n+1}^a$ .

Quando não se conhece outras configurações além da configuração inicial, uma forma de proceder é usar um método de passos simples, ou seja, um método de partida de precisão comparável ao método de passos múltiplos, para determinar as configurações iniciais necessárias. Assim, no caso do método de previsão e correção, pode-se usar o método de Runge-Kutta de quarta ordem para calcular as configurações iniciais. Este procedimento foi utilizado neste trabalho. O método de previsão e correção mostrou-se bem mais rápido do que o método de

Kunge-Kutta. O método de Runge-kutta de quarta ordem exige quatro cálculos do campo efetivo em cada passo, enquanto que o método de previsão e correção exige apenas dois. O cálculo do campo efetivo é demorado devido ao caráter de longo alcance do campo dipolar.

## 4 *ESTRUTURA DE VÓRTICES MAGNÉTICOS E MOVIMENTO GIROTRÓPICO VIA EQUAÇÃO DE THIELE*

Neste capítulo, discute-se vórtices planares e a sua origem em sistemas de baixa dimensionalidade com anisotropia planar muito forte, através da revisão de uma teoria clássica de campos. No limite termodinâmico, o surgimento de vórtices em tais sistemas sempre ocorre em pares vórtice-antivórtice. No próximo capítulo, veremos que ao considerar o tamanho finito de um sistema e a presença da anisotropia de forma, então o estado fundamental de um nanodisco magnético poderá corresponder a um único vórtice. Neste capítulo também é feito um estudo qualitativo do modo girotrópico em nanodiscos magnéticos, através da solução da geométrica da equação de Thiele.

### 4.1 O LIMITE CONTÍNUO

No limite clássico, a versão discreta do modelo de Heisenberg anisotrópico para um material ferromagnético  $J > 0$ , pode ser escrito como

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + (1 - \lambda) S_i^z S_j^z] \quad (4.1)$$

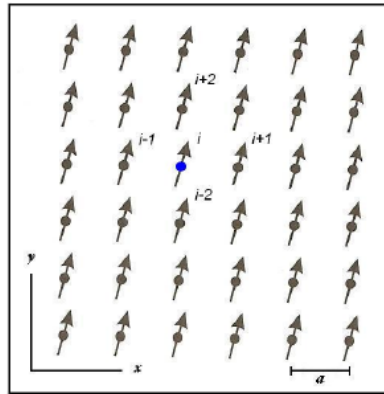
em que o parâmetro de anisotropia é tal que

- se  $\lambda = 0$  têm-se o modelo isotrópico



- se  $\lambda = 1$  têm-se os modelos XY e rotor planar (os vetores são bidimensionais)
- se  $0 < \lambda < 1$  têm-se o modelo de plano-fácil
- se  $\lambda < 0$  têm-se o modelo de eixo-fácil

Numa rede bidimensional quadrada, considere o spin localizado no sítio  $i$  interagindo com seus primeiros vizinho, na horizontal  $\vec{S}_{i\pm 1}$  e na vertical  $\vec{S}_{i\pm 2}$ .



**Figura 4.1** – Uma rede bidimensional quadrada, mostrando os primeiros vizinhos do sítio  $i$ . Figura retirada da referência [32].

Então definindo os elementos de interação entre primeiros vizinhos [33]

$$T_i^a = S_i^a(S_{i+1}^a + S_{i-1}^a) + S_i^a(S_{i+2}^a + S_{i-2}^a) \quad (4.2)$$

onde  $a = x, y, z$ , podemos aproximar as duas somatórias por uma integral dupla, ou seja

$$H = -\frac{J}{2} \int_S \frac{dxdy}{a^2} (T^x + T^y + (1 - \lambda)T^z) \quad (4.3)$$

onde omitiu-se o índice  $i$  pois qualquer sítio pode ser considerado.  $a$  é o parâmetro de rede e a integração é feita sobre a superfície do material.

Para baixas temperaturas, as flutuações térmicas são insignificantes e as variações nas direções dos spins são graduais, conseqüentemente, pode-se expandir as componentes de spins dos primeiros vizinhos em série de Taylor, conservando apenas termos até a segunda ordem [32].

Dessa forma,

$$S_{i+1}^a = S_i^a + a \frac{\partial S_i^a}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^a}{\partial x^2} \quad (4.4)$$

$$S_{i-1}^a = S_i^a - a \frac{\partial S_i^a}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^a}{\partial x^2} \quad (4.5)$$

$$S_{i+2}^a = S_i^a + a \frac{\partial S_i^a}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^a}{\partial y^2} \quad (4.6)$$

$$S_{i-2}^a = S_i^a - a \frac{\partial S_i^a}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^a}{\partial y^2} \quad (4.7)$$

Substituindo em  $T_i^a$ , as derivadas primeiras se cancelam, e obtêm-se

$$T_i^a = 4(S_i^a S_i^a) + a^2 \left( \frac{\partial^2 S_i^a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S_i^a}{\partial y^2} \right) S_i^a \quad (4.8)$$

e levando este resultado na equação(4.3), têm-se

$$\begin{aligned} H = & -\frac{J}{2} \int \frac{dxdy}{a^2} 4[(S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 - \lambda(S^z)^2] + \\ & -\frac{J}{2} \int \frac{dxdy}{a^2} a^2 \sum_{a=1}^3 \left( \frac{\partial^2 S^a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S^a}{\partial y^2} \right) S^a + \\ & + \frac{\lambda J}{2} \int \frac{dxdy}{a^2} a^2 \left( \frac{\partial^2 S^z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S^z}{\partial y^2} \right) S^z \end{aligned} \quad (4.9)$$

Ou seja,

$$\begin{aligned} H = & -2J \int \frac{dxdy}{a^2} [(S)^2 - \lambda(S^z)^2] + \frac{\lambda J}{2} \int dxdy \left( \frac{\partial^2 S^z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S^z}{\partial y^2} \right) S^z + \\ & -\frac{J}{2} \sum_{a=1}^3 \int dxdy \left( \frac{\partial^2 S^a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S^a}{\partial y^2} \right) S^a \end{aligned} \quad (4.10)$$

Notando que,

$$\int \int dydx \left( \frac{\partial^2 S^a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S^a}{\partial y^2} \right) S^a = \int dy \left( \int dx \frac{\partial^2 S^a}{\partial x^2} S^a \right) + \quad (4.11)$$

$$= + \int dx \left( \int dy \frac{\partial^2 S^a}{\partial y^2} S^a \right) \quad (4.12)$$

e usando a técnica de integração por partes

$$\int db \frac{\partial^2 S^a}{\partial b^2} S^a = - \int db \left( \frac{\partial S^a}{\partial b} \right)^2 \quad (4.13)$$

obtêm-se,

$$\int \int dydx \left( \frac{\partial^2 S^a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S^a}{\partial y^2} \right) S^a = - \int \int dydx \left[ \left( \frac{\partial S^a}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial S^a}{\partial y} \right)^2 \right] \quad (4.14)$$

$$= - \int \int dydx |\vec{\nabla} S^a|^2 \quad (4.15)$$

E, portanto,

$$H = 2\lambda J \int \frac{dxdy}{a^2} (S^z)^2 - \frac{\lambda J}{2} \int dxdy |\vec{\nabla} S^z|^2 + \quad (4.16)$$

$$+ \frac{J}{2} \int dxdy \sum_{a=1}^3 |\vec{\nabla} S^a|^2$$

onde o primeiro termo, que representa a energia do estado fundamental, foi descartado.

Isso pode ser escrito da seguinte forma

$$H = 2\lambda J \int \frac{dxdy}{a^2} (S^z)^2 + (1 - \lambda) \frac{J}{2} \int dxdy |\vec{\nabla} S^z|^2 + \quad (4.17)$$

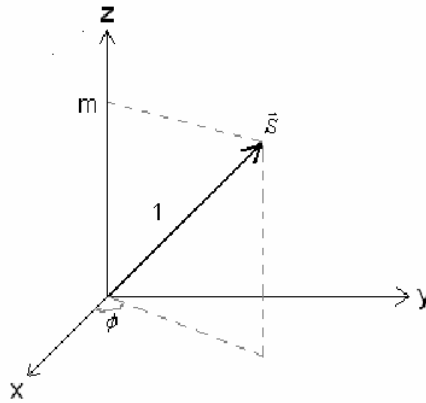
$$+ \frac{J}{2} \int dxdy \sum_{a=1}^2 |\vec{\nabla} S^a|^2$$

Uma vez que existe um vínculo entre as componentes de spin  $S^2 = \text{constante} \equiv 1$ , pode-se parametrizar o campo vetorial de spins por dois campos escalares. Em coordenadas

cilíndricas, o vetor de spin pode ser parametrizado da seguinte forma

$$\vec{S} = \hat{x} \sqrt{1-m^2} \cos \phi + \hat{y} \sqrt{1-m^2} \sin \phi + \hat{z} m \quad (4.18)$$

onde  $\phi$  é o ângulo polar e  $m$  é a projeção do spin ao longo do eixo-z, veja a figura (4.2).



**Figura 4.2** – Parametrização das componentes de spin através dos parâmetros  $\phi$  e  $m$ .

Expandindo os somatórios na hamiltoniana (4.17),

$$\begin{aligned} H = & 2\lambda J \int \frac{dxdy}{a^2} (S^z)^2 + \\ & + (1-\lambda) \frac{J}{2} \int dxdy \left[ \left( \frac{\partial S^z}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial S^z}{\partial y} \right)^2 \right] \\ & + \frac{J}{2} \int dxdy \left[ \left( \frac{\partial S^x}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial S^x}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial S^y}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial S^y}{\partial y} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.19)$$

Agora deve-se substituir a parametrização (4.18) na hamiltoniana (4.19). Calculando as derivadas parciais obtêm-se

$$\frac{\partial S^x}{\partial \alpha} = - \left[ \frac{m}{(1-m^2)^{1/2}} \cos \phi \left( \frac{\partial m}{\partial \alpha} \right) + (1-m^2)^{1/2} \sin \phi \left( \frac{\partial \phi}{\partial \alpha} \right) \right] \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial S^y}{\partial \alpha} = - \left[ \frac{m}{(1-m^2)^{1/2}} \sin \phi \left( \frac{\partial m}{\partial \alpha} \right) - (1-m^2)^{1/2} \cos \phi \left( \frac{\partial \phi}{\partial \alpha} \right) \right] \quad (4.21)$$

$$\frac{\partial S^z}{\partial \alpha} = \frac{\partial m}{\partial \alpha} \quad (4.22)$$

onde  $\alpha = x, y, z$

Elevando ao quadrado essas derivadas, substituindo na equação (4.19) e simplificando, obtêm-se

$$\begin{aligned} H = & 2\lambda J \int \frac{dx dy}{a^2} m^2 + (1-\lambda) \frac{J}{2} \int dx dy \left[ \left( \frac{\partial m}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial m}{\partial y} \right)^2 \right] + \\ & + \frac{J}{2} \int dx dy \left\{ \frac{m^2}{1-m^2} \left[ \left( \frac{\partial m}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial m}{\partial y} \right)^2 \right] + (1-m^2) \left[ \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 \right] \right\} \end{aligned}$$

Essa hamiltoniana também pode ser escrita como

$$\begin{aligned} H = & 2\lambda J \int \frac{dx dy}{a^2} m^2 + (1-\lambda) \frac{J}{2} \int dx dy |\vec{\nabla} m|^2 + \\ & + \frac{J}{2} \int dx dy \left\{ \frac{m^2}{1-m^2} |\vec{\nabla} m|^2 + (1-m^2) |\vec{\nabla} \phi|^2 \right\} \quad (4.23) \end{aligned}$$

Numa rede bidimensional a densidade hamiltoniana  $h$  é definida por

$$H = \int_S d^2 r h \quad (4.24)$$

Comparando (4.24) e (4.23), encontra-se que

$$h = \frac{J}{2} \left[ \frac{4\lambda}{a^2} m^2 + (1-\lambda) |\vec{\nabla} m|^2 + \frac{m^2}{1-m^2} |\vec{\nabla} m|^2 + (1-m^2) |\vec{\nabla} \phi|^2 \right] \quad (4.25)$$

é a densidade hamiltoniana correspondente ao modelo de Heisenberg anisotrópico numa rede quadrada.

Em teoria de campos, as equações de movimento de Hamilton para  $\phi$  e  $m$  são dadas por

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -\frac{\delta h}{\delta \phi} \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = +\frac{\delta h}{\delta m} \quad (4.27)$$

onde  $\phi$  e  $m$  constituem um par de variáveis canonicamente conjugadas e, o símbolo

$$\frac{\delta h}{\delta \psi} = \vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{\partial h}{\partial (\vec{\nabla} \psi)} \right] - \frac{\partial h}{\partial \psi} \quad (4.28)$$

denota a derivada funcional de  $h$  em relação a  $\psi$ .

Lembra-se que  $\lambda$  é o parâmetro de anisotropia, tal que

- se  $\lambda = 0$  têm-se o modelo isotrópico
- se  $\lambda = 1$  têm-se os modelos XY e rotor planar ( $S^z = m = 0$ )
- se  $0 < \lambda < 1$  têm-se o modelo de plano-fácil
- se  $\lambda < 0$  têm-se o modelo de eixo-fácil

A hamiltoniana (4.23) e as equações de movimento (4.26) e (4.27) constituem uma teoria de campos escalares  $(\phi, m)$  correspondentes a cada modelo.

## 4.2 VÓRTICES E ANTIVÓRTICES

Os modelos de Heisenberg bidimensionais (rede 2D) com anisotropia de plano fácil contém vórtices de spins como soluções particulares. Tais excitações topológicas surgem devido a baixa dimensionalidade e não linearidade dos modelos. Apesar destes modelos não apresentarem uma transição do tipo ordem-desordem, eles apresentam uma transição de fase do tipo topológica, conhecida como transição de fase de Kosterlitz-Thouless [3].

As excitações topológicas que surgem nestes modelos são conhecidas como **vórtices**. Os vórtices magnéticos são estados de equilíbrio nos quais a configuração de spins possui uma estrutura bem definida. Os vórtices são estruturas de spins tridimensionais, no entanto, se o sistema apresentar uma anisotropia forte o suficiente, capaz de confinar os spins num plano, então tais estruturas adquirem um aspecto bidimensional. Nos vórtices não planares os spins próximos ao centro da estrutura desenvolvem uma componente perpendicular ao plano, devido a uma singularidade neste ponto. O modelo de Heisenberg de plano-fácil apresenta ambos os tipos de vórtice, existe um valor crítico no parâmetro de anisotropia,  $\lambda_c$ , que delimita qual tipo de vórtice será estável. Para o parâmetro de anisotropia  $\lambda$  na equação (4.1), o valor crítico obtido numericamente para uma rede quadrada foi  $\lambda_c \simeq 0.28$ . No caso de grandes anisotropias  $\lambda_c < \lambda \leq 1$  apenas vórtices planares são estáveis, enquanto que, para o caso de pequenas anisotropias  $0 < \lambda < \lambda_c$  apenas vórtices não planares são estáveis [34, 35]. Os modelo XY e o modelo do rotor planar são os casos limites para uma anisotropia fortemente planar, sendo assim, apresentam apenas vórtices planares.

Para obter as soluções de vórtices planares, considera-se a densidade hamiltoniana correspondente ao modelo XY bidimensional, obtida tomando  $\lambda = 1$  na equação (4.25), ou seja,

$$h_{XY} = \frac{J}{2} \left[ \frac{4}{a^2} m^2 + \frac{m^2}{1-m^2} |\vec{\nabla} m|^2 + (1-m^2) |\vec{\nabla} \phi|^2 \right] \quad (4.29)$$

As equações de movimento para os campos escalares, são obtidas através das equações, (4.26) e (4.27), entretanto, a solução exata desse sistema de equações é muito difícil, senão impossível. Para continuar com o desenvolvimento analítico, considera-se o modelo do rotor planar, no qual os vetores de spins só apresentam duas componentes de spins, para obtê-lo toma-se  $m = 0$  na equação (4.29), que resulta em

$$h = \frac{J}{2} |\vec{\nabla} \phi|^2 \quad (4.30)$$

que é a versão contínua do modelo do rotor planar.

As equações de Hamilton são

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -\frac{\delta h}{\delta \phi} = -\vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{\partial h}{\partial (\vec{\nabla} \phi)} \right] + \frac{\partial h}{\partial \phi} \quad (4.31)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = +\frac{\delta h}{\delta m} = \vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{\partial h}{\partial (\vec{\nabla} m)} \right] - \frac{\partial h}{\partial m} \quad (4.32)$$

A densidade hamiltoniana do rotor planar não depende explicitamente de  $\phi$  nem do seu gradiente, logo

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad (4.33)$$

o ângulo  $\phi$  é uma constante de movimento. O modelo do rotor planar não apresenta dinâmica. Sabemos que nesse modelo  $m = 0$ , logo a equação (4.31) também se anula, mas desse fato resulta uma equação para  $\phi$ , ou seja,

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{\partial h}{\partial (\vec{\nabla} \phi)} \right] = 0 \quad (4.34)$$

calculando o vetor

$$\frac{\partial h}{\partial (\vec{\nabla} \phi)} = \frac{J}{2} \frac{\partial}{\partial (\vec{\nabla} \phi)} [\vec{\nabla} \phi \cdot \vec{\nabla} \phi] = J \vec{\nabla} \phi \quad (4.35)$$

e calculando o divergente desse vetor,

$$\vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{\partial h}{\partial (\vec{\nabla} \phi)} \right] = J \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \phi) = J \nabla^2 \phi \quad (4.36)$$

obtêm-se que o ângulo  $\phi$  obedece-se à equação de Laplace,

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (4.37)$$

A **vorticidade** ou **carga topológica** de uma configuração arbitrária, é definida pela integral de circulação

$$Q = \frac{1}{2\pi} \oint_C \vec{\nabla} \phi \cdot d\vec{r} \quad (4.38)$$

e será não nula apenas se a curva fechada  $C$  engloba o centro do vórtice.

Foi mostrado por Kosterlitz-Thouless [3] que os vórtices com cargas topológicas  $Q = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ , são soluções da equação de movimento do modelo do rotor planar (4.37).



Vórtices com carga topológica negativa são usualmente chamados de **antivórtices**.

É fácil verificar que soluções da forma,

$$\phi(x, y) = Q \arctan\left(\frac{y - y_0}{x - x_0}\right) + C \quad (4.39)$$

satisfazem a equação de Laplace, e também atendem ao fato de  $\phi$  ser um ângulo (arco). O ponto  $(x_0, y_0)$  é o centro do vórtice.  $C$  é uma constante arbitrária. Para  $Q = 0$ ,  $\phi(\vec{r}) = C$  representa o estado no qual todos os spins estão alinhados, este estado é degenerado porque  $C$  é arbitrário, refletindo a simetria rotacional do modelo.

Pode-se determinar a energia dos vórtices e antivórtices, calculando o gradiente da solução (4.39), obtêm-se

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}\phi &= -\hat{x} \left\{ \frac{Qy}{x^2} [1 + (y/x)^2]^{-1} \right\} + \hat{y} \left\{ \frac{Q}{x} [1 + (y/x)^2]^{-1} \right\} \\ &= \frac{Q}{x^2 + y^2} [-\hat{x}y + \hat{y}x] = \frac{Q}{r} \hat{\theta} \end{aligned}$$

Com esse resultado, calcula-se

$$|\vec{\nabla}\phi|^2 = \vec{\nabla}\phi \cdot \vec{\nabla}\phi = \frac{Q^2}{x^2 + y^2} = \frac{Q^2}{r^2} \quad (4.40)$$

note que o  $|\vec{\nabla}\phi|$  decai com  $1/r$ .

A energia dos vórtices são obtidas substituindo esse resultado na hamiltoniana do rotor planar, assim

$$E_Q = \frac{JQ^2}{2} \left[ \int_S \frac{d^2r}{r^2} \right] \propto \frac{J}{2} Q^2 \quad (4.41)$$

Note-se que a energia da configuração de vórtice depende do quadrado da carga topológica, assim ela é degenerada para vórtices e antivórtices com mesmo valor de  $|Q|$ . Quanto maior for a carga topológica mais difícil torna-se o aparecimento de tal estrutura no sistema, devido a seu alto custo energético. Obviamente, uma rotação de todos os spins em torno do eixo z não muda a energia da configuração, ou seja, a energia dos vórtices não dependem da constante  $C$  que aparece nas soluções de vórtices (4.39). A integral é feita sobre a superfície do material, e

é preciso contornar o ponto de singularidade. Se o material é finito, por exemplo um quadrado de lado  $L$ , pode se estimar a energia do sistema como

$$E_Q \approx \frac{JQ^2}{2} \left[ \int_0^{2\pi} \int_a^L \frac{r dr d\theta}{r^2} \right] = \pi J Q^2 \ln \left( \frac{L}{a} \right) \quad (4.42)$$

O valor  $a_0 = 0.24a$  (onde  $a$  é o parâmetro de rede) é mais apropriado para o limite inferior da integral, é um raio de corte introduzido na rede, já que no limite contínuo o vórtice é uma solução singular da equação de Laplace. Tal valor foi obtido numericamente para uma rede quadrada [36]. Note-se que no limite termodinâmico (sistema infinito), a divergência da energia é logarítmica.

Pelo princípio da superposição, a solução da equação de Laplace (4.37) mais geral possível deveria envolver a combinação linear das soluções de vórtices (4.39). Considere a combinação de um par vórtice-antivórtice com menor vorticidade,  $Q = \pm 1$ . Seguindo o mesmo procedimento, obtêm-se que a energia do par é finita, ou seja,

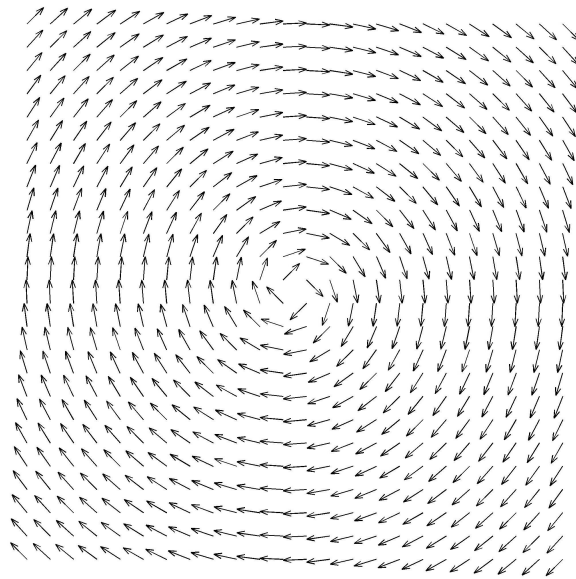
$$E_{Q=1}^{par} \approx \pi^2 J + 2\pi J \ln \left( \frac{r}{a_0} \right) \quad (4.43)$$

onde  $r$  é a distância relativa entre os centros do vórtice e do antivórtice.

Foi mostrado também por Kosterlitz-Thouless que sistemas representados pelo modelo do rotor planar apresentam **ordem topológica**, ou seja, a carga topológica desses sistemas devem ser conservadas. Portanto, os vórtices surgem nesses sistemas em pares vórtice-antivórtice. Transição KT pode ser resumida como: a baixas temperaturas, pares de vórtices-antivórtices são criados com energia aproximadamente  $\pi^2 J$ . À medida que a temperatura aumenta, o número de par vórtice-antivórtice começa a crescer e, numa temperatura crítica  $T_{KT}$ , os vórtices começam a se separar dos antivórtices, gerando partículas livres. Tais vórtices livres desordenam o sistema significativamente, levando à transição de fase.

O modelo do Rotor Planar não é adequado para analisar o comportamento dinâmico do sistema, uma vez que os spins estão confinados no plano e, em particular  $\frac{d\vec{S}}{dt} = 0$ , implicando que o campo de spins não varia no tempo. Neste caso, recorre-se aos modelos tridimensionais com anisotropia de plano fácil, onde se espera que apresentem o mesmo cenário do modelo do rotor planar, isso tem sido confirmado por simulações numéricas.

No apêndice B, são mostradas as configurações de vórtices com diferentes cargas topológicas. Considerou-se um sistema finito, pequeno e bidimensional, descrito pelo modelo de Heisenberg isotrópico, sendo a única anisotropia presente no sistema a anisotropia de forma, que origina-se da interação dipolo-dipolo. Resultados muito interessantes foram obtidos substituindo a anisotropia magnetocristalina fortemente planar pela anisotropia de forma. Por exemplo, vórtices com carga topológica  $Q = 1$  e  $C = 0, \pi$ , ver figura (4.3), minimizam a energia dipolar, ou seja, são os mais estáveis.



**Figura 4.3** – configuração de vórtice com  $Q = 1$  e  $C = 0$

No apêndice B, também é mostrado que o deslocamento desse vórtice da sua posição de equilíbrio altera a energia do sistema. Calculou-se a energia para diferentes condições iniciais, nas quais o vórtice é transladado ao longo do eixo-x, veja a figura (B.13). Obteve-se que a

dependência da energia magnetostática com a distância do núcleo do vórtice é quadrática, assim como ocorre nos osciladores harmônicos. Conclui-se então que a força dipolar é do tipo restaurada. Assim, para deslocar o vórtice de sua posição de equilíbrio é necessário realizar trabalho sobre o sistema, isto é, deve-se fornecer energia ao sistema, isso pode ser conseguido aplicando-se um campo magnético externo.

### 4.3 EQUAÇÃO DE THIELE PARA NANODISCOS

Campos magnéticos externos aplicados no plano do disco acoplam-se aos campos internos (de troca e dipolar) conduzindo ao movimento do núcleo do vórtice para longe da sua posição de equilíbrio. Se o campo aplicado for fraco, o caroço do vórtice comporta-se como uma partícula durante sua evolução. Como uma partícula pode-se associar ao núcleo do vórtice uma posição, uma massa, um momento linear etc.

Thiele formulou uma teoria para a dinâmica das estruturas micromagnéticas [37, 38]. Partindo da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert ele obteve uma equação de movimento para uma estrutura com centro na posição  $\vec{X}$ , sob a suposição de que essa excitação move-se com velocidade constante e que ela não se deforma durante o movimento.

Huber aplicou essa teoria à dinâmica de vórtices em sistemas bidimensionais com anisotropia de plano fácil [39, 40]. A equação de movimento que descreve o núcleo do vórtice sob a influência de uma força externa  $\vec{F}$  é dada por

$$\vec{F} + \vec{F}_G + \vec{F}_D = \vec{0} \quad (4.44)$$

Essa equação será referenciada como **equação de Thiele**. A força  $\vec{F}$  é o gradiente negativo da energia potencial do vórtice. A força

$$\vec{F}_G = \vec{G} \times \vec{V} \quad (4.45)$$

onde  $\vec{V}$  é a velocidade do núcleo do vórtice, é denominada de força girotrópica ou giromagnética, é análoga à força magnética experimentada por uma partícula carregada em movimento num

campo magnético. Porém,  $\vec{G}$  não é um campo magnético externo. O girovetor  $\vec{G}$  é uma quantidade intrínseca da estrutura. Há uma expressão na teoria de Thiele para calcular essa quantidade. Para os vórtices do modelo de Heisenberg [40], o vetor girovetor é dado por <sup>1</sup>

$$\vec{G} = -G\hat{z} = -2\pi Qp\hat{z} \quad (4.46)$$

onde  $Q$  é carga topológica e  $p$  é a polaridade, que indica o sentido da magnetização fora do plano no centro do vórtice. O versor  $\hat{z}$  perpendicular ao plano  $xy$ . Para vórtices planares  $p = 0$  e, portanto,  $\vec{F}_G = \vec{0}$ . Para vórtices com  $Q = 1$ , temos que  $G = 2\pi p$ . Note que apenas os vórtices não-planares e em movimento experimentam a força girotrópica.

A força de damping

$$\vec{F}_D = D\vec{V} \quad (4.47)$$

é análoga a uma força de atrito. Em geral,  $D$  é um tensor, denominado tensor de damping, na teoria de Thiele têm-se um expressão para determinar suas componentes. Em alguns casos, esse tensor reduz-se a uma constante.

Wysin foi além da aproximação de vórtice rígido, permitindo que a forma do vórtice dependesse da velocidade, obtendo uma **equação de Thiele generalizada** [36]

$$\vec{F} + \vec{F}_G + \vec{F}_D = M \frac{d\vec{V}}{dt} \quad (4.48)$$

Essa equação permite que o núcleo do vórtice acelere durante seu movimento,  $M$  é denominado tensor de massa. Mesmo se  $\vec{G} = \vec{0}$  ela ainda possui uma dinâmica. No entanto, essa equação não é apropriada para descrever uma excitação girotrópica, isto é, caracterizada por  $\vec{G} \neq \vec{0}$ , por exemplo um vórtice com componente fora do plano. O modo girotrópico é caracterizado pela rotação do núcleo do vórtice em ponto fixo, o sentido do giro depende apenas da polaridade e o sistema apresenta um única frequência. No entanto, um estudo da equação (4.48) mostra que ela apresenta um duplete de frequências para uma estrutura girotrópica. Na teoria das variáveis coletivas considera-se que a deformação da estrutura durante o movimento depende da velocidade, aceleração, etc., e essa teoria afirma que vórtices planares apresentam uma dinâmica

<sup>1</sup> Essa expressão não está em unidades SI, abaixo será dado a versão nesse sistema de unidades.

newtoniana, ou seja, são governados por equações diferenciais de ordem par, enquanto que vórtices não planares têm uma dinâmica não-newtoniana, sendo governados por equações de diferenciais de ordem ímpar. Uma discussão detalhada sobre esse assunto pode ser encontrada nas referências [41, 42, 43]. Dessa forma, existe na literatura uma equação de terceira ordem, que é mais apropriada que a equação (4.48) para descrever um vórtice não-planar. Thiaville generalizou a equação (4.48) para incluir a ação de uma corrente de spin polarizada [44]. A solução analítica dessa equação é encontrada nas referências [45, 46]. Para as nossas propostas, vamos considerar apenas as equações (4.44) e (4.48).

Nessa seção propomos estudar o modo girotrópico em nanodiscos através da equação de Thiele. Uma solução geométrica é mais interessante e nos conduzirá ao entendimento qualitativo do modo girotrópico.

De acordo com a equação (4.48) a trajetória  $\vec{X}(t)$  do centro do vórtice é formalmente a mesma do que uma carga elétrica  $e$  num plano com um campo magnético perpendicular  $\vec{B}$  e no plano uma força elétrica  $\vec{F}$ , ou seja, um cicloide com frequência  $\omega = G/M$  através da analogia de  $\vec{G}$  com um campo magnético, a frequência ciclotron  $eB/M$  ( $p$  é análogo à carga elétrica e  $\vec{B}$  corresponde a um campo magnético, o sentido de rotação depende do sinal da carga elétrica).

Na referência [43] encontra-se quase todas as quantidades envolvidas na equação de Thiele para vórtices magnéticos em “dots” cilíndricos, e além disso, usa-se o sistema de unidades SI. O tensor de massa foi calculado por Wysin [36], e neste caso  $M$  é uma constante, a expressão possui uma dependência logarítmica com o tamanho do sistema, semelhante à energia do vórtice. O girovetor para um cilindro de raio  $R$  e espessura  $l$ , é dado por

$$\vec{G} = -G\hat{z} = -\frac{2\pi QplM_S}{|\gamma|}\hat{z} \quad (4.49)$$

onde  $M_S$  é a magnetização de saturação do material. Se a polaridade do vórtice for  $p = 1$  ele estará polarizado no sentido positivo do eixo-z. O versor  $\hat{z}$  é normal ao plano do cilindro.  $\gamma$  é a razão giromagnética. Note no SI, o girovetor tem dimensão de [kg/s].

A força externa é escrita como  $\vec{F} = -\vec{\nabla}U$ , onde  $U$  é a energia potencial, dada por

$$U(\vec{X}) = U(0) + \frac{\kappa}{2} |\vec{X}|^2 - \mu [\hat{z} \times \vec{B}] \cdot \vec{X} \quad (4.50)$$

O primeiro termo é a energia potencial em  $\vec{X} = 0$ , o segundo termo está relacionado com as energias de troca e magnetostática devido ao deslocamento do núcleo do vórtice da posição de equilíbrio, onde o coeficiente  $\kappa$  que é uma função do raio e da espessura do disco, é análogo à constante elástica na lei de Hooke, têm dimensão de [N/m]. Esse termo dá origem a uma força restauradora, do tipo central. O último termo de energia corresponde à interação do núcleo do vórtice com um campo magnético externo, onde

$$\mu = \frac{2}{3} \pi c R l M_S \quad (4.51)$$

têm dimensão de [A m].  $c$  é quiralidade do vórtice ( $c = \pm 1$ , sentido de rotação da magnetização), observando o disco de um ponto em que a coordenada  $z$  é positiva,  $c = 1$  será definida como a circulação anti-horária. A energia potencial pode incluir outros termos, como correções do tipo  $O(|\vec{X}|^4)$ , além de potenciais devido a impurezas, interações entre vórtices, etc.

O tensor de damping, neste caso reduz-se a uma constante  $D$ , com dimensão [kg/s], sendo dada por

$$D = -\alpha_{LLG} \frac{\pi l M_S}{|\gamma|} [2 + \ln(R/R_c)] \quad (4.52)$$

onde  $\alpha_{LLG}$  é o parâmetro de damping da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert e  $R_c$  é o raio do núcleo do vórtice, que depende da espessura  $l$  [47],

$$R_c(l) = 0.68 \lambda_{exc} \left( \frac{l}{\lambda_{exc}} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad l \geq \lambda_{exc} \quad (4.53)$$

onde o comprimento de troca é lembrado ser

$$\lambda_{exc} = \left( \frac{2A}{\mu_0 M_S^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.54)$$

Calculando o gradiente da energia potencial, temos

$$\vec{F} = -\kappa \vec{X} + \mu [\hat{z} \times \vec{B}] \quad (4.55)$$

Substituindo as forças  $\vec{F}$ ,  $\vec{F}_G$ ,  $\vec{F}_D$  em (4.48), obtêm-se

$$-\kappa \vec{X} + \mu (\hat{z} \times \vec{B}) + \vec{G} \times \vec{V} + D \vec{V} = M \frac{d\vec{V}}{dt} \quad (4.56)$$

ou

$$M \frac{d^2 \vec{X}}{dt^2} - \vec{G} \times \frac{d\vec{X}}{dt} - D \frac{d\vec{X}}{dt} + \kappa \vec{X} = \mu (\hat{z} \times \vec{B}) \quad (4.57)$$

ou ainda, explicitamente

$$M \left[ \hat{x} \frac{d^2 X}{dt^2} + \hat{y} \frac{d^2 Y}{dt^2} \right] + \hat{z} G \times \left[ \hat{x} \frac{dX}{dt} + \hat{y} \frac{dY}{dt} \right] - D \left[ \hat{x} \frac{dX}{dt} + \hat{y} \frac{dY}{dt} \right] + \kappa [\hat{x}X + \hat{y}Y] = \mu \hat{z} \times [\hat{x}B_x + \hat{y}B_y]$$

$$M \left[ \hat{x} \frac{d^2 X}{dt^2} + \hat{y} \frac{d^2 Y}{dt^2} \right] + G \left[ \hat{y} \frac{dX}{dt} - \hat{x} \frac{dY}{dt} \right] - D \left[ \hat{x} \frac{dX}{dt} + \hat{y} \frac{dY}{dt} \right] + \kappa [\hat{x}X + \hat{y}Y] = \mu [\hat{y}B_x - \hat{x}B_y]$$

Agrupando as componentes x e y, e depois de se igualar essas componentes em ambos os membros, obtêm-se um sistema de duas equações de segunda ordem acopladas

$$M \frac{d^2 X}{dt^2} - G \frac{dY}{dt} - D \frac{dX}{dt} + \kappa X = -\mu B_y \quad (4.58)$$

$$M \frac{d^2 Y}{dt^2} + G \frac{dX}{dt} - D \frac{dY}{dt} + \kappa Y = +\mu B_x \quad (4.59)$$

### 4.3.1 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE THIELE

Considere o núcleo do vórtice sem massa, nesse caso a equação de Thiele é de primeira ordem,  $M = 0$  na equação (4.48). As equações (4.58) e (4.59), tornam-se



$$G\frac{dX}{dt} - D\frac{dY}{dt} + \kappa Y = \mu Bx \quad (4.60)$$

$$G\frac{dY}{dt} + D\frac{dX}{dt} - \kappa X = \mu By \quad (4.61)$$

Definindo  $\omega_G = \kappa/G$ ,  $\delta = D/G$ , pode-se reescrever

$$\frac{dX}{dt} = +\delta\frac{dY}{dt} - \omega_G Y + \mu Bx/G \quad (4.62)$$

$$\frac{dY}{dt} = -\delta\frac{dX}{dt} + \omega_G X + \mu By/G \quad (4.63)$$

A fim de desacoplar essas equações, substitui-se a primeira na segunda e a segunda na primeira,

$$\frac{dX}{dt} = +\delta \left[ -\delta\frac{dX}{dt} + \omega_G X + \mu By/G \right] - \omega_G Y + \mu Bx/G \quad (4.64)$$

$$\frac{dY}{dt} = -\delta \left[ +\delta\frac{dY}{dt} - \omega_G Y + \mu Bx/G \right] + \omega_G X + \mu By/G \quad (4.65)$$

ou

$$(1 + \delta^2)\frac{dX}{dt} = +\delta\omega_G X + \delta\mu By/G - \omega_G Y + \mu Bx/G \quad (4.66)$$

$$(1 + \delta^2)\frac{dY}{dt} = +\delta\omega_G Y - \delta\mu Bx/G + \omega_G X + \mu By/G \quad (4.67)$$

Substituindo as constantes,

$$\left[ 1 + \left( \frac{D}{G} \right)^2 \right] \frac{dX}{dt} = +\frac{D\kappa}{G^2} X - \frac{\kappa}{G} Y + \frac{\mu Bx}{G} + \frac{D}{G^2} \mu By \quad (4.68)$$

$$\left[ 1 + \left( \frac{D}{G} \right)^2 \right] \frac{dY}{dt} = +\frac{\kappa}{G} X + \frac{D\kappa}{G^2} Y + \frac{\mu By}{G} - \frac{D}{G^2} \mu Bx \quad (4.69)$$

Considerando o caso  $D = 0$ , então o sistema é conservativo e essas equações assumem a seguinte forma

$$\frac{dX}{dt} = -\frac{\kappa}{G} Y + \frac{\mu Bx}{G} \quad (4.70)$$

$$\frac{dY}{dt} = +\frac{\kappa}{G}X + \frac{\mu By}{G} \quad (4.71)$$

As equações (4.70) e (4.71) constituem um sistema homogêneo linear com os coeficientes constantes,

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \mathbf{A}\vec{X} + \vec{b} \quad (4.72)$$

onde a matriz dos coeficientes é

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & -\kappa/G \\ \kappa/G & 0 \end{pmatrix}$$

e o termo independente

$$\vec{b} = \begin{pmatrix} \mu Bx/G \\ \mu By/G \end{pmatrix}$$

Se o campo externo não depende do tempo, o sistema é dito homogêneo.

Pontos críticos são pontos onde  $\mathbf{A}\vec{X} + \vec{b} = \vec{0}$ . Uma vez que  $\frac{d\vec{X}}{dt} = \vec{0}$  nestes pontos, eles correspondem a **soluções constantes** ou **soluções de equilíbrio**. Uma vez que  $\det \mathbf{A} \neq 0$ ,  $\mathbf{A}$  é não singular, isto é,  $\mathbf{A}^{-1}$  existe. Então, multiplicado a inversa pela esquerda,  $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\vec{X} = -\mathbf{A}^{-1}\vec{b}$ , obtêm-se que os pontos críticos são dados por

$$\vec{X} = -\mathbf{A}^{-1}\vec{b} \quad (4.73)$$

A matriz inversa é dada por

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & +G/\kappa \\ -G/\kappa & 0 \end{pmatrix}$$

então, efetuando a multiplicação (4.73), encontramos

$$\vec{X} = - \begin{pmatrix} 0 & +G/\kappa \\ -G/\kappa & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu Bx/G \\ \mu By/G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mu By/\kappa \\ +\mu Bx/\kappa \end{pmatrix}$$

Aqui vemos que se o campo externo for nulo, então a origem é o único ponto crítico do sistema. Por outro lado, se um campo magnético está presente, então o ponto crítico está

localizado no ponto,  $(-\mu By/\kappa, \mu Bx/\kappa)$ . Lembre-se que  $\kappa > 0$  e que  $\mu \propto c$  têm o mesmo sinal da quiralidade. Então, o ponto crítico depende do sentido do campo e da quiralidade do vórtice. Note-se que o ponto crítico não depende da polaridade, a constante  $G \propto p$  foi cancelada na multiplicação (4.73).

Os autovalores da matriz dos coeficientes,  $\mathbf{A}$ , são imaginários puros,

$$\lambda = \pm i \frac{\kappa}{G} \quad (4.74)$$

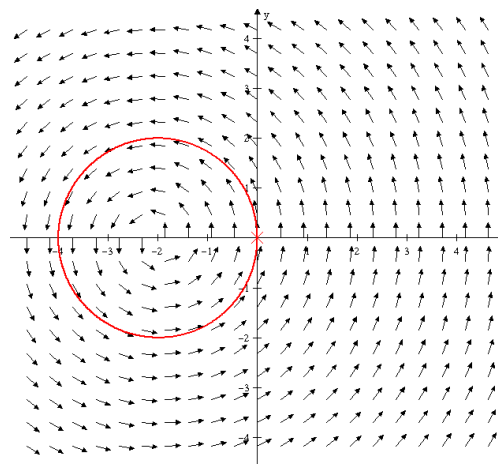
segue da teoria dos sistemas de equações lineares [31], que o ponto crítico é do tipo **centro**.

Calculando os valores de  $\mathbf{A}\vec{X} + \vec{b}$  para um grande número de pontos  $(X, Y)$  e plotando os vetores resultantes <sup>2</sup>, obtêm-se um campo de direções de vetores tangentes às soluções do sistema de equações diferenciais <sup>3</sup>. Na figura (4.4a) é mostrado a trajetória do núcleo do vórtice com polaridade e quiralidade  $(p, c) = (1, 1)$ , para plotar o campo de direções definiu-se  $G = p$  e  $\mu = c$ . Em  $t = 0$  foi aplicado um campo no sentido positivo do eixo  $y$ ,  $\vec{B} = (0, 2)$ , então o caroço gira em torno do ponto  $(0, -2)$  no sentido anti-horário. Na figura (4.4b), manteve-se o mesmo campo, porém o estado do vórtice foi considerado com a polaridade contrária  $(-1, 1)$ , note-se que campo de velocidades é invertido e o caroço gira no sentido horário. *É importante não confundir quiralidade com o sentido de rotação do campo de direções.* <sup>4</sup>. Pela figura (4.4c), note que se o campo externo for nulo ou for desligado, o ponto crítico neste caso é  $(0, 0)$ , então o vórtice permanece na origem ou possui uma tendência natural de girar em torno dela, sendo o sentido da rotação unicamente determinada por sua polaridade. As trajetórias no espaço de fase são elipses centradas no ponto crítico e percorridas no sentido anti-horário se  $p > 0$  e no sentido horário se  $p < 0$ .

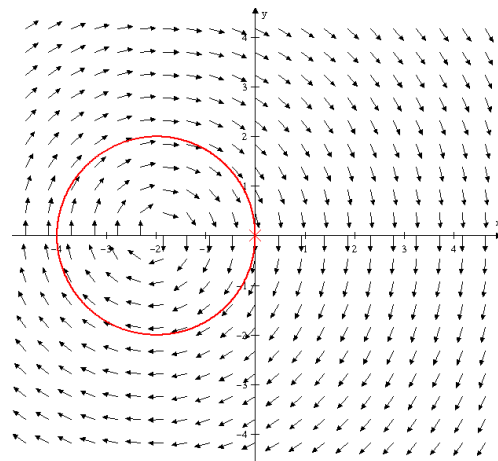
<sup>2</sup> Existem vários programas que fazem isso facilmente.

<sup>3</sup> Neste caso, o campo de direções corresponde a um campo de vetores velocidade.

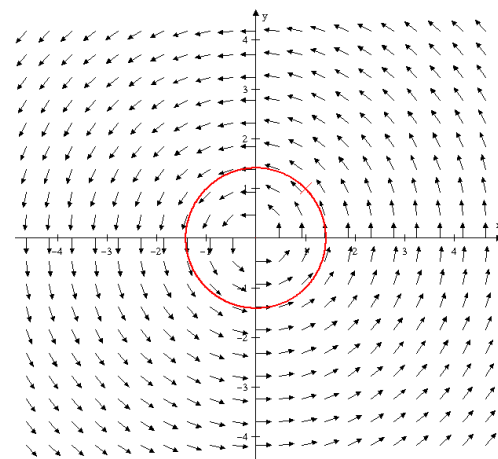
<sup>4</sup> Aqui nós estamos no espaço de fase, que coincide como o espaço das coordenadas, mas os vetores não os spins.



(a) estado (1,1)



(b) estado (-1,1)



(c) estado (1,1)

**Figura 4.4** – Trajetórias no espaço de fase para o caroço do vórtice com carga topológica  $Q = 1$ . O Sistema é conservativo  $D = 0$ . (a) e (b) num campo magnético externo  $\vec{B} = (0, 2)$ , o caroço parte da origem e gira no sentido horário ou anti-horário dependendo da sua polaridade. O ponto fixo, no qual ele gira depende do sentido do campo e também da sua quiralidade. Em (c) o campo magnético externo é nulo. Se o caroço está na origem ele permanece, se ele está deslocado, ele gira.

Derivando, as equações (4.70), (4.71) em relação ao tempo, obtêm-se

$$\frac{d^2X}{dt^2} = -\frac{\kappa}{G} \frac{dY}{dt} + \frac{\mu}{G} \frac{dBx}{dt} = -\left(\frac{\kappa}{G}\right)^2 X - \frac{\kappa\mu}{G^2} By + \frac{\mu}{G} \frac{dBx}{dt} \quad (4.75)$$

e

$$\frac{d^2Y}{dt^2} = +\frac{\kappa}{G} \frac{dX}{dt} + \frac{\mu}{G} \frac{DBy}{dt} = -\left(\frac{\kappa}{G}\right)^2 Y + \frac{\kappa\mu}{G^2} Bx + \frac{\mu}{G} \frac{DBy}{dt} \quad (4.76)$$

Se o campo externo for nulo, então, essas equações são do tipo oscilador harmônico simples

$$\frac{d^2\vec{X}}{dt^2} + \left(\frac{\kappa}{G}\right)^2 \vec{X} = \vec{0} \quad (4.77)$$

então a **frequência natural** ou **auto-frequência** com que o núcleo do vórtice gira é

$$\omega_G = \frac{\kappa}{|G|} \quad (4.78)$$

Agora vamos analisar o caso em que o sistema é dissipativo, ou seja,  $D \neq 0$ . Multiplicado as equações (4.68) e (4.69) por  $G^2$ , obtêm-se

$$[G^2 + D^2] \frac{dX}{dt} = +D\kappa X - G\kappa Y + G\mu Bx + D\mu By \quad (4.79)$$

$$[G^2 + D^2] \frac{dY}{dt} = +G\kappa X + D\kappa Y + G\mu By - D\mu Bx \quad (4.80)$$

Essas equações pode ser escritas na seguinte forma matricial,

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \mathbf{A}\vec{X} + \vec{b} \quad (4.81)$$

onde a matriz dos coeficientes é

$$\mathbf{A} = \frac{\kappa}{G^2 + D^2} \begin{pmatrix} D & -G \\ G & D \end{pmatrix}$$

e o termo independente

$$\vec{b} = \frac{\mu}{G^2 + D^2} \begin{pmatrix} GBx + DBy \\ GBy - DBx \end{pmatrix}$$

A matriz  $\mathbf{A}$  possui inversa, pois  $\det \mathbf{A} \neq 0$ . Os pontos críticos são dados por

$$\vec{X} = -\mathbf{A}^{-1}\vec{b} \quad (4.82)$$

A matriz inversa é

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\kappa} \begin{pmatrix} D & +G \\ -G & D \end{pmatrix}$$

Então, efetuando a multiplicação (4.82), encontramos

$$\vec{X} = \frac{\mu}{\kappa} \begin{pmatrix} -By \\ +Bx \end{pmatrix}$$

Note que o ponto crítico do sistema é independente da constante de amortecimento  $D$ , além disso, observa-se que o ponto crítico do sistema dissipativo é idêntico ao ponto crítico do sistema conservativo. Note que se  $D = 0$ , recuperamos o sistema conservativo, no qual o ponto crítico é do tipo centro. Entretanto, para o sistema dissipativo temos que analisar o módulo  $|\frac{D}{G}|$  para saber que tipo de amortecimento o sistema apresenta. Para  $|\frac{D}{G}| < 1$  têm-se o caso de amortecimento fraco.  $|\frac{D}{G}| > 1$  corresponde ao sistema superamortecido. E para  $|\frac{D}{G}| = 1$  têm-se o caso do amortecimento crítico. Para nanodiscos de Py-79,  $d = 175$  [nm] e  $l = 10$  [nm] o valor de  $|\frac{D}{G}| \approx 0.02489$ , então o sistema apresenta um fraco amortecimento.

Os autovalores da matriz dos coeficientes determinam o tipo do ponto crítico que o sistema apresenta. Os autovalores de  $\mathbf{A}$  são complexos conjugados, então o ponto crítico é do tipo **espiral**.

$$\lambda = \frac{D\kappa}{D^2 + G^2} \pm i \frac{\kappa}{\sqrt{D^2 + G^2}} \quad (4.83)$$

Definindo as partes real e imaginária por

$$-\frac{b^2}{2} = \frac{D\kappa}{D^2 + G^2} \quad (4.84)$$

e

$$\omega_D = \frac{\kappa}{\sqrt{D^2 + G^2}} = \frac{\omega_G}{\sqrt{1 + \delta^2}} \quad (4.85)$$

onde realçamos o fato que a parte real é negativa.  $\omega_G$  é a auto-frequência do sistema não

amortecido. O fato da parte real dos autovalores ser negativa, já que  $D < 0$ , diz que as trajetórias no espaço de fase são espirais dirigidas para o ponto crítico. Assim, todas as trajetória se aproximam do ponto crítico quando  $t \rightarrow \infty$ . Embora o movimento não seja harmônico simples, o parâmetro  $\omega_D$  determina a frequência de oscilação do núcleo do vórtice;  $\omega_D$  é denominada **quase-frequência**. Comparando  $\omega_D$  com  $\omega_G$ , se  $\delta$  é pequeno,

$$\frac{\omega_D}{\omega_G} = (1 + \delta^2)^{-\frac{1}{2}} \approx 1 - \frac{1}{2}\delta^2 \quad (4.86)$$

Assim, o efeito de um pequeno amortecimento é reduzir ligeiramente a frequência de oscilação.

Derivando, a equações (4.79), (4.80) em relação ao tempo, obtêm-se duas equações de segunda ordem desacopladas. Considerando o campo externo nulo, resulta que elas são do tipo oscilador amortecido

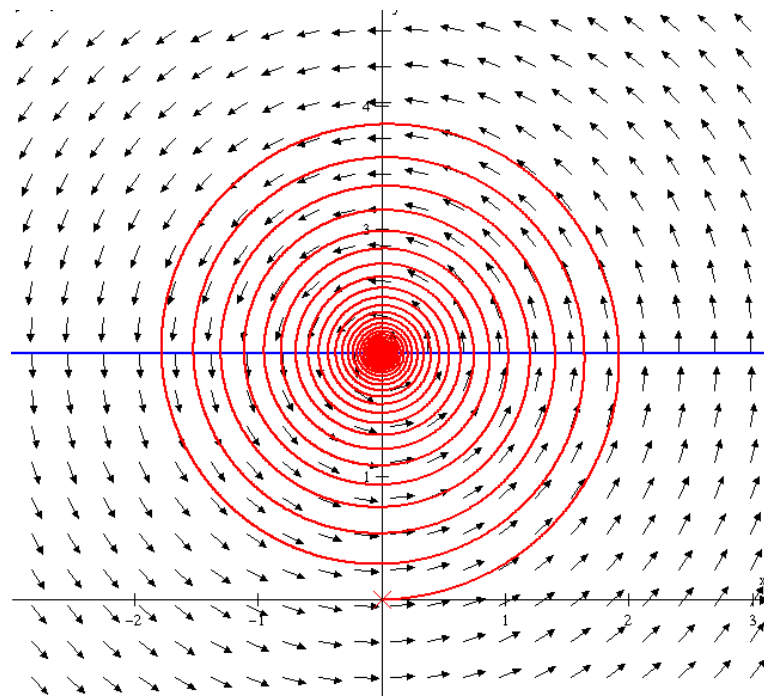
$$\frac{d^2\vec{X}}{dt^2} + b^2\frac{d\vec{X}}{dt} + \omega_D^2\vec{X} = \vec{0} \quad (4.87)$$

NOT TRUE

Plotando o campo de direções do sistema de equações (4.81), para  $D = -0.025$ ,  $\mu = 1$ ,  $\kappa = 1$ . Para  $\vec{B} = (2, 0)$  e  $G = 1$ , ou seja vórtice no estado  $(1, 1)$ , têm-se

$$\vec{X} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}$$

o resultado é mostrado na figura (4.5). Vemos que num campo magnético externo, o caroço do vórtice parte da origem e gira no sentido horário ou anti-horário dependendo da sua polaridade. O ponto fixo, no qual ele gira depende do sentido do campo e da quiralidade. Se o campo externo for nulo ou for desligado, o ponto crítico neste caso é  $(0, 0)$ , então o vórtice permanece na origem ou possui uma tendência natural de espiralar em torno da origem, sendo o sentido da rotação unicamente determinada por sua polaridade.



**Figura 4.5** – Trajetórias no espaço de fase para o caroço do vórtice com carga topológica  $Q = 1$ . O Sistema é dissipativo  $D = -0.025$ . O núcleo é caracterizado por  $(p = 1, c = 1)$  e o campo externo é  $\vec{B} = (2, 0)$ .



### 4.3.2 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE THIELE GENERALIZADA

Considere o núcleo do vórtice com massa, o núcleo do vórtice pode acelerar. As equações (4.58) e (4.59) podem ser reescritas como

$$\frac{d^2X}{dt^2} = \frac{1}{M} \left[ +G \frac{dY}{dt} + D \frac{dX}{dt} - \kappa X - \mu B y \right] \quad (4.88)$$

$$\frac{d^2Y}{dt^2} = \frac{1}{M} \left[ -G \frac{dX}{dt} + D \frac{dY}{dt} - \kappa Y + \mu B x \right] \quad (4.89)$$

Para transformar essas equações de segunda ordem num sistema de primeira ordem, pode-se fazer a seguinte transformação (mudança de variáveis)

$$x_1 = X; \quad x_2 = Y; \quad x_3 = \frac{dX}{dt}; \quad x_4 = \frac{dY}{dt} \quad (4.90)$$

Derivando essa transformação em relação ao tempo obtêm-se um sistema linear, ou seja,

$$\frac{dx_1}{dt} = x_3 \quad (4.91)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = x_4 \quad (4.92)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = \frac{1}{M} (-\kappa x_1 + D x_3 + G x_4 - \mu B y) \quad (4.93)$$

$$\frac{dx_4}{dt} = \frac{1}{M} (-\kappa x_2 - G x_3 + D x_4 + \mu B x) \quad (4.94)$$

Escrevendo esse sistema numa forma matricial do tipo

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \mathbf{A}\vec{x} + \vec{b} \quad (4.95)$$

onde a matriz dos coeficientes é

$$\mathbf{A} = \frac{1}{M} \begin{pmatrix} 0 & 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M \\ -\kappa & 0 & D & G \\ 0 & -\kappa & -G & D \end{pmatrix}$$

e o termo independente

$$\vec{b} = \frac{1}{M} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\mu B y \\ +\mu B x \end{pmatrix}$$

A matriz  $\mathbf{A}$  possui inversa, pois  $\det \mathbf{A} = (\kappa/M)^2 \neq 0$ . Os pontos críticos são dados por

$$\vec{X} = -\mathbf{A}^{-1}\vec{b} \quad (4.96)$$

A matriz inversa é

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\kappa} \begin{pmatrix} D & G & -M & 0 \\ -G & D & 0 & -M \\ \kappa & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \kappa & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Então, efetuando a multiplicação (4.96), encontramos o ponto crítico ocorre em

$$\vec{x} = \frac{1}{\kappa} \begin{pmatrix} -\mu B y \\ +\mu B x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Ou seja, quando o vórtice está parado ou se movimenta com velocidade constante, pois lembre-se que  $x_3 = \frac{dX}{dt} = 0$ ;  $x_4 = \frac{dY}{dt} = 0$ . O ponto do espaço das coordenadas onde ele ocorre depende da quiralidade e também do sentido do campo magnético externo. Se o campo é nulo, ele ocorre na origem,  $(x_1, x_2) = (0, 0)$ .

Os autovalores de  $\mathbf{A}$  são

$$\lambda_{1,3} = \frac{1}{2M} \left[ (D \pm iG) + \left\{ (D \pm iG)^2 - 4\kappa M \right\}^{\frac{1}{2}} \right] \quad (4.97)$$

e

$$\lambda_{2,4} = \frac{1}{2M} \left[ (D \pm iG) - \left\{ (D \pm iG)^2 - 4\kappa M \right\}^{\frac{1}{2}} \right] \quad (4.98)$$

Note que se o sistema é conservativo,  $D = 0$ , os autovalores são imaginários puros,

$$\lambda_{1,4} = \pm \frac{i}{2M} \left[ G + \left\{ G^2 + 4 \kappa M \right\}^{\frac{1}{2}} \right] \quad (4.99)$$

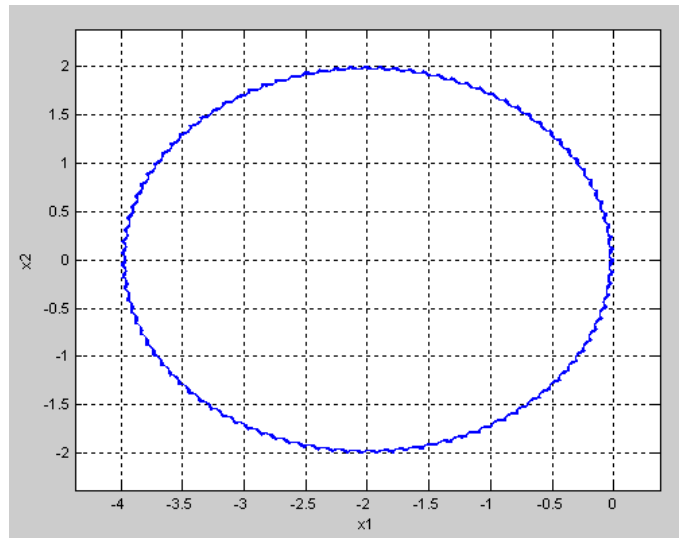
e

$$\lambda_{2,3} = \pm \frac{i}{2M} \left[ G - \left\{ G^2 + 4 \kappa M \right\}^{\frac{1}{2}} \right] \quad (4.100)$$

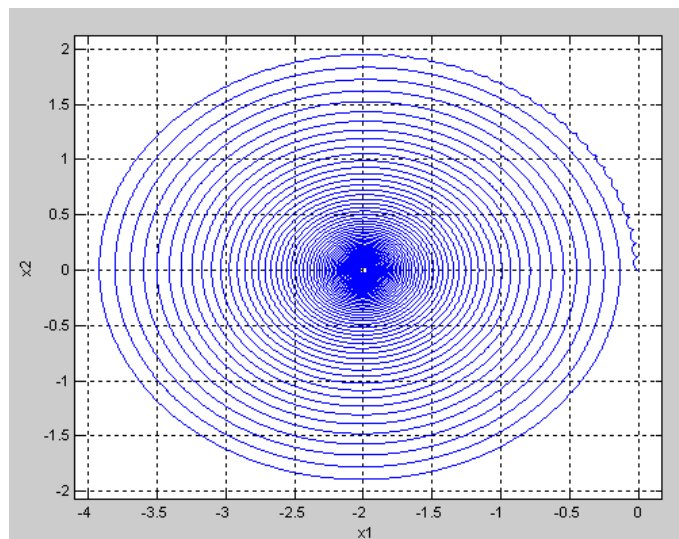
Na teoria dos sistemas de equação diferenciais lineares, se os autovalores imaginários puros, estes estão relacionados com as frequências naturais do sistema. Portanto, em nosso caso, existem duas auto-frequências

$$\omega_{\pm} = \frac{1}{2M} \left[ G \pm \left\{ G^2 + 4 \kappa M \right\}^{\frac{1}{2}} \right] \quad (4.101)$$

Esse dubleto de frequências não é observado no modo girotrópico em nanodiscos. Por outro lado, a equação (4.48) parece descrever bem o comportamento qualitativo o caroço do vórtice em vórtices não-planares. Na figura (4.6) é mostrado a trajetória do núcleo do vórtice com polaridade e quiralidade  $(p, c) = (1, 1)$ , para plotar o campo de direções definiu-se  $G = p$  e  $\mu = c$  Considerou-se  $\kappa = 1$ ,  $M = 0.01$  e  $D = 0$ . Em  $t = 0$  foi aplicado um campo no sentido positivo do eixo  $y$ ,  $\vec{B} = (0, 2)$ , então o caroço gira em torno do ponto  $(0, -2)$  no sentido anti-horário. Na figura (4.7), manteve-se o mesmo campo, o mesmo estado de vórtice mas o sistema foi considerado dissipativo.



**Figura 4.6** – Trajetórias no espaço de fase para o caroço do vórtice com carga topológica  $Q = 1$ . O Sistema é conservativo  $D = 0$ . O núcleo é caracterizado por  $(p = 1, c = 1)$  e o campo externo é  $\vec{B} = (0, 2)$ ,  $\kappa = 1$  e  $M = 0.01$ . Embora a trajetória seja elíptica ela apresenta ondulações. Se a massa é muito pequena essas ondulações são praticamente imperceptíveis.



**Figura 4.7** – Trajetórias no espaço de fase para o caroço do vórtice com carga topológica  $Q = 1$ . O Sistema é dissipativo  $D = -0.01$ . O núcleo é caracterizado por  $(p = 1, c = 1)$  e o campo externo é  $\vec{B} = (0, 2)$ ,  $\kappa = 1$  e  $M = 0.01$ . Embora a trajetória seja elíptica ela apresenta ondulações. Se a massa é muito pequena essas ondulações são praticamente imperceptíveis.

## **5 *FORMAÇÃO DO VÓRTICE MAGNÉTICO E MOVIMENTO GIROTRÓPICO EM NANODISCOS***

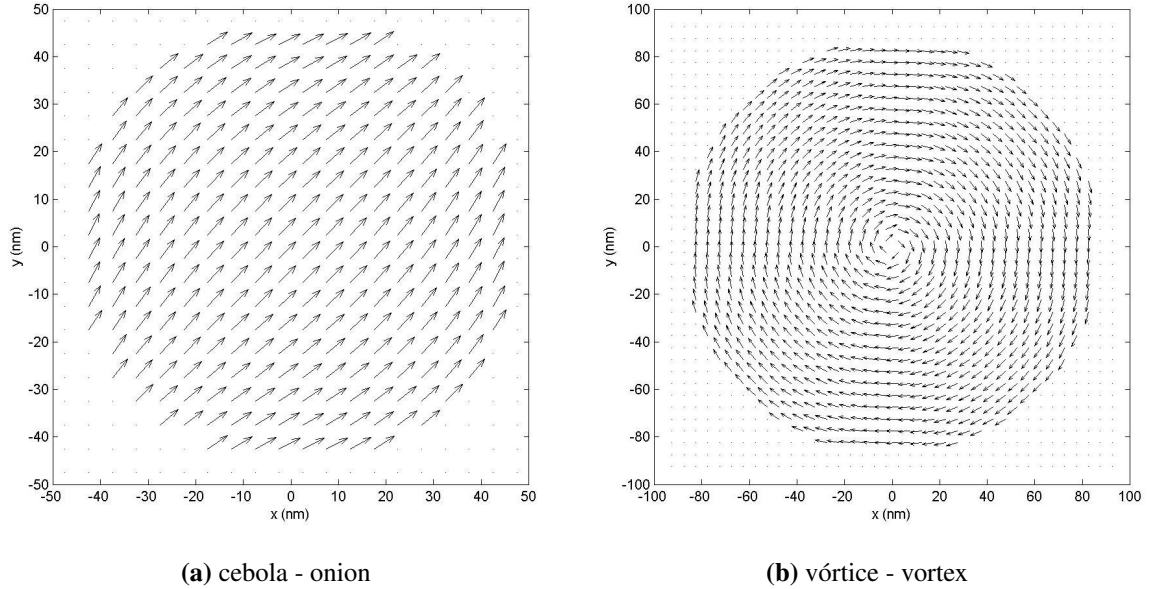
Neste capítulo, são apresentados os resultados obtidos via simulações numéricas no estudo do estado fundamental e do modo girotrópico em nanodiscos magnéticos. Os principais resultados obtidos foram que a componente da magnetização fora do plano depende da espessura do disco e que existe um valor mínimo nessa componente para que o modo girotrópico seja excitado. Tal estudo resultou na publicação do artigo [22].

### **5.1 VÓRTICES EM NANODISCOS MAGNÉTICOS**

Em geral, materiais ferromagnéticos formam estruturas de domínios para reduzir a energia magnetostática. Em sistemas ferromagnéticos muito pequenos, com dimensões de desde algumas dezenas a centenas de nanômetros, porém, a formação de paredes de domínios não é favorecida. O confinamento de um material ferromagnético em nano escala frequentemente confere à sua magnetização uma estrutura mais complexa que um monodomínio. Efeitos de superfície tornam-se cada vez mais pronunciados quando o tamanho da partícula diminui e, num nanomagnetito com anisotropia magnetocristalina desprezível, os tipos de domínios que podem surgir se devem basicamente as suas dimensões e a sua forma geométrica.

Em particular, para um nanomagnetito mole na forma de disco, no qual a espessura é muito menor do que o diâmetro, o estado fundamental do sistema pode assumir duas configurações distintas: cebola ou vórtice. Para um determinado material, a competição entre as interações de

troca e magnetostática é responsável pela formação dos estados de vórtice ou cebola, sendo o diâmetro do disco o parâmetro que seleciona o estado de menor energia.



**Figura 5.1** – Possíveis configurações para o estado fundamental de um nanodisco com espessura muito menor do que o diâmetro. Em (a) o estado cebola. Em (b) o estado de vórtice.

Para entender isso, considere o modelo de Heisenberg isotrópico acrescido da anisotropia de forma

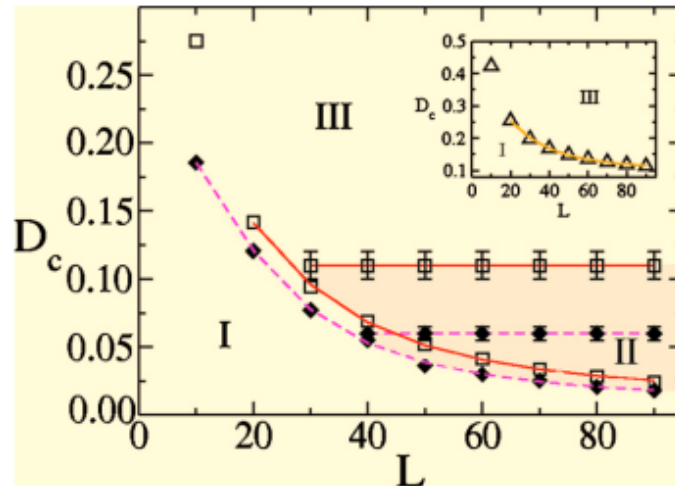
$$H = \frac{J}{2} \left\{ - \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{D}{J} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\} \quad (5.1)$$

onde  $J$  é a constante de acoplamento de troca,  $\vec{S}_i$  e  $\vec{S}_j$  são os spins localizados nos sítios  $i$  e  $j$  satisfazendo  $|\vec{S}_i| = 1$ ,  $r_{ij}$  é distância relativa destes sítios,  $a$  é o parâmetro de rede e  $D$  é o parâmetro da interação dipolar. A soma no primeiro termo é feita apenas sobre os primeiros vizinhos.

O primeiro termo da hamiltoniana descreve o alinhamento ferromagnético, sendo minimizado quando os spins se alinham paralelamente. O parâmetro da interação dipolar é  $D < J$ . Spins criam um campo magnetostático ao seu redor, assim cada spin interage com o campo devido aos spins. Observa-se que a interação dipolar decai com o inverso do cubo da distância entre os sítios. Como a espessura é muito menor do que as outras duas dimensões laterais, os spins tendem a se alinhar no plano, devido a anisotropia de forma. A interação de troca,

sendo uma interação de curto alcance prevalece se o tamanho do sistema é pequeno. quando o número de spins é relativamente pequeno, a contribuição da interação dipolo-dipolo é praticamente desprezível devido à razão  $D/J$  ser pequena. No entanto, se o tamanho do sistema é suficientemente grande, a configuração de domínio simples dá lugar à configuração de vórtice, porque a interação dipolo-dipolo, que é de longo alcance, prevalece sobre a interação de troca, para grandes distâncias. Isso ocorre devido ao aumento do número de spins próximos à borda, que tenderão a se alinhar paralelamente ao contorno do disco, minimizando o segundo termo na interação dipolar que tende a alinhar os spins na direção que os une. Note-se que este termo possui um fator 3 em relação ao primeiro. Com essa configuração rotacional, a direção dos spins varia gradualmente e, ambas as energias de troca e dipolar são minimizadas. O termo na interação dipolar, que favorece o alinhamento antiferromagnético é minimizado para spins em sítios radialmente opostos. Entretanto, no ponto de singularidade, a energia de troca não é minimizada com essa configuração. A forma que o sistema encontra para minimizar a energia de troca localmente é desenvolvendo uma componente para fora do plano. Dessa forma, no núcleo do vórtice há uma competição, a interação de troca tende a levantar os spins para fora do plano, enquanto que a interação dipolar tende a confiná-los no plano. O sistema pode ou não desenvolver essa componente perpendicular ao plano do disco, dependendo de qual intenção vence essa competição, ou seja, depende da razão  $D/J$ .

Num trabalho recente [48], os autores investigaram as condições para a formação de vórtices em nanodiscos magnéticos. Os nanodiscos foram modelados pela hamiltoniana (5.1), considerou-se a variação do número de coordenação (ou seja, o tipo de rede, triangular, quadrada e hexagonal), o tamanho do sistema e também a razão  $D/J$ . Com os resultados obtidos foi construído um diagrama de fase, onde é possível identificar uma linha de transição separando o estado de vórtice do estado cebola. Também foi observado que dentro da fase de vórtice, a componente da magnetização perpendicular ao plano do disco pode ter um valor apreciável ou desprezível (vórtice planar), dependendo da razão  $D/J$ . Num sistema com duas camadas, a camada extra de dipolos funciona como uma anisotropia efetiva, induzindo um aumento na componente fora do plano.



**Figura 5.2** – Diagrama de fase retirado da referência [48]. No eixo  $x$  representada o tamanho, no eixo  $y$  o parâmetro da interação dipolar. Os símbolos quadrados e losangos representam o estado fundamental de nanodiscos modelados sobre as redes quadrada e hexagonal, respectivamente. No topo a direita é mostrado resultados para uma rede triangular. Nas regiões I e III, os estados fundamentais apresentam as configurações cebola e vórtice, respectivamente. A região II, área hachurada, representa uma região onde a configuração mais estável apresenta uma componente fora do plano no centro do disco.

Este último resultado motivou o estudo das condições para o surgimento do vórtice no estado fundamental como função das dimensões do disco (espessura e diâmetro) do nanodisco e também do material do qual ele é feito ( $D/J$ ).

A hamiltoniana (5.1) é invariante frente a uma operação global  $S^z \rightarrow -S^z$ , assim não existe uma direção preferencial para a componente da magnetização fora do plano apontar  $\pm\hat{z}$ . Analogamente, se  $S^x \rightarrow -S^x$  e  $S^y \rightarrow -S^y$ , que é equivalente a uma rotação de  $\pi$  em torno do eixo- $z$ , vemos que não existe um sentido preferencial para a circulação da magnetização no plano do disco. Portanto, o estado de vórtice pode ser caracterizado por dois parâmetros: a polaridade (sentido da componente da magnetização fora do plano, para cima ou para baixo) e quiralidade (sentido da circulação da magnetização no plano, horária ou anti-horária). A polaridade e a quiralidade são independentes, de forma que o estado de vórtice é quadruplamente degenerado. Devido a estrutura de vórtice ser muito estável e a degenerescência do seu estado fundamental, o vórtice magnético têm sido um candidato promissor em aplicações tecnológicas.

Devido a suas propriedades únicas, o vórtice magnético apresenta uma dinâmica não trivial. Um fenômeno muito interessante ocorre devido à componente da magnetização fora do



plano, conhecido como modo girotrópico, no qual o núcleo do vórtice exibe um movimento elíptico em torno de um ponto fixo, quando o estado de vórtice é perturbado com um campo magnético externo no plano do disco. O sentido do giro depende única e exclusivamente da polaridade [8, 13, 49, 50, 51, 52] e, a autofrequência do movimento depende fortemente das dimensões do disco. Recentemente, foi encontrado que tal movimento oscilatório está estritamente relacionado com o mecanismo de reversão da polaridade do núcleo do vórtice [53], em que o “switching” da polaridade sempre ocorre quando o núcleo do vórtice atinge uma velocidade crítica, ao ser excitado por campos (ou correntes) oscilatórios no modo ressonante, sendo a velocidade crítica uma grandeza característica do material.

Portanto, do ponto de vista fundamental, é crucial entender o modo girotrópico. Neste trabalho observou-se que não basta o vórtice ter polaridade não nula para que o movimento girotrópico seja excitado, existe um valor mínimo na componente da magnetização fora do plano para que tal movimento seja observado.

## 5.2 DETALHES DAS SIMULAÇÕES

A interação dipolar, o segundo termo na hamiltoniana (5.1), é em geral muito difícil de ser tratada em qualquer abordagem, seja ela analítica ou computacional, devido ao seu caráter de longo alcance. Embora a intensidade da interação decaia com o inverso do cubo da distância, somos levados a pensar que truncando essa interação até uma determinada distância, os principais efeitos devido ao longo alcance da interação continuariam sendo observados. Fazendo essa aproximação certamente pouparia muito tempo de CPU em simulações numéricas, uma vez que não é necessário considerar as interações dipolo-dipolo na integral. Por outro lado, alguns trabalhos tanto teóricos quanto em simulações numéricas têm-se substituído a interação dipolar por termos que tentam imitar tal interação, por exemplo, um termo de interação anisotrópico do tipo  $\sum (\vec{S} \cdot \hat{n})^2$ , onde  $\hat{n}$  denota os versores normais às superfícies do nanodisco [54, 55, 56, 57, 58, 59, 60]. Esse termo contribui de forma nula ou positiva na energia total do sistema, portanto, ele força os spins a permanecerem perpendiculares a  $\hat{n}$ , competindo com a interação de troca. A

energia devido a esse termo anisotrópico é minimizada quando os momentos magnéticos se arranjam na configuração de vórtice. Para baixas temperaturas  $T \approx 0$  [K], as propriedades da hamiltoniana com termo anisotrópico são similares às aquelas obtidas usando o termo da interação dipolar. Porém, a altas temperaturas as propriedades e o comportamento dinâmico são muito diferentes do modelo original. Como neste trabalho pretende-se explorar as propriedades dos nanodiscos além do limite de baixas temperaturas e, na realidade, nanodiscos são fabricados e caracterizados à temperatura ambiente, o sistema será tratado considerando a interação dipolar.

Na maioria dos trabalhos, tanto teóricos quanto em simulações computacionais, uma simplificação notável que têm sido feita é considerar uma rede bidimensional. Os resultados obtidos com essa aproximação estão em concordância qualitativa razoável com os resultados experimentais. Num modelo bidimensional o número de primeiros vizinhos é reduzido, e além disso, a interação dipolar é tridimensional por natureza. Embora um nanodisco apresente uma dimensão muito menor do que as outras duas, desprezar as interações entre as camadas de momentos magnéticos pode introduzir assimetrias que o modelo real não apresenta. Por exemplo, considere as componentes do campo dipolar que atua no  $i$ -ésimo sítio, ou seja,

$$D_i^x = D \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{3(\hat{r}_{ij} \cdot \hat{x})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j \cdot \hat{x}}{(r_{ij}/a)^3} \right] \quad (5.2)$$

e

$$D_i^y = D \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{3(\hat{r}_{ij} \cdot \hat{y})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j \cdot \hat{y}}{(r_{ij}/a)^3} \right] \quad (5.3)$$

Num modelo bidimensional, a componente z do campo ficaria assimétrica,

$$D_i^z = D \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{-\vec{S}_j \cdot \hat{z}}{(r_{ij}/a)^3} \right] \quad (5.4)$$

Um nanodisco modelado numa rede tridimensional, a componente z do campo dipolar possui a mesma estrutura que as componentes x e y, embora o número de interações ao longo da direção z seja muito menor do que nas direções x e y. Por essas razões, este trabalho é dedicado a discussão da influência da espessura num nanodisco magnético modelado sobre uma rede

tridimensional.

Para definir o nanodisco procedeu-se distribuindo partículas magnéticas sobre os sítios de uma rede cúbica simples. Um disco de diâmetro  $d = La$  e espessura  $l = za$ , onde ( $L$  e  $z$  são inteiros) é desenhado e os momentos magnéticos dos sítios fora do disco são zerados. O parâmetro de rede  $a$  é a distância entre primeiros vizinhos e  $z$  representa o número de camadas. Por questão de simplicidade, a partir de agora as distâncias serão medidas em unidades de  $a$ . Assim, nas simulações que seguem o nanodisco será um pequeno cilindro de diâmetro  $L$  e espessura  $z$ . Os momentos magnéticos são modelados pela hamiltoniana (5.1) acrescida de um termo que leve em conta a interação deles com um campo magnético externo, ou seja,

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{1}{2} \frac{D}{J} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \frac{1}{J} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} \right\} \quad (5.5)$$

onde a magnitude do campo externo é medida em unidades  $J$ , ou seja,  $|\vec{B}_i^{ext}| = |\vec{b}_i^{ext}| J$ , onde  $\vec{b}_i^{ext}$  é o campo magnético externo adimensional.

Para investigar a formação do vórtice magnético, realizou-se várias simulações varrendo a razão  $D/J$  no intervalo  $[0.02, 0.55]$  para vários diâmetros  $L$  entre  $[20, 80]$  e espessuras com  $z = 2, 3$  e  $4$ . Algumas amostras foram simuladas introduzindo um corte na interação dipolar, com raio de corte  $r_{cut} = 6a$ , a fim de verificar a influência deste corte no comportamento do sistema.

Através de simulações micromagnéticas, estudou-se o a formação do vórtice magnético para um material específico,  $\text{Fe}_{21}\text{Ni}_{79}$ , em função da espessura e do diâmetro do nanodisco. Do ponto de vista micromagnético, o nanodisco é particionado em células, cada qual contendo muitos momento magnéticos. O momento magnético numa célula  $\vec{m}_i = m_{cel} \hat{m}_i = M_S v_{cel} \hat{m}_i$  é a média espacial dos momentos atômicos. A hamiltoniana efetiva do método micromagnético é

$$H = J_{cel} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{m_{cel} \mu_0 M_S}{J_{cel}} \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} + \frac{1}{2} \frac{D_{cel}}{J_{cel}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[ \frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\} \quad (5.6)$$

onde o versor  $\hat{m}_i$  é análogo ao vetor  $\vec{S}_i$  que aparece em (5.5). Os parâmetros das interações entre células são funções de parâmetros experimentais do material e também da discretização do material, ou seja

$$J_{cel} = 2Aa \quad (5.7)$$

é o acoplamento de exchange entre células, e

$$D_{cel} = \frac{a^2}{4\pi} \left( \frac{\mu_0 M_S^2}{2A} \right) 2Aa = \frac{1}{4\pi} \left( \frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 J_{cel} \quad (5.8)$$

é o parâmetro da interação dipolar.

Os parâmetros usados para o Py-79 foram: magnetização de saturação  $M_S = 8.6 \times 10^5$  [A/m] e constante de troca  $A = 13 \times 10^{-12}$  [J/m]. O valor estimado para o comprimento de exchange foi  $\lambda_{exc} = 5.3$  [nm]. A discretização dos nanodiscos de Py foi feita com base neste parâmetro, sendo escolhida a célula de trabalho com dimensões  $a \times a \times a$ , ou seja, a discretização do material foi feita numa rede cúbica simples, com parâmetro de rede  $a = 5$  [nm]. O valor determinado para a razão  $D/J$  para o Py-79 foi

$$\frac{D}{J} = \frac{D_{cel}}{J_{cel}} = 0.0708 \quad (5.9)$$

A versão discreta da equação de Landau-Lifshitz foi utilizada para descrever a evolução temporal dos momentos magnéticos, que escrita numa forma adimensional assume a forma

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = \hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha_{LL} \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \quad (5.10)$$

onde  $\alpha_{LL}$  é o parâmetro de dumping de Landau-Lifshitz. O campo efetivo local  $\vec{B}_i$ , medido em [T], é obtido derivando-se a hamiltoniana em relação às componentes dos momentos magnéticos das células  $\vec{m}_i$ , ou seja,

$$\vec{B}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i} = -\frac{J_{cel}}{m_{cel}} \frac{\partial H'}{\partial \hat{m}_i} = \frac{J_{cel}}{m_{cel}} \vec{b}_i \quad (5.11)$$

onde  $\vec{b}_i$  é o campo efetivo local adimensional.

O incremento de tempo computacional é

$$d\tau = \omega_0 dt \quad (5.12)$$

Note-se que  $\omega_0$  têm dimensão de inverso de tempo, e seu valor determinado para o Py-79 foi

$$\omega_0 = |\gamma| \frac{J_{cel}}{m_{cel}} = \left( \frac{\lambda_{exc}}{a} \right)^2 \mu_0 M_s |\gamma| = 2.13 \times 10^{11} [s^{-1}] \quad (5.13)$$

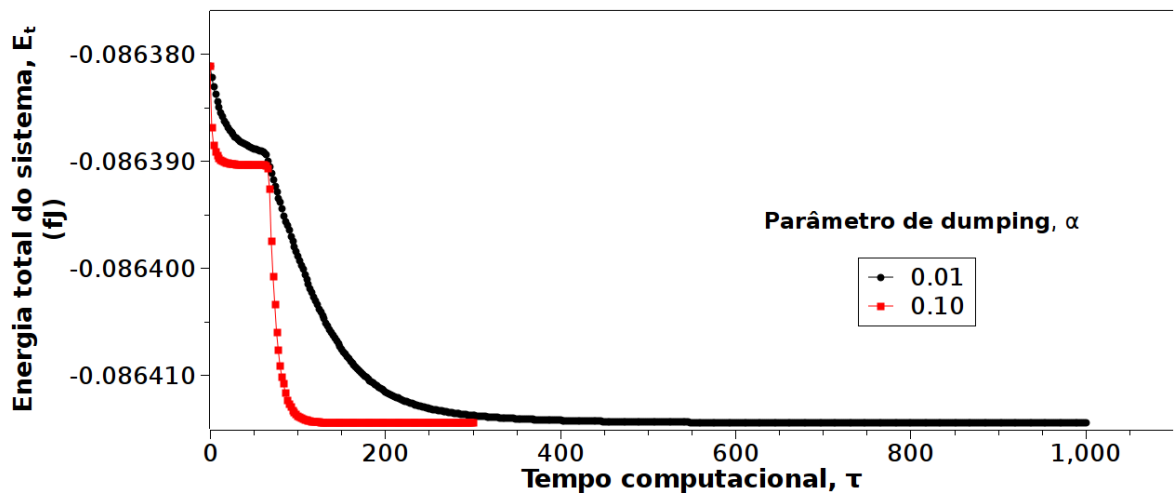
O fator de conversão entre intervalos de tempo computacional e real, é dado por

$$\Delta t = \frac{1}{\omega_0} \Delta \tau \quad (5.14)$$

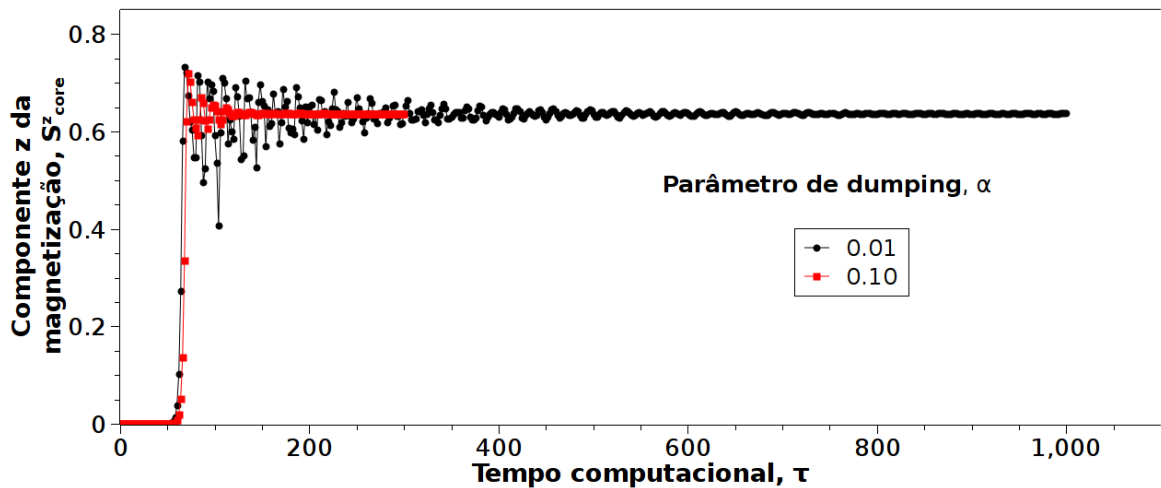
Para integrar o sistema de equações de L.L utilizou-se o método de previsão e correção de quarta ordem, como método de partida foi usado o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Em ambos os integradores, o incremento de tempo usado foi  $d\tau = 10^{-3}$ .

A integração da equação de L.L com damping não nulo “conduz” o sistema para uma configuração na qual a energia é mínima localmente. O estado fundamental pode ser obtido partindo de alguma configuração próxima ao estado de menor energia, cuja configuração pretende-se determinar. Por exemplo, para um nanodisco com dimensões e parâmetros apropriados, sabemos que o estado fundamental é o estado de vórtice. Então pode-se especificar uma configuração inicial do tipo vórtice planar. Depois de algum tempo de simulação, os spins localizados no centro do vórtice podem ou não desenvolver uma componente perpendicular ao plano do disco. Quando a energia total do sistema estabiliza, o estado fundamental é atingido e, os momentos magnéticos estão alinhados com os seus respectivos campos efetivos, os campos internos locais de troca e dipolar. Na figura (5.3) é mostrado o comportamento da energia e da componente z da magnetização no centro do disco em função do tempo computacional, durante a obtenção do estado fundamental.

Embora a constante de damping não influencie no estado final quando o campo externo é nulo, ressalta-se que ele é um parâmetro intrínseco do material. Note-se que o aumento do damping gasta menos tempo computacional para o sistema atingir tal estado de equilíbrio. Por



(a) Energia total do sistema em função do tempo



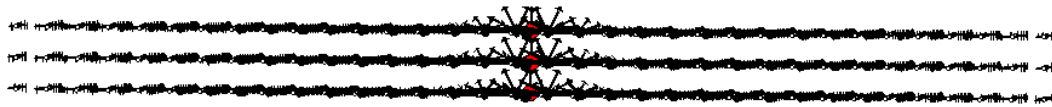
(b) Componente z da magnetização do núcleo do vórtice em função do tempo

**Figura 5.3** – Gráficos mostrando o efeito do parâmetro de damping na obtenção do estado fundamental do sistema.

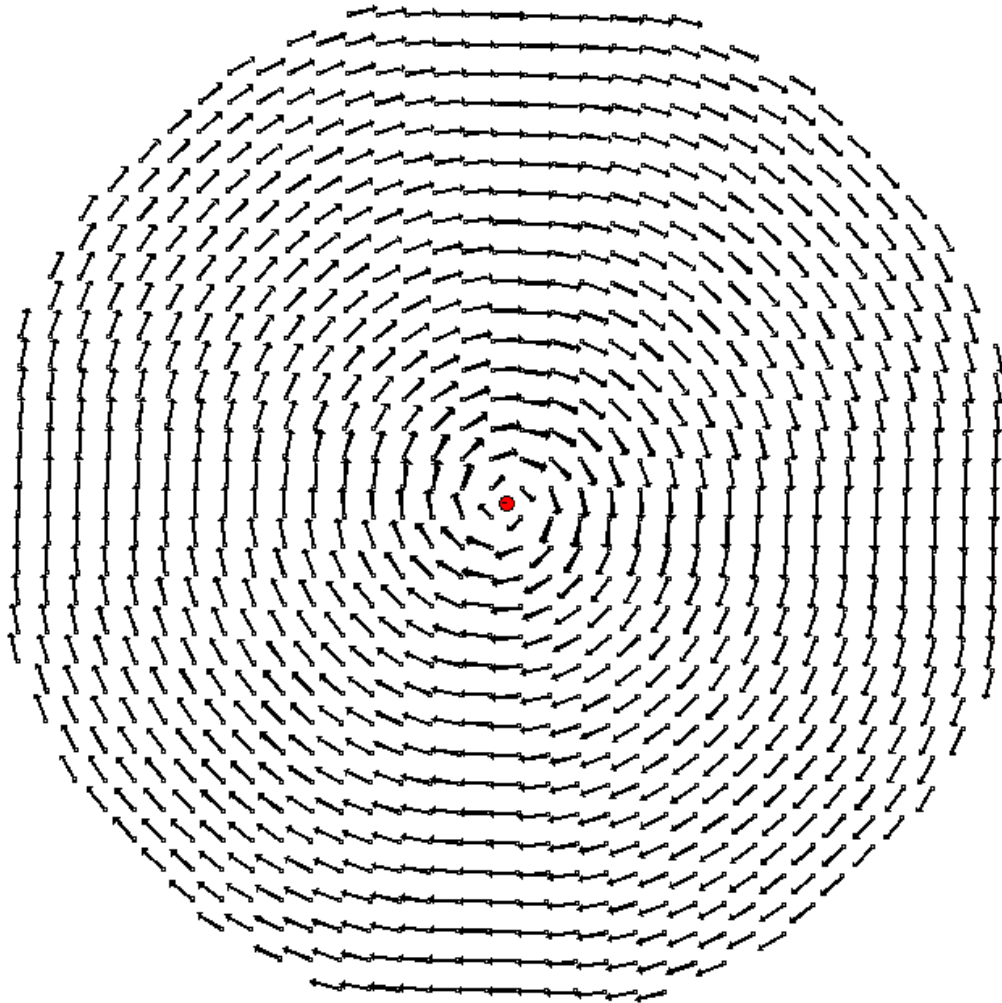
tempo computacional, entenda-se o número de vezes que o sistema é integrado multiplicado pelo incremento de tempo utilizado no integrador.

Para obter os estados fundamentais dos nanodiscos, utilizou-se a equação de Landau-Lifshitz com  $\alpha_{LL} = 0.1$ . Como configuração inicial, utilizou-se vórtice planar, mas os momentos magnéticos da plaqueta que contém o núcleo do vórtice foram levantados para fora do plano, a fim de diminuir o tempo computacional para o sistema atingir o equilíbrio e, também para selecionar a polaridade do núcleo do vórtice. Na figura (5.4) é apresentado a configuração do estado fundamental depois que o sistema é evoluído e atinge o equilíbrio. Verificou-se que o número de passos necessários para os sistema estabilizar depende das dimensões do disco e

também dos parâmetros do material  $D/J$ .



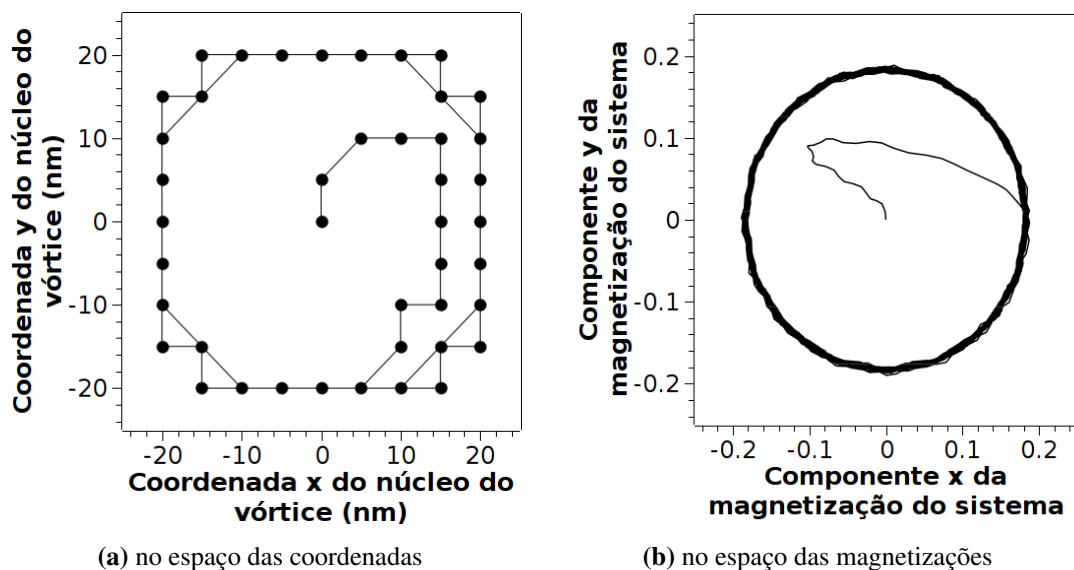
(a) vista de lado



(b) Vista do topo

**Figura 5.4** – Estrutura tridimensional de momentos magnéticos no estado de vórtice num nanodisco cilíndrico. A partícula no centro de cada camada localiza o núcleo do vórtice, seu momento magnético é a média dos momentos localizados nos vértices da plaqueta que contém o núcleo do vórtice. A componente  $z$  do momento magnético da partícula é rotulada como  $S_{core}^z$ .

Uma vez obtidas as configurações de vórtices nos nanodiscos, elas foram utilizadas como condições iniciais para o estudo do modo girotrópico. A resposta dinâmica dos nanodiscos frente a aplicação de um campo externo foi obtida zerando a constante de damping, para obter a frequência fundamental do sistema. Quando o modo girotrópico é excitado, devido a discretização da rede, a trajetória do núcleo do vórtice não é contínua, como pode ser visto na figura (5.5a). Considerando a magnetização média do sistema, devido ao padrão do estado remanente (não perturbado), temos que as componentes no plano do disco são nulas. Porém, se o núcleo do vórtice é deslocado da sua posição de equilíbrio, a deformação no padrão da magnetização do sistema faz com que essas componentes não sejam identicamente nulas. Parametrizando as componentes  $x$  e  $y$  da magnetização média do sistema no parâmetro tempo, a “trajetória” no espaço da magnetização, pode ser vista na figura (5.5b).



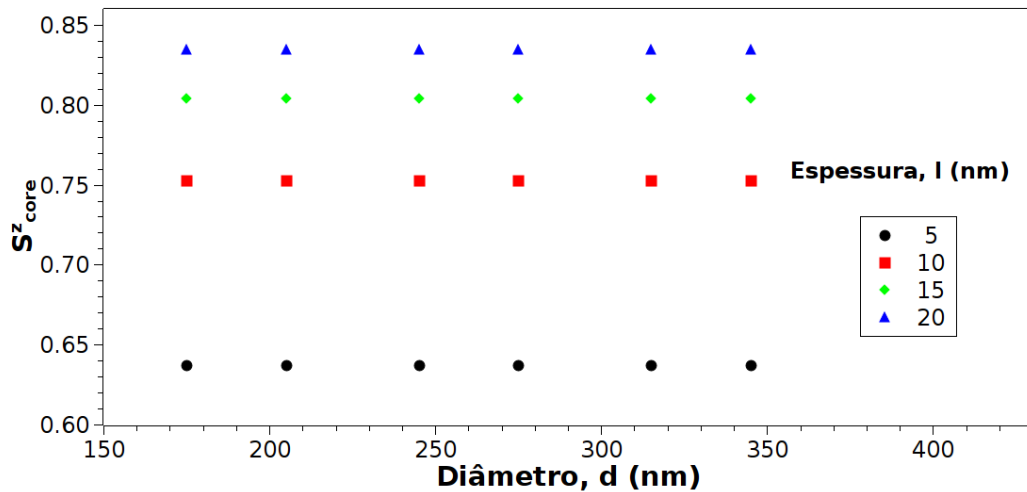
**Figura 5.5** – Gráficos das trajetórias do núcleo do vórtice, quando o modo girotrópico é excitado num disco de  $d = 175$  [nm] e  $l=10$  [nm]. Na figura (a) é mostrada apenas a trajetória do núcleo do vórtice na camada mais externa, ressalta-se que os núcleos em diferentes camadas estão fortemente acoplados.



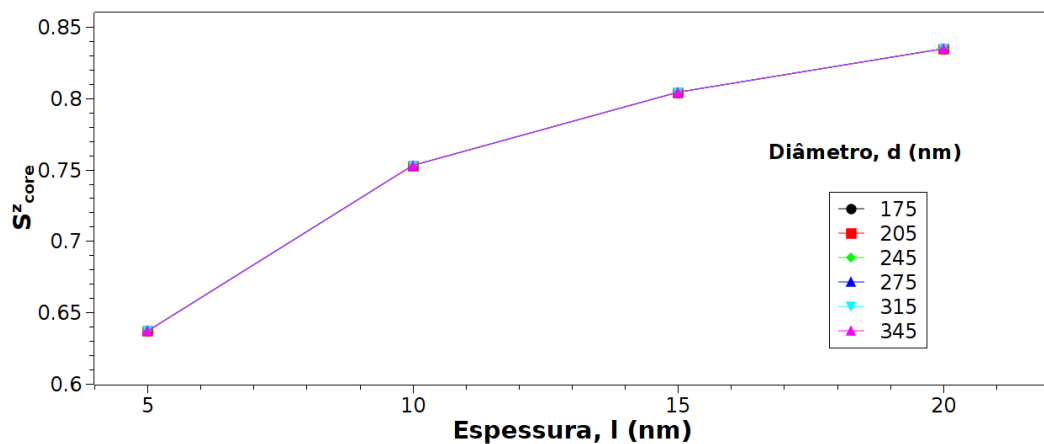
## 5.3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

### 5.3.1 ESTADO FUNDAMENTAL

Para os valores de  $D/J$  considerados, foi observado que a componente da magnetização fora do plano do núcleo vórtice parece não depender do diâmetro ou essa dependência é muito fraca. Entretanto, a componente da magnetização perpendicular ao plano do disco depende consideravelmente da espessura do nanodisco. Nas figuras (5.6) e (5.7) são mostrados esses comportamentos globais para o permalloy-79.



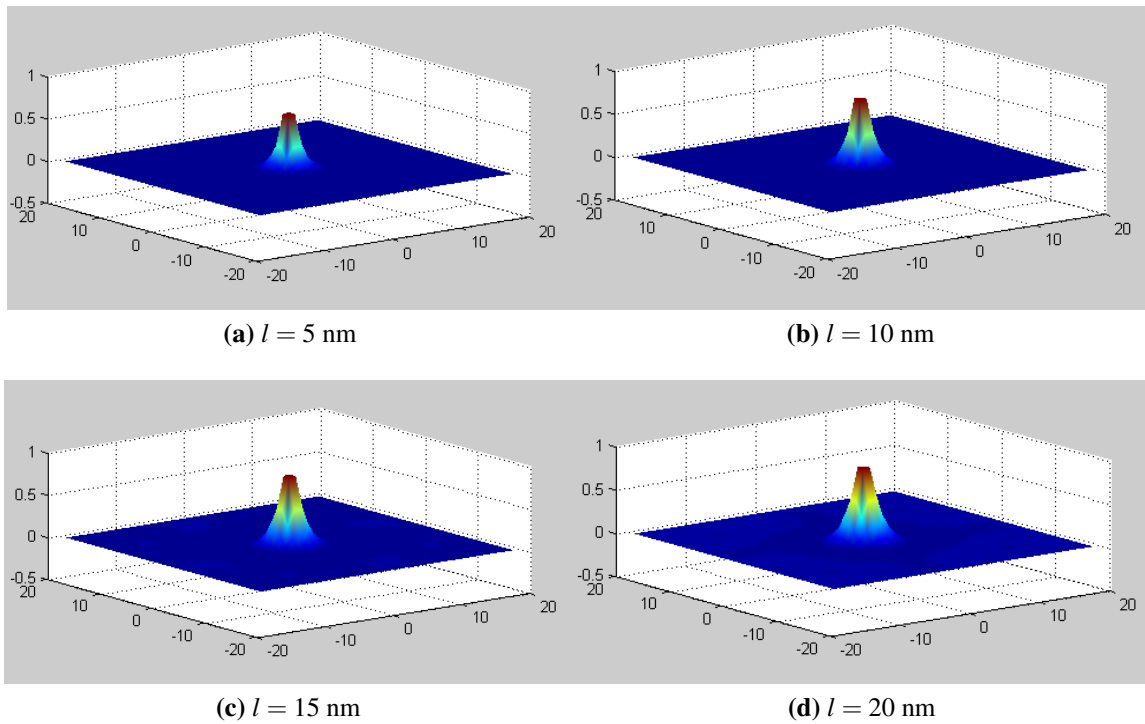
**Figura 5.6** – Gráfico da componente  $z$  da magnetização do núcleo do vórtice em função do diâmetro para várias espessuras, em nanodiscos de Py-79.



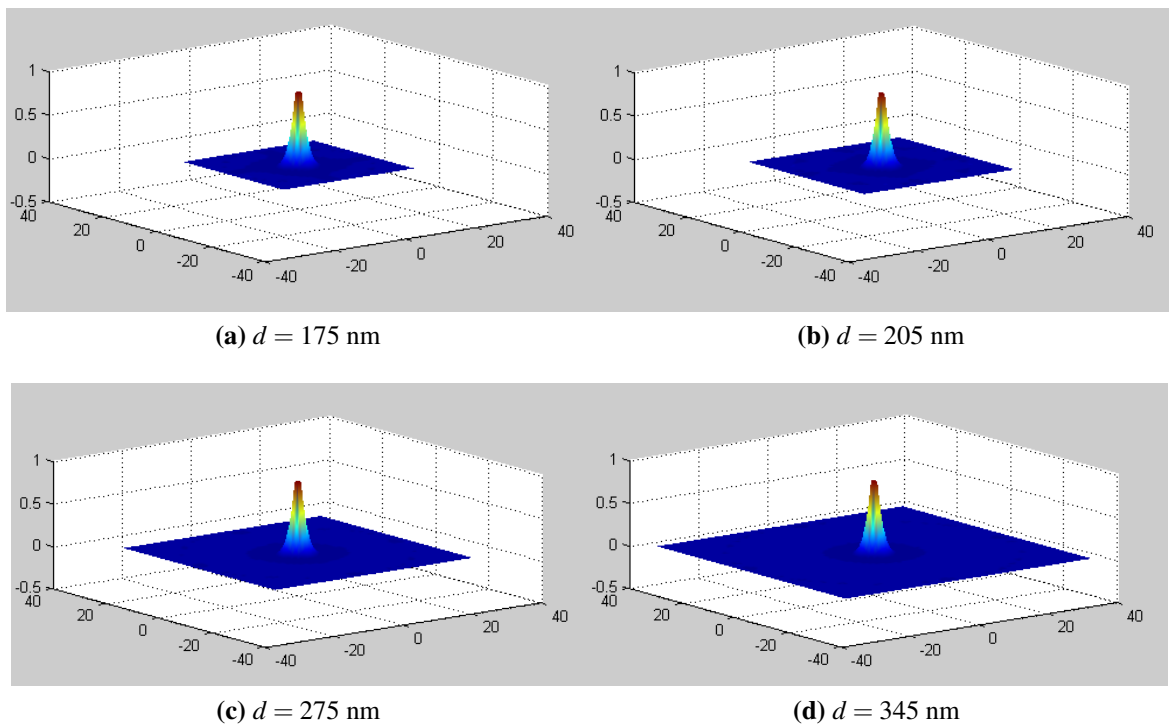
**Figura 5.7** – Gráfico da componente  $z$  da magnetização do núcleo do vórtice em função da espessura para vários diâmetros, em nanodiscos de Py-79.

As figuras (5.8) e (5.9) mostram representações tridimensionais do núcleo do vórtice, mais especificamente, plotou-se a distribuição da componente  $z$  dos momentos magnéticos localizados nos sítios da camada mais externa, para evidenciar como a componente da magnetização perpendicular ao plano depende das dimensões do nanodisco. Note-se que o núcleo do vórtice pode ser caracterizado por dois parâmetros, a altura e a largura do “chapéu”, que de certa forma estão relacionados. Para um diâmetro fixo, se a espessura (número de camadas de momentos magnéticos) aumenta então tanto a altura quanto a largura do núcleo do vórtice aumentam. Entretanto, se a espessura é mantida fixa, e o diâmetro varia, então a forma do chapéu permanece praticamente a mesma, isto é, tanto a altura quanto a largura do núcleo do vórtice não variam, ou variam muito pouco. Diante desses resultados, conclui-se que a forma do núcleo do vórtice depende da espessura, isto é, tanto a largura (o raio) quanto a altura do chapéu, aumentam quando o disco torna-se mais espesso. A variação na forma do núcleo do vórtice tem sua origem na interação entre momentos localizados próximos ao centro do disco, já que não é observada a dependência com o diâmetro do nanodisco. Ao aumentar o número de camadas de momentos magnéticos, estamos favorecendo o alinhamento dos momentos que formam o núcleo do vórtice na direção perpendicular ao plano do disco. É como se o sistema adquirisse uma anisotropia de eixo-fácil, ou equivalentemente, se fosse aplicado um campo magnético muito fraco no sentido da polarização do vórtice. Na região do caroço do vórtice, tanto a interação de troca quanto a dipolar são minimizadas localmente com o aumento da espessura. Considerando a interação entre momentos de camadas adjacentes no caroço do vórtice, a direção que os une é justamente a direção perpendicular ao plano do disco, então o termo na interação dipolar com fator 3 é minimizado.

Para um diâmetro fixo, se a espessura é aumentada progressivamente, a altura e a largura do chapéu aumentam. A altura do chapéu fica saturada quando os momentos mais próximos da singularidade estão perpendiculares ao plano, a partir desse ponto apenas a largura aumenta. Para uma determinada razão ( $l/d$ ) o estado de vórtice dá lugar ao estado de domínio único no qual todos os momentos magnéticos estarão alinhados na direção  $z$ .



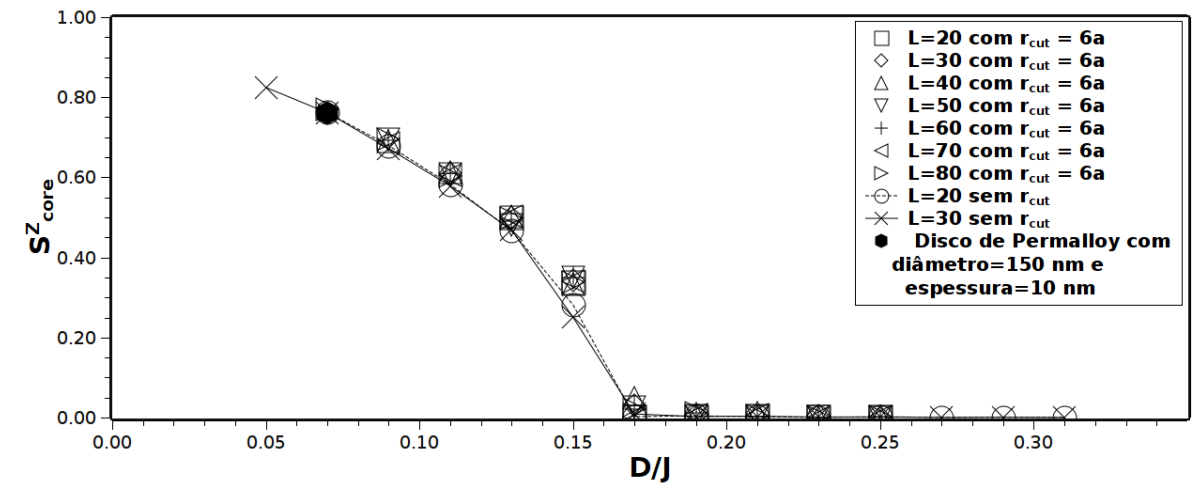
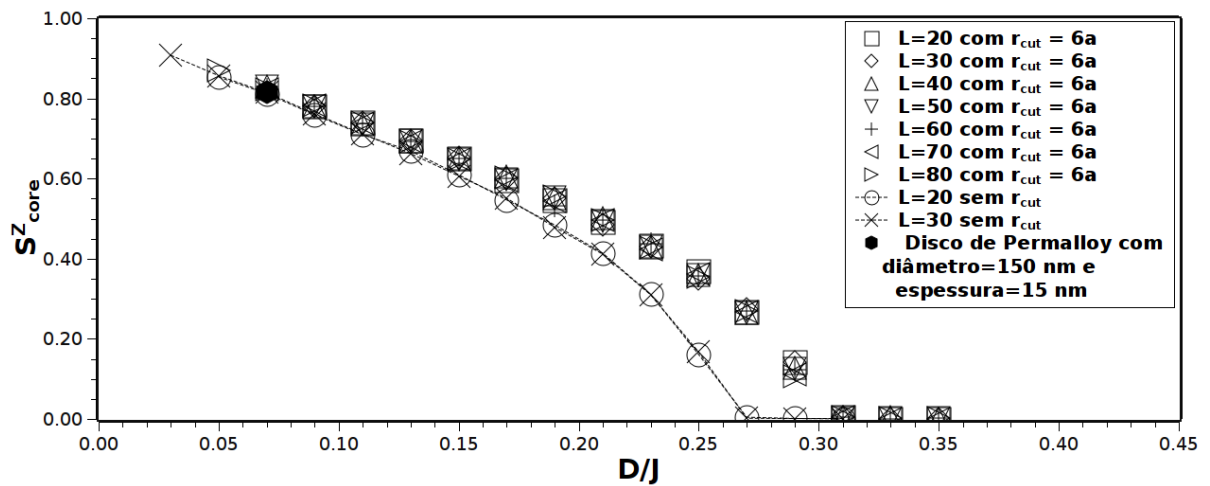
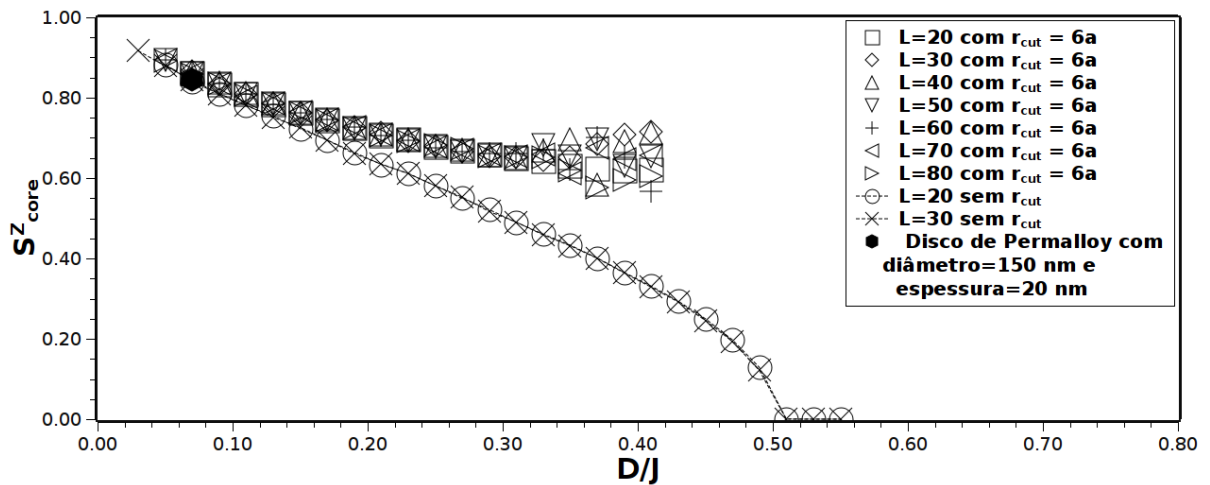
**Figura 5.8** – Gráficos da componente  $z$  dos momentos magnéticos localizados nos sítios da camada mais externa para 4 valores de espessura em nanodiscos de Py-79 com diâmetro  $d = 175 \text{ [nm]}$ .



**Figura 5.9** – Gráficos da componente  $z$  dos momentos magnéticos localizados nos sítios da camada mais externa para 4 valores de diâmetro em nanodiscos de Py-79 com espessura  $l = 20 \text{ nm}$ .

Para investigar a formação do vórtice em outros materiais, realizou-se várias simulações varrendo a razão  $D/J$  no intervalo  $[0.02, 0.55]$  para vários diâmetros  $L$  entre  $[20, 80]$  e espessuras (número de camadas) com  $z = 2, 3$  e  $4$ . A fim de observar a influência do corte na interação dipolar, algumas simulações foram realizadas considerando o raio de corte  $r_{cut} = 6a$ . Na figura (5.10) pode-se ver que quando a espessura aumenta o corte introduz distorções cada vez mais fortes no comportamento de  $S_{core}^z$ .

É evidente da figura (5.10) que existe um valor crítico  $D/J = D_c/J$  separando as regiões de vórtices com e sem magnetização perpendicular ao plano do disco. Além disso, observa-se que  $D_c/J$  é independente do diâmetro, mas depende fortemente da espessura. Para  $z = 2, 3$  e  $4$ , o valores de  $D_c/J$  são  $0.165, 0.260$  e  $0.510$ , respectivamente. O aumento de  $D_c/J$  com o aumento de  $z$  indica que aumentar a espessura têm o mesmo efeito que introduzir uma anisotropia que causa uma redução na energia necessária para o vórtice desenvolver a componente fora do plano [35, 61, 62, 63, 64], o que está de acordo com os resultados da referência [6].

(a)  $z=2$ (b)  $z=3$ (c)  $z=4$ 

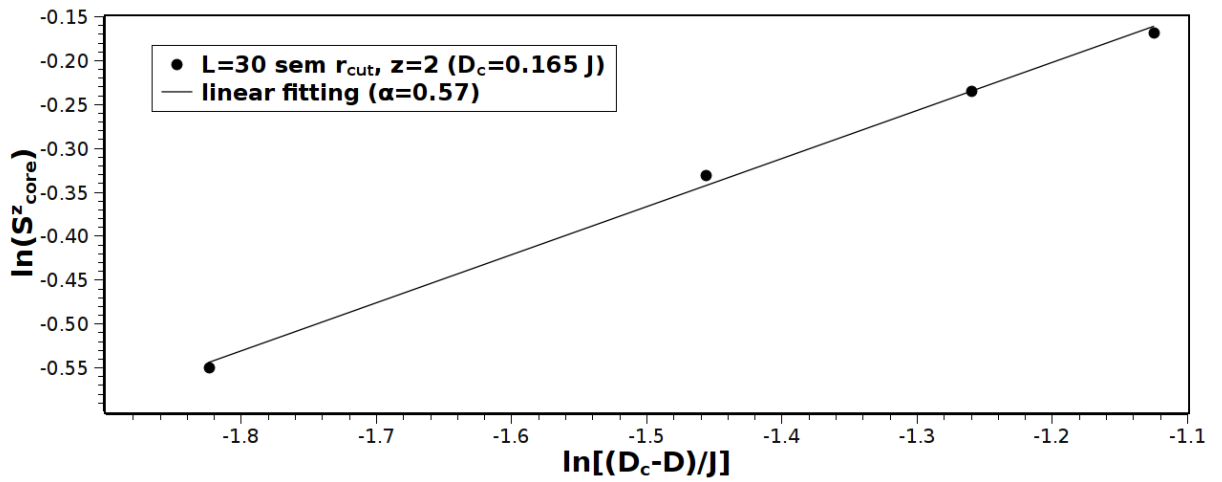
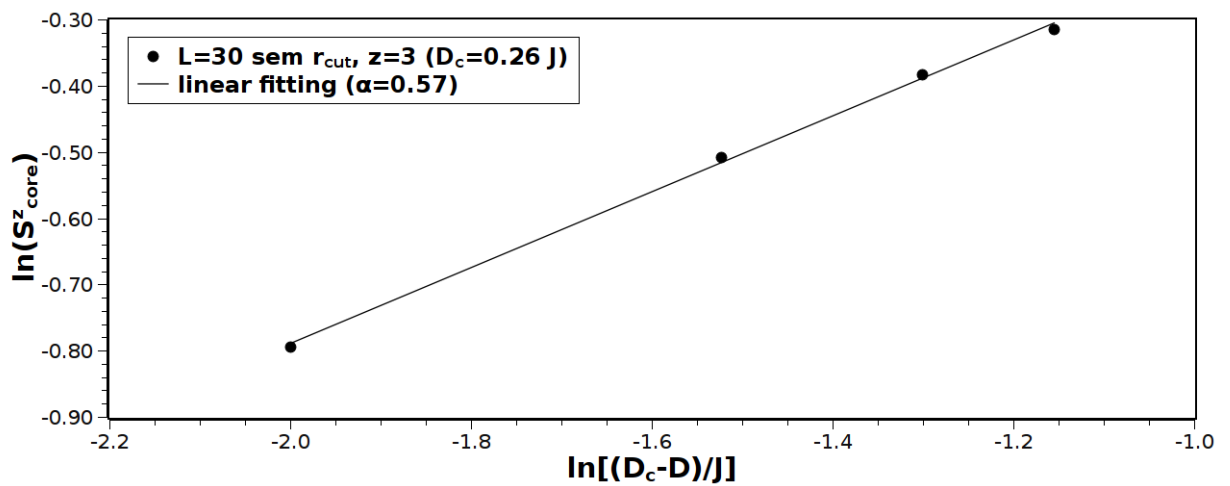
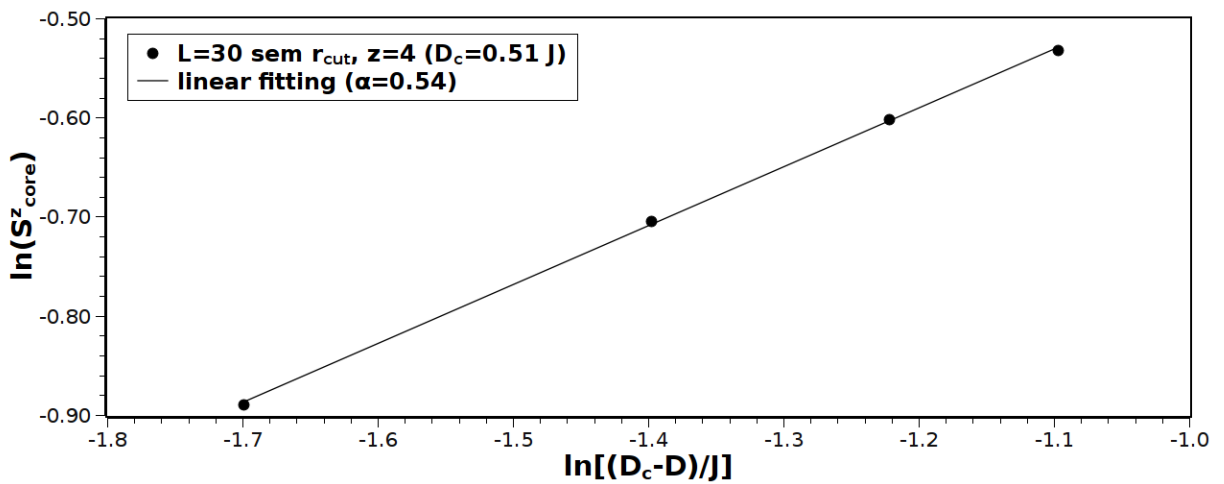
**Figura 5.10** – Gráficos do comportamento da componente fora do plano,  $Sz_{core}$ , em função do parâmetro  $D/J$ , para vários diâmetros.

O comportamento crítico de  $S_{core}^z$  em função do parâmetro  $D/J$  pode ser descrito por uma função do tipo,

$$S_{core}^z \propto \left( \frac{D_c - D}{J} \right)^\alpha \quad (5.15)$$

onde o expoente  $\alpha$  pode ser estimado plotando  $\ln[S_{core}^z]$  em função de  $\ln[(D_c - D)/J]$ , para valores de  $D/J$  próximos a  $D_c/J$ .

Na figura (5.11) é mostrado esses gráficos para  $z = 2, 3$  e  $4$ , sendo estes resultados obtidos sem o corte na interação dipolar. Os valores estimados para  $\alpha$  foram  $0.57$ ,  $0.57$  e  $0.54$ , respectivamente. Esses resultados sugerem que  $\alpha$  é independente da espessura do nanodisco.

(a)  $z=2$ (b)  $z=3$ (c)  $z=4$ 

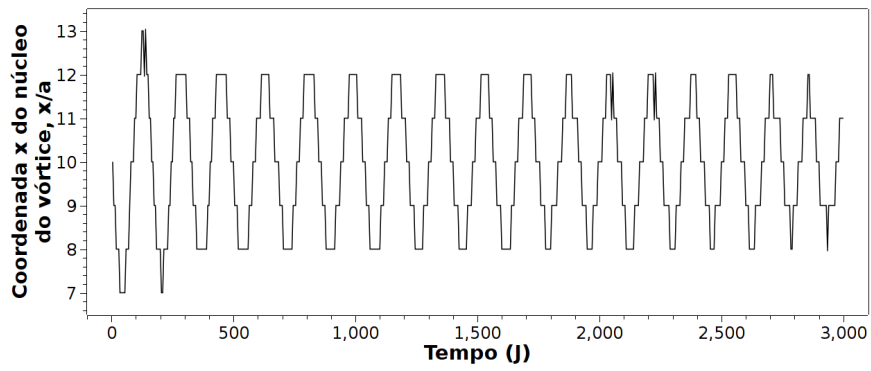
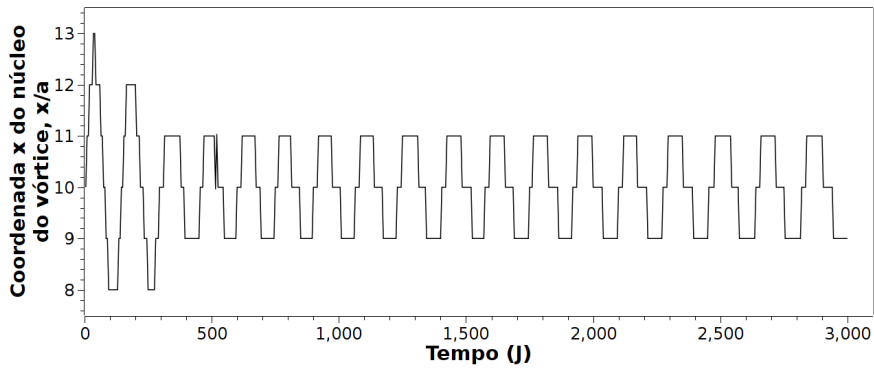
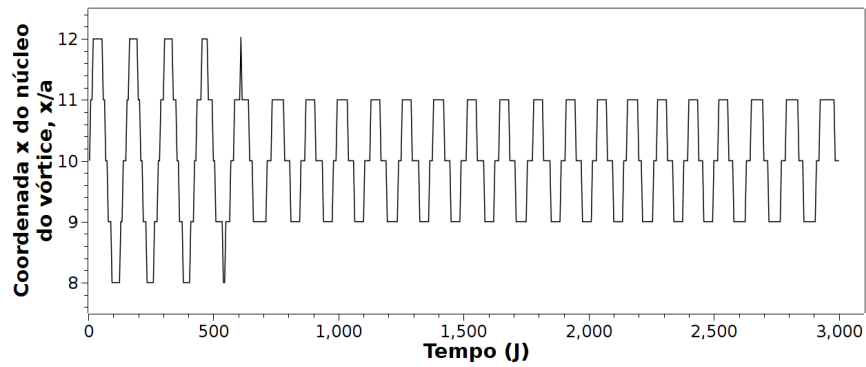
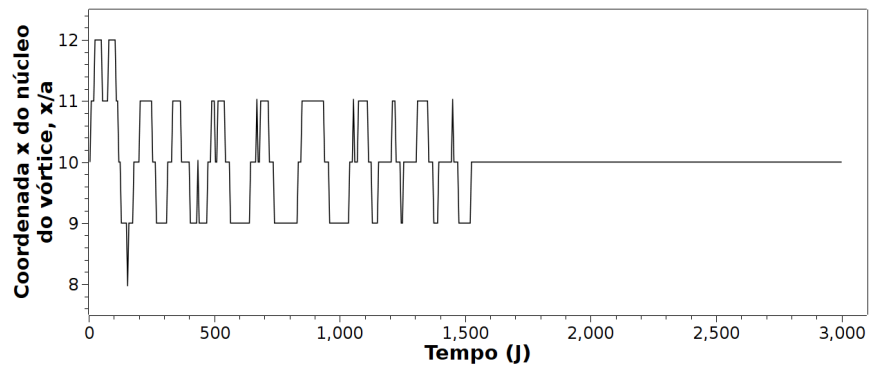
**Figura 5.11** – Gráficos do comportamento crítico do  $\ln[S_{core}^z]$  em função do  $\ln[(D_c - D)/J]$  para valores de  $D/J$  próximos a  $D_c/J$ .

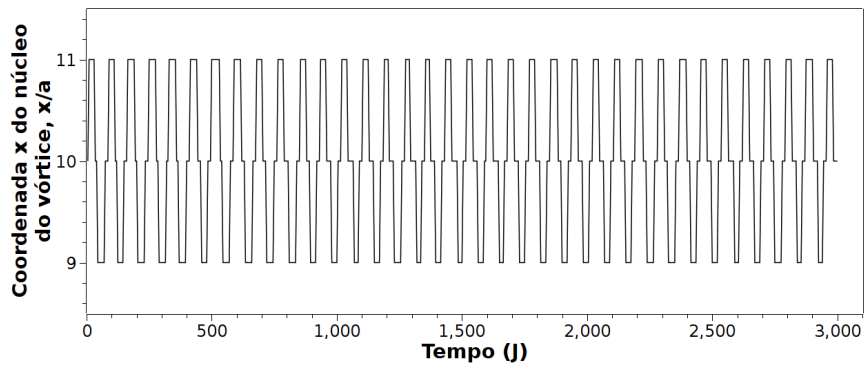
### 5.3.2 MODO GIROTROPICO

Para estudar o comportamento do modo girotrópico, aplicou-se um campo magnético homogêneo e independente do tempo no plano do disco, de magnitude 0.03 J. Para os nanodiscos analisados, este valor de campo foi suficientemente fraco para excitar o modo girotrópico sem destruir o estado de vórtice. Nas figuras (5.12), (5.13) e (5.14) plotou-se os gráficos da posição  $x$  do núcleo do vórtice em função do tempo de simulação para  $z = 2, 3$  e  $4$ , respectivamente. Um resultado conhecido, e que segue da equação de Thiele<sup>1</sup>, é que vórtices planares  $S_{core}^z = 0$ , não exibem tal movimento de rotação em torno de um ponto fixo. Por outro lado, para as três espessuras consideradas, constatou-se que existe um valor mínimo da componente da magnetização fora do plano  $S_{core}^z$  para que o modo girotrópico seja excitado. Na figura (5.12) plotamos a coordenada  $x$  do núcleo do vórtice (em unidades do parâmetro de rede  $a$ ) em função do tempo (em unidades de  $J$ ) para nanodiscos com  $L = 20$ ,  $z = 2$ , considerando  $D = 0.10J$  ( $S_{core}^z = 0.61$ ) figura (5.12a),  $D = 0.11J$  ( $S_{core}^z = 0.55$ ) figura (5.12b),  $D = 0.12J$  ( $S_{core}^z = 0.50$ ) figura (5.12c) e  $D = 0.13J$  ( $S_{core}^z = 0.45$ ) figura (5.12d). Para  $z = 2$ , se  $S_{core}^z < 0.50$ , não há modo girotrópico. Na figura (5.13) plotamos a coordenada  $x$  do núcleo do vórtice em função do tempo para nanodiscos com  $L = 20$ ,  $z = 3$ , considerando  $D = 0.17J$  ( $S_{core}^z = 0.55$ ) figura (5.13a),  $D = 0.19J$  ( $S_{core}^z = 0.50$ ) figura (5.13b),  $D = 0.20J$  ( $S_{core}^z = 0.45$ ) figura (5.13c) e  $D = 0.21J$  ( $S_{core}^z = 0.40$ ) figura (5.13d). Para  $z = 3$ , observamos que se  $S_{core}^z < 0.55$ , não há modo girotrópico. E na figura (5.14) plotamos a coordenada  $x$  do núcleo do vórtice em função do tempo para nanodiscos com  $L = 20$ ,  $z = 4$ , considerando  $D = 0.21J$  ( $S_{core}^z = 0.63$ ) figura (5.14a),  $D = 0.23J$  ( $S_{core}^z = 0.60$ ) figura (5.14b),  $D = 0.27J$  ( $S_{core}^z = 0.55$ ) figura (5.14c) e  $D = 0.33J$  ( $S_{core}^z = 0.46$ ) figura (5.14d). Para  $z = 4$ , observamos que se  $S_{core}^z < 0.60$ , não há modo girotrópico.

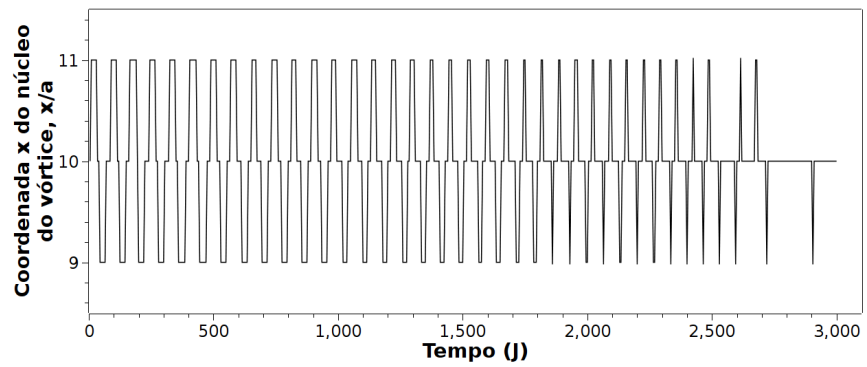
<sup>1</sup> veja seção 4.3.



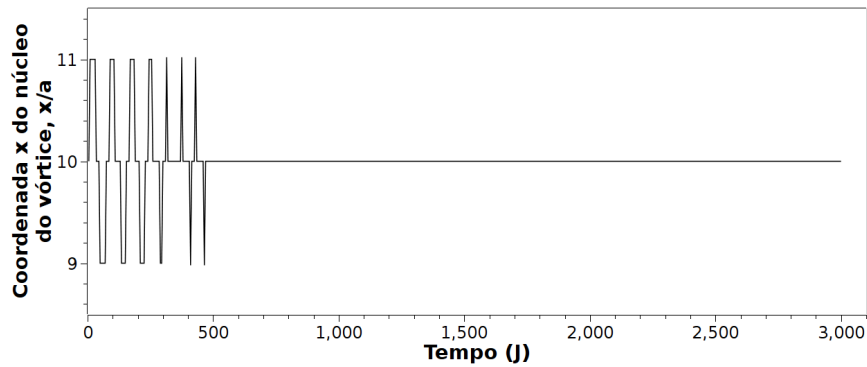
(a)  $S_{core}^z = 0.61, D = 0.10 J$ (b)  $S_{core}^z = 0.55, D = 0.11 J$ (c)  $S_{core}^z = 0.50, D = 0.12 J$ (d)  $S_{core}^z = 0.45, D = 0.13 J$ **Figura 5.12** – O movimento girotrópico em nanodiscos com  $L = 20$  e  $z = 2$ .



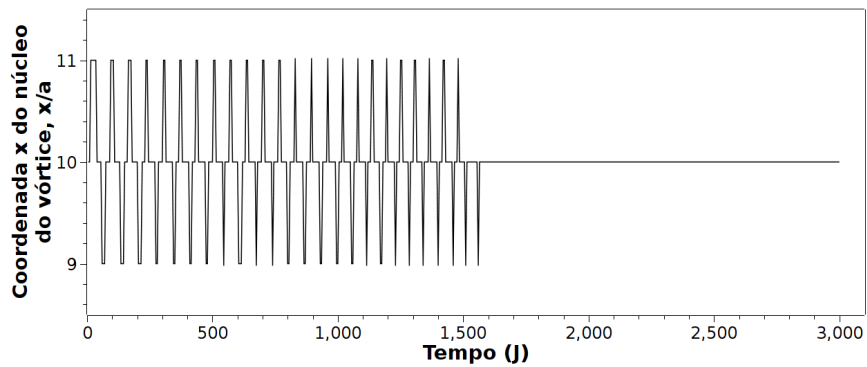
(a)  $S_{core}^z = 0.55$ ,  $D = 0.17 J$



(b)  $S_{core}^z = 0.50$ ,  $D = 0.19 J$

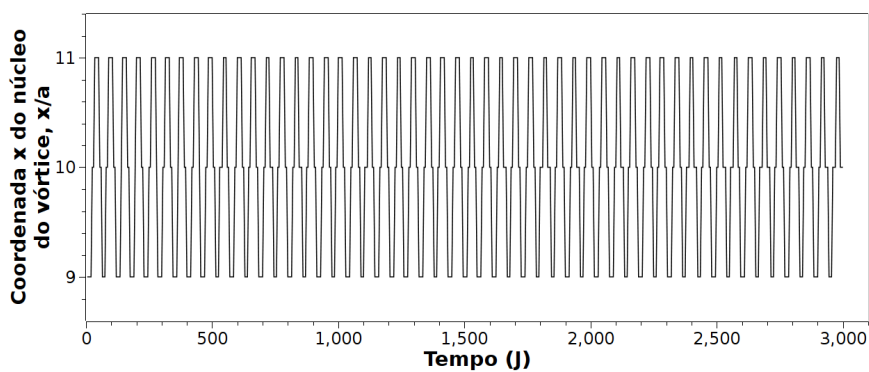


(c)  $S_{core}^z = 0.45$ ,  $D = 0.20 J$

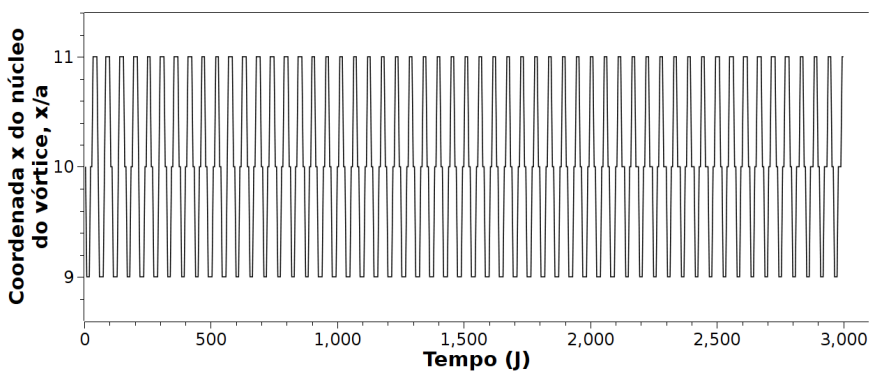


(d)  $S_{core}^z = 0.40$ ,  $D = 0.21 J$

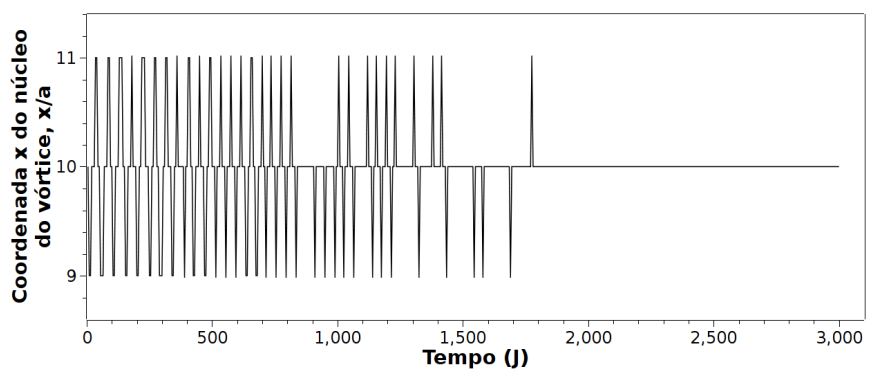
**Figura 5.13** – O movimento girotrópico em nanodiscos com  $L = 20$  e  $z = 3$ .



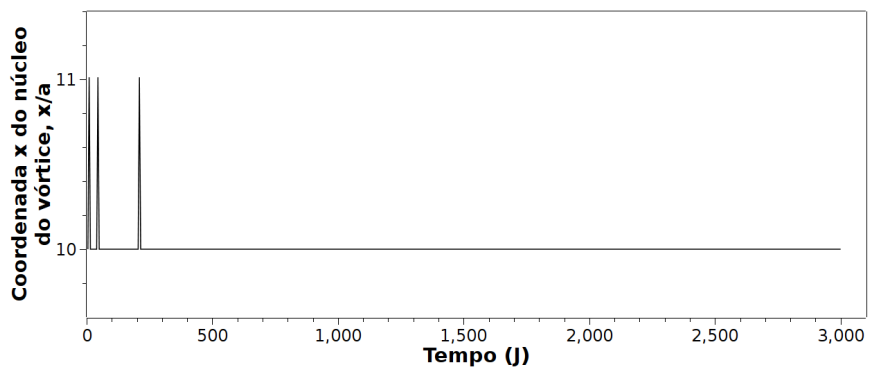
(a)  $S_{core}^z = 0.63$ ,  $D = 0.21 J$



(b)  $S_{core}^z = 0.61$ ,  $D = 0.23 J$



(c)  $S_{core}^z = 0.55$ ,  $D = 0.27 J$



(d)  $S_{core}^z = 0.45$ ,  $D = 0.33 J$

**Figura 5.14** – O movimento girotrópico em nanodiscos com  $L = 20$  e  $z = 4$ .

Os resultados nas figuras (5.12), (5.13) e (5.14) mostram claramente que existe um valor mínimo para o módulo de  $S_{core}^z = S_{core-mim}^z$  limitando o modo girotrópico. Encontramos para  $(z = 2)$   $S_{core-mim}^z = 0.50$ ,  $(z = 3)$   $S_{core-mim}^z = 0.55$  e  $(z = 4)$   $S_{core-mim}^z = 0.60$ . Ressalta-se que esse valor mínimo aumenta com a espessura. A partir desses resultados conclui-se que, se a espessura do nanodisco aumenta, o núcleo do vórtice torna-se mais preso.

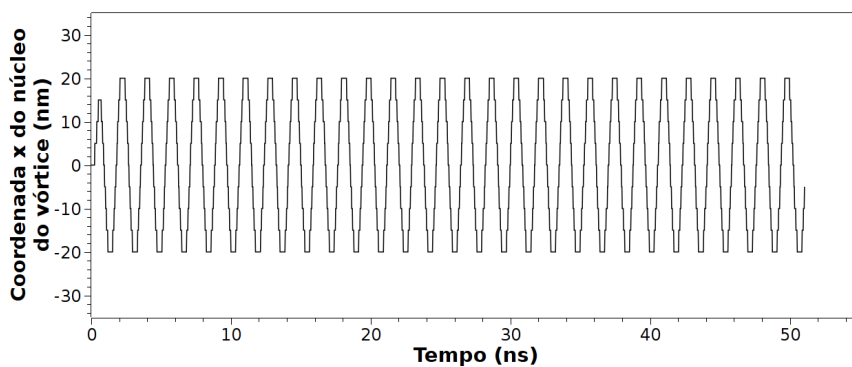
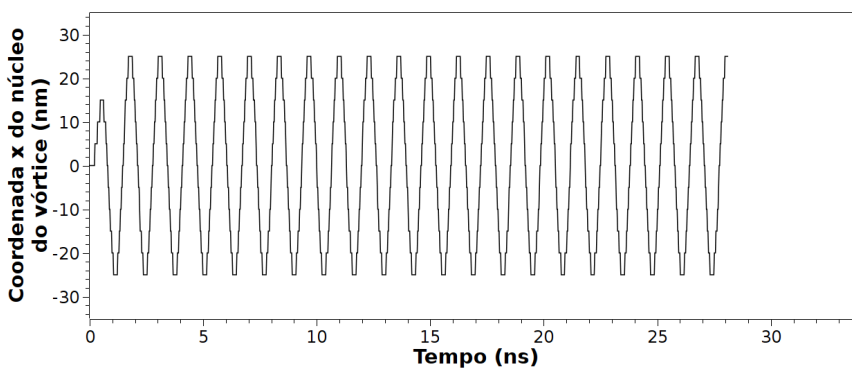
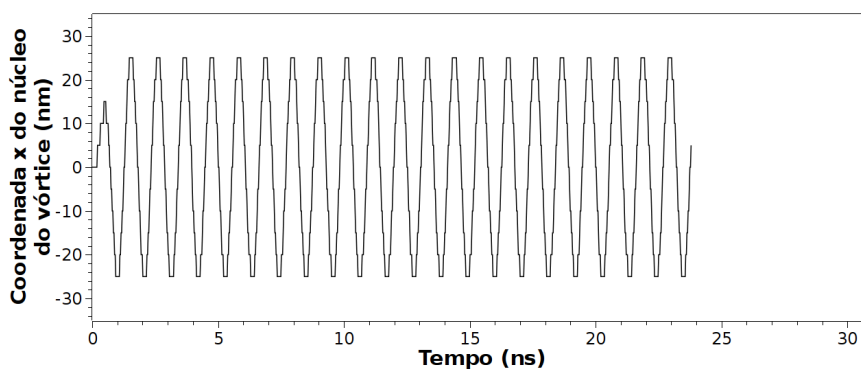
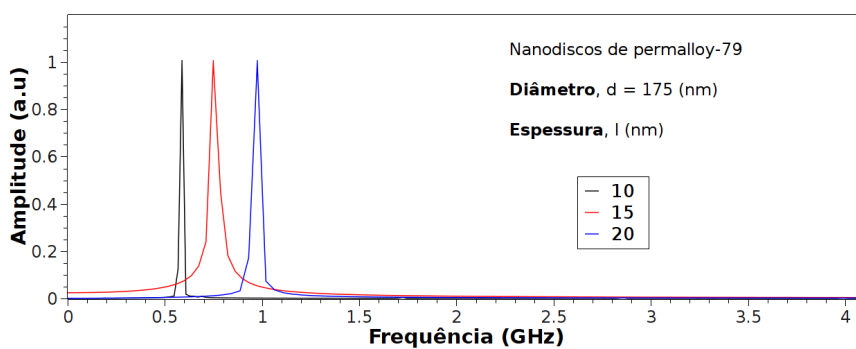
Observamos nas figuras (5.12), (5.13) e (5.14) que, para um diâmetro fixo, se a espessura aumenta, a frequência do modo girotrópico aumenta. Concluímos que a frequência aumenta com a razão entre espessura e o raio do nanodisco [65], que está em concordância qualitativa com os resultados obtidos experimentalmente [9, 66].

Através de simulações micromagnéticas, fez-se um estudo quantitativo da frequência do movimento girotrópico em nanodiscos de permalloy-79, em função da espessura e do diâmetro do disco. A perturbação nos sistemas consistiu num campo senoidal de amplitude 10 [mT], mantido ligado durante um período temporal. Essa amplitude de campo foi suficiente para excitar o movimento girotrópico nos discos analisados, como pode nas figuras (5.15) e (5.16). Antes de discutir essas figuras note que a razão  $D/J$  do permalloy é pequena, veja a equação (5.9), que faz com que esse material apresente um valor apreciável na componente da magnetização fora do plano no núcleo do vórtice em relação a outros materiais, ver figura (5.10). Na figura (5.7), observamos que a componente da magnetização fora do plano no núcleo do vórtice aumenta com a espessura do disco, em cada valor de espessura  $S_{core}^z$  para Py-79 é maior do que a componente mínima  $S_{core-mim}^z$ , por essa razão o modo girotrópico é observado em nanodiscos de Py-79. Em unidades de momento magnético, têm-se a seguinte relação [29],  $m_{core}^z = m_{cel} S_{core}^z = M_S v_{cel} S_{core}^z$ . Utilizando a magnetização de saturação do permalloy  $M_S = 8.6 \times 10^5$  [A/m] e como a discretização foi feita numa rede cúbica simples de parâmetro de rede  $a = 5$  [nm], têm-se  $v_{cel} = a^3$ , obtemos  $m_{cel} = 1.078 \times 10^{-19}$  [A.m<sup>2</sup>]. Para nanodiscos de espessura  $l = 10$ [nm]  $m_{core}^z \approx 8.2 \times 10^{-20}$  [A.m<sup>2</sup>], para  $l = 15$ [nm]  $m_{core}^z \approx 8.7 \times 10^{-20}$  [A.m<sup>2</sup>] e para  $l = 20$ [nm]  $m_{core}^z \approx 9.1 \times 10^{-20}$  [A.m<sup>2</sup>].

Na figura (5.15) plotamos a coordenada x do núcleo do vórtice em relação ao centro do

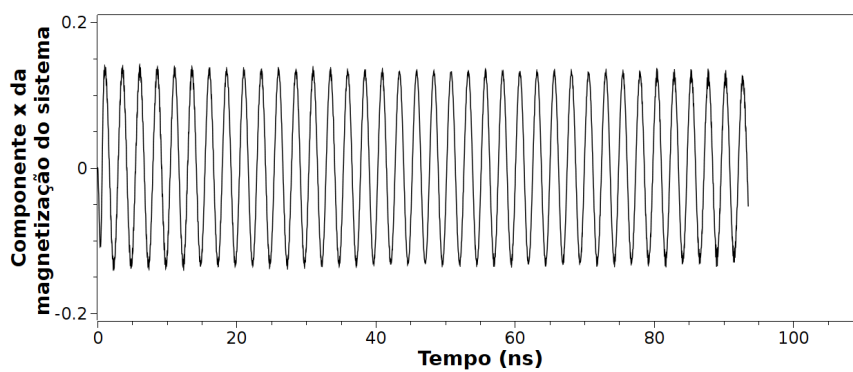
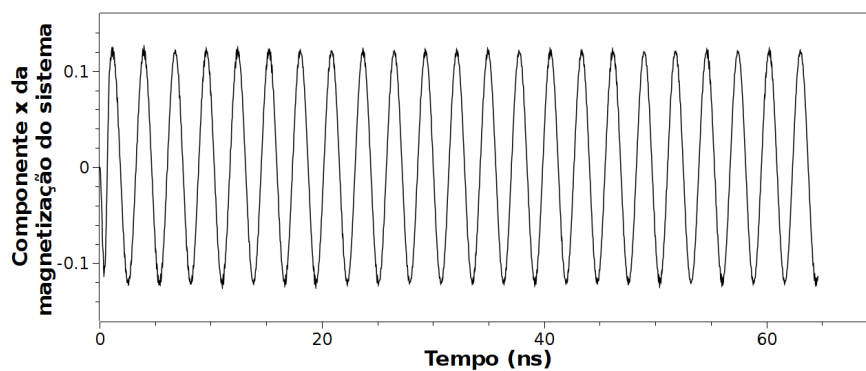
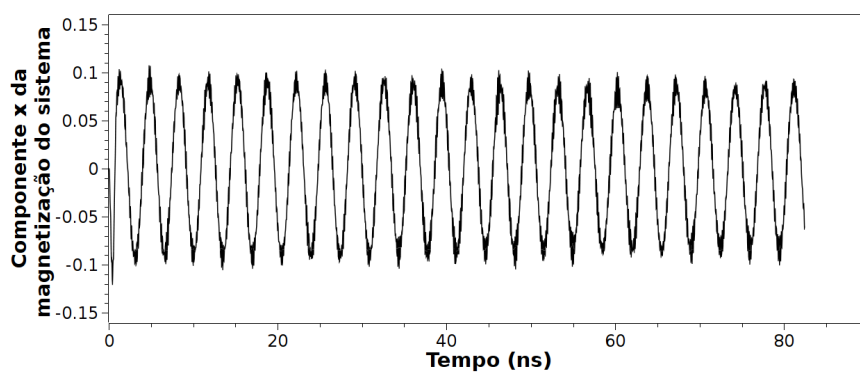
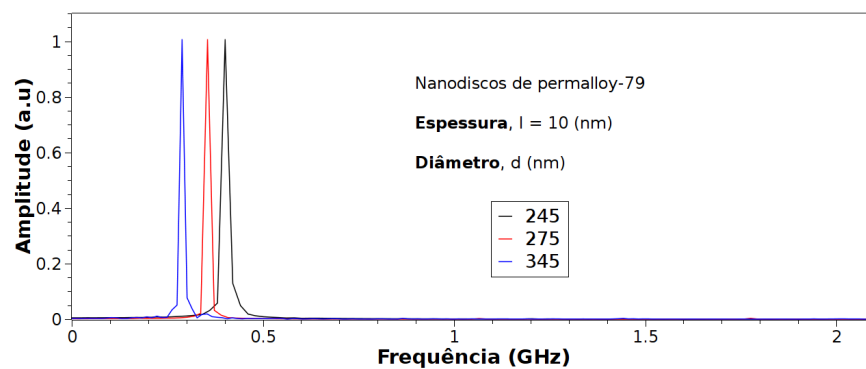
disco em [nm] em função do tempo em [ns] para nanodiscos de Permalloy-79 com  $d = 175$  [nm]. Considerando  $l = 10$ [nm] ( $S_{core}^z = 0.75288$ ) figura (5.15a),  $l = 15$ [nm] ( $S_{core}^z = 0.78599$ ) figura (5.15b) e para  $l = 20$ [nm] ( $S_{core}^z = 0.83465$ ) figura (5.15c). Os espectros de frequência foram obtidos através do método da transformada de Fourier rápida “Fast Fourier Transforms” (FFT) via o software QtiPlot. Embora fosse possível obter os espectros de frequência a partir das coordenadas do núcleo vórtice, uma análise mais refinada foi conseguida através das componentes da magnetização do sistema, as larguras dos picos de frequência eram mais estritas, portanto, mais definidas. Na figura (5.15d) os espectros de frequência foram sobrepostos para evidenciar que se o diâmetro é mantido fixo, então o pico na frequência é deslocado para a direita quando a espessura aumenta, ou seja, a frequência do modo girotrópico aumenta quando o nanodisco torna-se mais espesso.

Na figura (5.16) plotamos a componente x da magnetização do sistema em função do tempo para nanodiscos de Permalloy-79 com  $l = 10$  [nm]. Considerando  $d = 245$ [nm] ( $S_{core}^z = 0.75286$ ) figura (5.16a),  $d = 275$ [nm] ( $S_{core}^z = 0.75285$ ) figura (5.16b) e para  $d = 345$ [nm] ( $S_{core}^z = 0.75285$ ) figura (5.16c). Na figura (5.16d) os espectros de frequência foram sobrepostos para evidenciar que se a espessura é mantido fixa, então o pico na frequência é deslocado para a esquerda quando o diâmetro aumenta, ou seja, a frequência do modo girotrópico diminui com o diâmetro do nanodisco aumenta.

(a)  $S_{core}^z = 0.75288$ ,  $l = 10$  nm(b)  $S_{core}^z = 0.78599$ ,  $l = 15$  nm(c)  $S_{core}^z = 0.83465$ ,  $l = 20$  nm

(d) FFT's para discos com diferentes espessuras

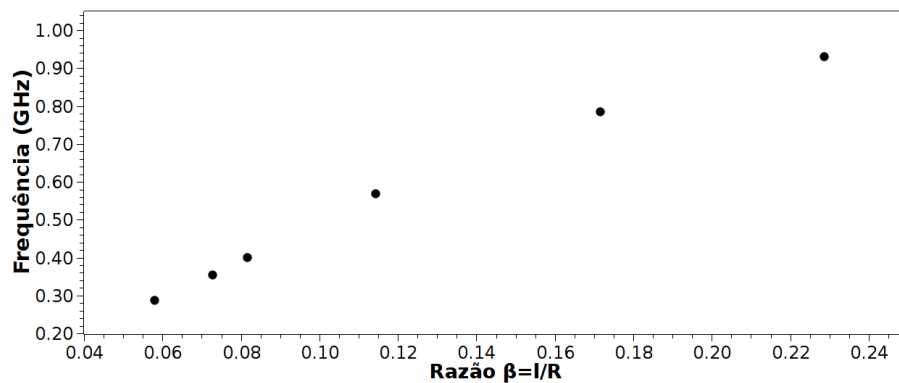
**Figura 5.15** – O movimento girotrópico em nanodiscos de Py-79 com diâmetros  $d = 175$  [nm].

(a)  $S_{core}^z = 0.75286$ ,  $d = 245$  nm(b)  $S_{core}^z = 0.75285$ ,  $d = 275$  nm(c)  $S_{core}^z = 0.75285$ ,  $d = 345$  nm

(d) FFT's para nanodiscos com diferentes diâmetros

**Figura 5.16** – O movimento girotrópico em nanodiscos de Py-79 com espessuras  $l = 10$  [nm].

Com intuito de comparar esses resultados com os resultados experimentais e teóricos já conhecidos, plotou-se o gráfico da frequência em função da razão entre a espessura e o raio do nanodisco,  $\beta = l/R$ , tal comportamento é mostrado na figura (5.17). Conclui-se que a autofrequência do modo girotrópico ocorre abaixo da faixa de [GHz] e aumenta com a razão  $\beta$ , que está em boa concordância com os resultados experimentais para nanodiscos de Permalloy apresentados nas referências [9, 66, 67]. Note-se que essa dependência é linear para pequenos valores de  $\beta$ .



**Figura 5.17** – Gráfico da frequência do modo girotrópico em função da razão entre espessura e raio em nanodiscos de Py-79.



## 6 CONCLUSÃO

Neste dissertação usamos simulações numéricas para estudar nanodiscos magnéticos, cujos estados fundamentais correspondem a uma configuração rotacional de momentos magnéticos, ou seja, um vórtice magnético. O sistema magnético foi descrito semi-classicamente e modelado por uma hamiltoniana descrevendo as interações de troca e dipolar entre momentos magnéticos localizados numa rede cúbica. As simulações foram realizadas considerando o termo dipolar com e sem corte. Os resultados mostram claramente que o corte na interação dipolar tem que ser tomado cuidadosamente. Para  $z = 2$  os resultados usando o corte praticamente coincidem com aqueles considerando as interações dipolo-dipolo na integral. Porém, para  $z = 3, 4$  obtivemos resultados completamente não-confiáveis mesmo para valores pequenos de  $D/J$ . Portanto, consideramos a interação dipolar sem qualquer aproximação. Observamos que existe um valor crítico  $(D/J)_c$  separando os estados de vórtice planar e vórtice não-planar, que é independente do diâmetro do nanodisco mas que depende da espessura do nanodisco. O aumento  $(D/J)_c$  com o aumento de  $z$  indica que aumentar a espessura têm o mesmo efeito que introduzir uma anisotropia que causa uma redução na energia necessária para o vórtice desenvolver a componente fora do plano. O comportamento de  $S_{core}^z$  em função do parâmetro  $D/J$  é bem descrito por uma função  $\left(\frac{D_c - D}{J}\right)^\alpha$  com  $\alpha = 0.55(2)$ , onde  $\alpha$  parece ser um expoente universal independente de  $L, z$  e  $D/J$ . Observamos que há um valor mínimo para o módulo de  $S_{core}^z$  a partir do qual pode-se excitar o modo girotrópico. Esse valor mínimo na componente  $z$  da magnetização do núcleo do vórtice aumenta se a espessura do disco aumenta, o que significa que vórtice torna-se mais preso. Esse resultado sugere que uma forma de melhorar a estabilidade do processo de inversão da polaridade pode ser através do controle da espessura do

nanodisco, que é tecnologicamente simples de fazer. Finalmente, usando a aproximação micro-magnética e parâmetros conhecidos, estimou-se a razão  $D/J$  para o Permalloy-79. Observamos que que discos de Py com diâmetros no intervalo  $100\text{ nm} \leq d \leq 400\text{ nm}$  estão no estado de vórtice com uma magnetização fora do plano no núcleo do vórtice ( $S_{core}^z$ ) que aumenta quando a espessura  $l$  aumenta. Também observamos o movimento girotrópico em nanodiscos de Py-79 com frequências no intervalo sub GHz, que aumentam com a razão  $l/R$ . Esses comportamentos concordam com as observações experimentais em nanodiscos de Permalloy.

## 6.1 PERSPECTIVAS FUTURAS

Estudar o fenômeno a inversão da magnetização em detalhes. Ao contrário do que consta na literatura, através de simulações temos observado que o mecanismo de switching da polaridade sob a influência de um campo no plano pode ocorrer sem necessariamente envolver a criação e aniquilação de um par vórtice-antivórtice. Acredita-se que tal processo ocorre para dissipar a energia extra fornecida ao sistema, pois se for fornecida apenas a energia mínima para inversão da polaridade, isto é, energia muito próxima à altura da barreira, tal fenômeno não ocorre. Um pulso de campo magnético de forma quadrada e de curta duração é capaz de inverter a polaridade sem que o modo girotrópico seja excitado.

Um outro estudo em andamento é a inclusão de defeitos sejam eles estruturais ou artificiais, magnéticos ou não. Dentre as impurezas magnéticas, temos observado dois tipos, as que atraem e as que repelem o núcleo do vórtice. Se estas são dispostas de forma simétrica em torno do núcleo do vórtice, a componente da magnetização fora do plano pode aumentar ou diminuir em relação ao sistema puro, dependendo do tipo de impureza. Certamente, a frequência do modo girotrópico deve variar com a densidade de impurezas. Dentre as inúmeras possibilidades de usar impurezas a favor de um efeito desejado, pode-se, por exemplo depositar impurezas repulsivas ao longo de um anel centrado no centro disco, de forma a confinar o núcleo do vórtice. Um mecanismo alternativo de switching seria forçar a colisão do núcleo do vórtice contra essa parede repulsiva.

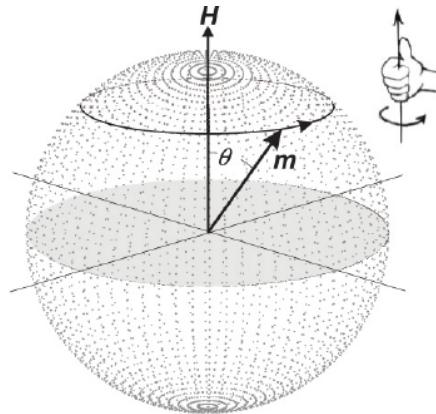
## ***APÊNDICE A – AS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS DE LANDAU-LIFSHITZ E DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT***

A dinâmica do micromagnetismo é governada por equações fenomenológicas, tanto a equação de Landau-Lifshitz (L.L.) quanto a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (L.L.G.) são generalizações da equação que descreve precessão de um momento em torno de um campo magnético, ou seja,

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} = \vec{m} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{m} \times \vec{H} \quad (\text{A.1})$$

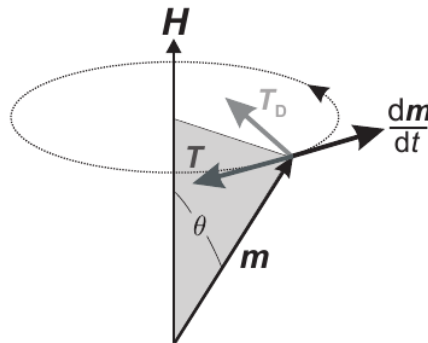
onde  $\gamma$  é a razão giromagnética, seu sinal determina o sentido da precessão em relação ao sentido definida pelo campo. Em outras palavras, ela determina se a taxa de variação do momento magnético será paralela ou anti-paralela ao torque. Lembre-se que a razão giromagnética é dada por  $\gamma = \frac{g\mu_B}{\hbar} = \frac{ge\hbar}{2m_e\hbar} \approx \frac{e}{m_e}$ , sendo negativa para um elétron. Veja a figura (A.1).

Durante a precessão, a componente do momento na direção do campo permanece constante. O módulo do torque é nulo quando  $\vec{m}$  e  $\vec{H}$  estão paralelos, e é máximo quando esses vetores são perpendiculares.



**Figura A.1** – Movimento de precessão do momento magnético de um elétron num campo magnético estático. Figura retirada da referência [68].

Experimentos mostram que um momento magnético eventualmente move-se na direção do campo magnético. Este fato foi notado muito cedo, no primeiro dispositivo magnético, a bússola. O torque de precessão  $\vec{T} = \mu_0 \vec{m} \times \vec{H}$  não é capaz de realizar este alinhamento, porque ele é perpendicular a  $\vec{H}$ . Como mostra a figura A.2, um torque adicional, perpendicular tanto a  $\vec{m}$  quanto a  $\vec{T}$ , é necessário para dar conta desse alinhamento.



**Figura A.2** – O torque de precessão e o torque de damping agindo sobre o momento magnético de um elétron num campo magnético estático. Figura retirada da referência [68].

Da figura A.2, pode-se escrever este torque, denominado **torque de damping**,  $T_D$ , como,

$$\vec{T}_D^{L.L} = -\frac{\alpha \mu_0}{m} \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) \quad (\text{A.2})$$

ou

$$\vec{T}_D^{L.L.G} = -\frac{\alpha}{m \gamma} \vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \quad (\text{A.3})$$

onde  $\alpha$  é uma constante fenomenológica, adimensional e análoga ao coeficiente de atrito. O parâmetro de *damping* é positivo e depende do material.

Substituindo os torques  $\vec{T}_D^{L.L}$  e  $\vec{T}_D^{L.L.G}$  na equação

$$\frac{1}{|\gamma|} \frac{d\vec{m}}{dt} = \pm \mu_0 (\vec{m} \times \vec{H}) + \vec{T}_D \quad (\text{A.4})$$

obtêm-se a **equação de Landau-Lifshitz**

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = \gamma \mu_0 (\vec{m} \times \vec{H}) - \frac{\alpha |\gamma| \mu_0}{m} \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) \quad (\text{A.5})$$

e a **equação de Landau-Lifshitz-Gilbert** na forma implícita

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = \gamma \mu_0 (\vec{m} \times \vec{H}) - \frac{\alpha |\gamma|}{m \gamma} \left( \vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \quad (\text{A.6})$$

Em 1935, Landau e Lifshitz [69] propuseram um torque de damping dado pela equação (A.2). A equação de L.L. descrevia muito bem a evolução de um momento magnético em materiais com pequenos valores de parâmetro de damping,  $\alpha \ll 1$ . Entretanto, ela conduzia a resultados que não eram observados experimentalmente. Em 1955, Gilbert [70] modificou o termo de damping na equação de L.L, para dar conta também dos materiais que apresentavam altos valores de damping e a equação ficou conhecida como L.L.G,

Para escrever a equação de L.L.G. numa forma semelhante à equação L.L., toma-se o produto vetorial com  $\vec{m}$  pela esquerda, em ambos os membros dessa equação (A.6) e obtêm-se a seguinte identidade

$$\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} = \gamma \mu_0 \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) - \frac{\alpha |\gamma|}{m \gamma} \vec{m} \times \left( \vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \quad (\text{A.7})$$

$$= \gamma \mu_0 \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) + \frac{\alpha |\gamma| m}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} \quad (\text{A.8})$$

onde usando-se a identidade do produto duplo vetorial

$$\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C} \quad (\text{A.9})$$

com  $\vec{A} = \vec{B} = \vec{m}$  e  $\vec{C} = \frac{d\vec{m}}{dt}$ , temos que

$$\vec{m} \times \left( \vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) = \left( \vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \vec{m} - (\vec{m} \cdot \vec{m}) \frac{d\vec{m}}{dt} \quad (\text{A.10})$$

$$= -m^2 \frac{d\vec{m}}{dt} \quad (\text{A.11})$$

a taxa de variação do momento magnético é sempre perpendicular a ele próprio, então  $\vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} = 0$

Substituindo a identidade (A.8) no último termo da equação (A.6), obtêm-se a **equação de Landau-Lifshitz-Gilbert** na forma explícita

$$(1 + \alpha^2) \frac{d\vec{m}}{dt} = \gamma \mu_0 (\vec{m} \times \vec{H}) - \frac{\alpha |\gamma| \mu_0}{m} \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) \quad (\text{A.12})$$

Note-se que para  $\alpha \ll 1$ , então  $\alpha^2$  torna-se desprezível e as equações (A.5) e (A.12) conduzem a resultados muito próximos.

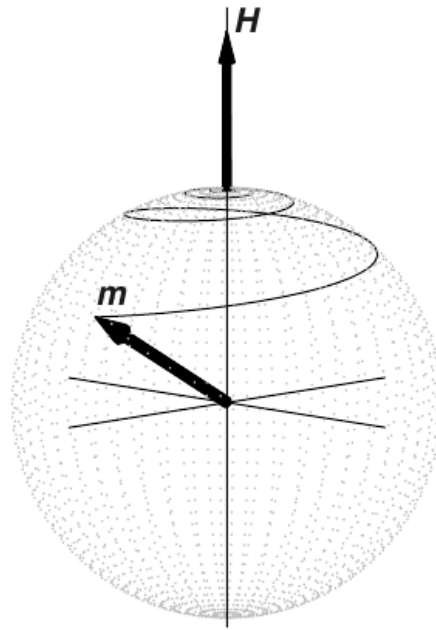
A evolução temporal do momento magnético de um elétron num campo estático, obtido resolvendo tanto a equação L.L quanto a L.L.G para  $\alpha > 0$  é mostrado na figura (A.3).

Pode-se mostrar que as equações L.L e L.L.G preservam o módulo de  $\vec{m}$ , modificando apenas sua direção. Para essa demonstração, toma-se o produto escalar com  $\vec{m}$  em ambos os lados das equações L.L ou L.L.G. A equação (A.6) torna-se

$$\begin{aligned} \vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} &= \gamma \mu_0 \vec{m} \cdot (\vec{m} \times \vec{H}) - \frac{\alpha |\gamma|}{m \gamma} \vec{m} \cdot \left( \vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \\ &= \gamma \mu_0 \vec{m} \cdot (\vec{H} \times \vec{m}) - \frac{\alpha |\gamma|}{m \gamma} \vec{m} \cdot \left( \frac{d\vec{m}}{dt} \times \vec{m} \right) \\ &= \gamma \mu_0 \vec{H} \cdot (\vec{m} \times \vec{m}) - \frac{\alpha |\gamma|}{m \gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} \cdot (\vec{m} \times \vec{m}) \\ &= 0 \end{aligned}$$

onde utilizou-se a seguinte identidade do produto misto

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B} \cdot (\vec{C} \times \vec{A}) = \vec{C} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) \quad (\text{A.13})$$



**Figura A.3** – Comportamento qualitativo do momento magnético de um elétron num campo magnético estático. Na presença de damping positivo, o momento espirala e o alinhamento no sentido do campo ocorre gradualmente. O módulo do momento permanece constante, a seta do vetor  $\vec{m}$  descreve sua trajetória sobre uma superfície de uma esfera. Quando o alinhamento é feito, ambos os torques se anulam, e o sistema atinge um estado de equilíbrio. Figura retirada da referência [68].

Por outro lado, usando a derivada de um produto escalar

$$\frac{d}{d\tau}(\vec{A} \cdot \vec{B}) = \frac{d\vec{A}}{d\tau} \cdot \vec{B} + \vec{A} \cdot \frac{d\vec{B}}{d\tau} \quad (\text{A.14})$$

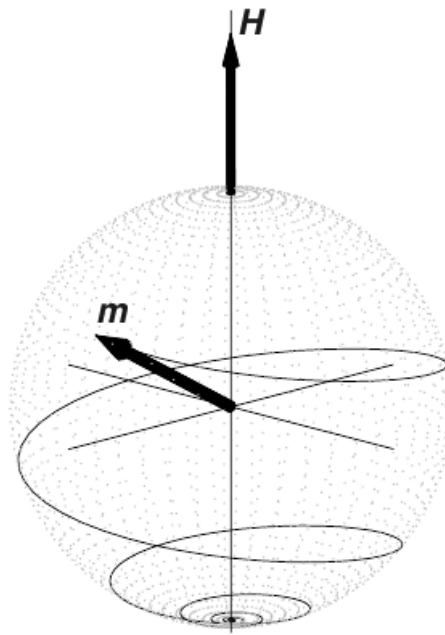
temos que,

$$\vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} = \frac{1}{2} \left( \frac{d\vec{m}}{dt} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} \right) = \frac{1}{2} \left| \frac{d\vec{m}}{dt} \right|^2 = 0$$

Portanto, o momento magnético  $\vec{m}$  evolui com módulo constante.

Em 1996, Slonczewski e Berger propuseram independentemente que o torque de damping pode ter um sinal negativo também, correspondendo a um sinal negativo de  $\alpha$ . Mediante essas condições  $\vec{m}$  espirala e se alinha no sentido contrário ao do campo externo, como ilustrado na figura (A.4).

Como mostrado na figura (A.3) durante a precessão amortecida o momento espirala na direção do campo e esse processo corresponde a uma mudança no momento angular. A lei de conservação do momento angular exige que durante o movimento de precessão amortecido o



**Figura A.4** – Comportamento qualitativo do momento magnético de um elétron num campo magnético estático. Na presença de damping negativo, o momento espirala e o alinhamento no sentido contrário ao do campo ocorre gradualmente. Enquanto, o sistema “caminha” para um estado de equilíbrio ele vai ganhando energia. Figura retirada da referência [68].

momento angular deve ser transferido para um outro reservatório. O momento angular pode ser transferido para dentro do próprio sistema através da excitação de ondas de spins ou para a rede [68].



## ***APÊNDICE B – EFEITOS DA ANISOTROPIA DE FORMA EM FERROMAGNETOS QUASE-BIDIMENSIONAIS***

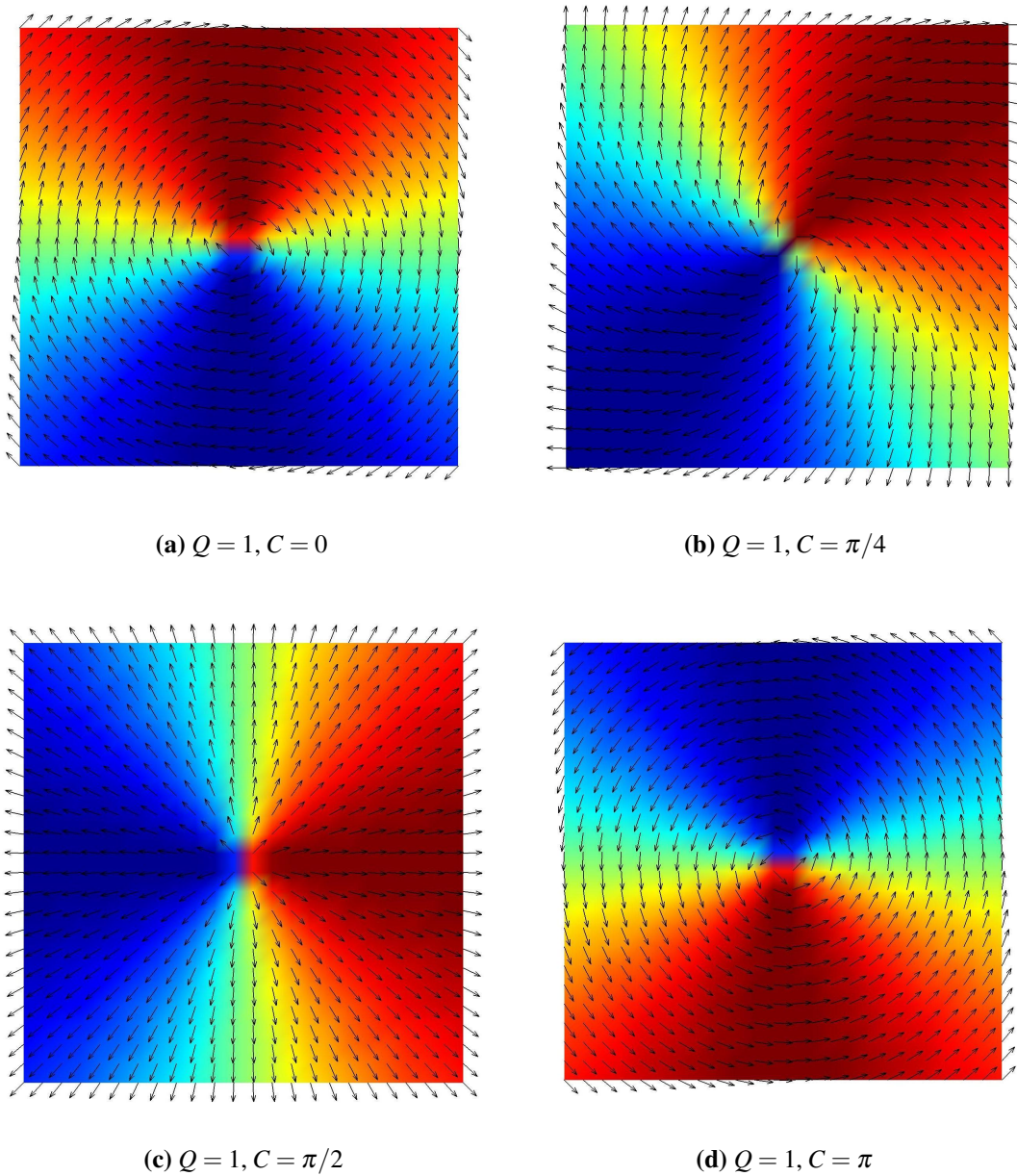
A fim de visualizar as soluções de vórtice e simultaneamente testar o código computacional, considerou-se um sistema finito bidimensional e pequeno, descrito pelo modelo de Heisenberg isotrópico, sendo a única anisotropia presente no sistema a anisotropia de forma, descrita pela hamiltoniana da interação dipolo-dipolo. Parâmetros do permalloy-79 e uma rede quadrada de tamanho  $L = 23a$  foram utilizados. Nas simulações micromagnéticas, a discretização utilizada foi  $a = 5$  [nm]. Ressalta-se que o sistema não foi evoluído até o equilíbrio, apenas utilizou-se as soluções de vórtices, conforme sugeridas pelo modelo do rotor planar <sup>1</sup> como condições iniciais e calculou-se as parcelas de energia dessas configurações.

Veremos que o efeito de substituir a anisotropia magnetocristalina fortemente planar pela anisotropia de forma, conduz a resultados muito interessantes, sendo fundamentais para o entendimento da formação de vórtice num nanodisco magnético, que é tratado no próximo capítulo.

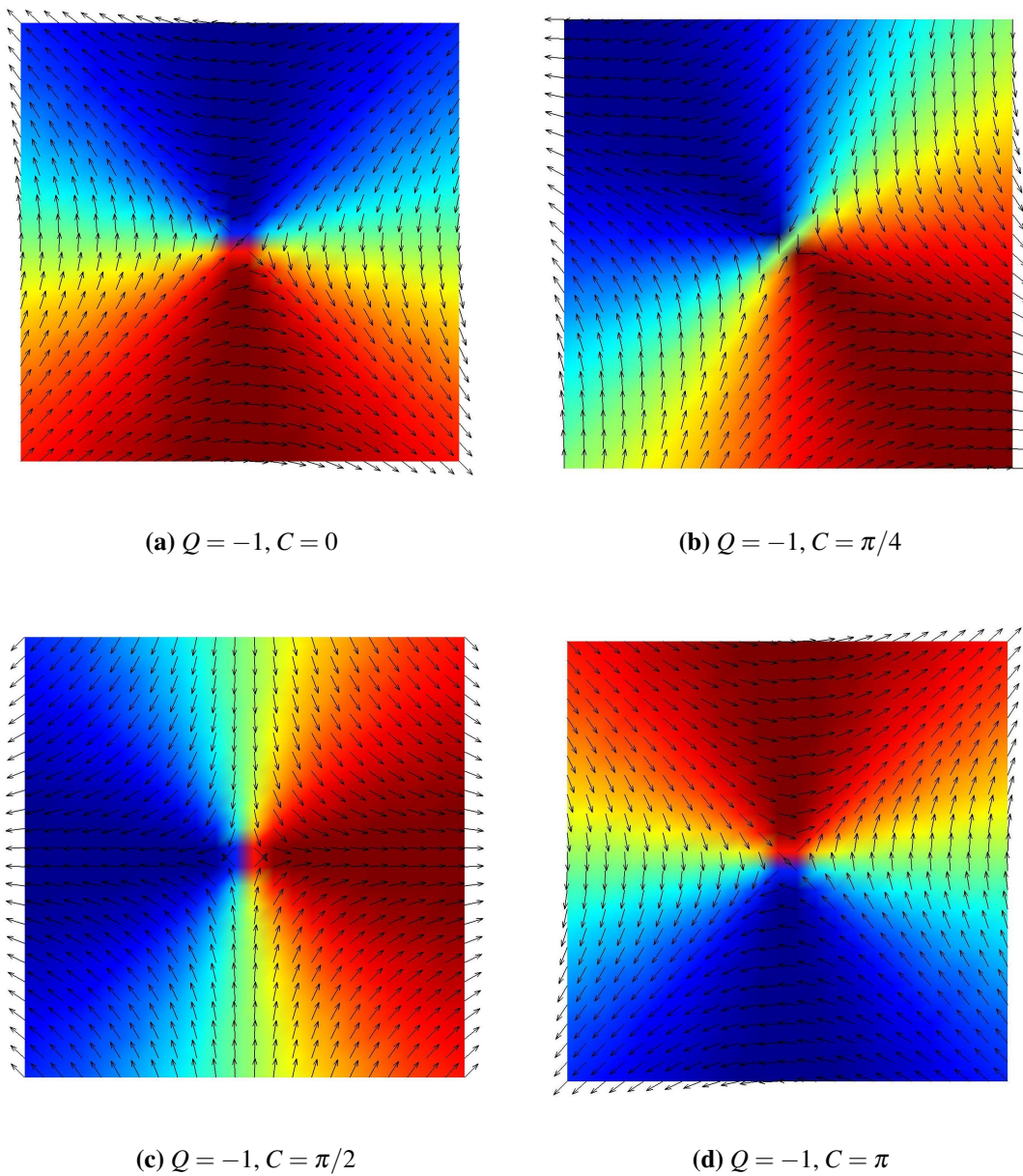
As configurações de vórtices e antivórtices, centrados na origem, com carga topológica  $Q = \pm 1$  são mostradas nas figuras (B.1) e (B.2), respectivamente. As figuras são coloridas de acordo com o ângulo entre os vetores e a direção  $x$ . Note que devido à simetria rotacional do modelo de Heisenberg isotrópico, a energia de troca dessas configurações é exatamente a mesma. Vemos que partindo de uma configuração as outras são obtidas através de rotação do campo de spins em torno do eixo- $z$ .

---

<sup>1</sup> Ver capítulo 4.

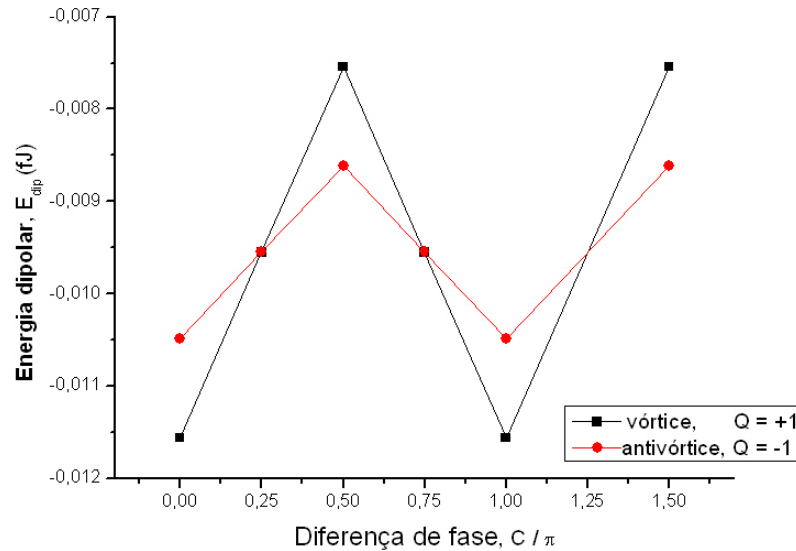


**Figura B.1** – Vórtices com carga topológica  $Q = 1$  com diferentes valores para a constante  $C$ .



**Figura B.2** – Antivórtices com carga topológica  $Q = -1$  com diferentes valores para a constante  $C$ .

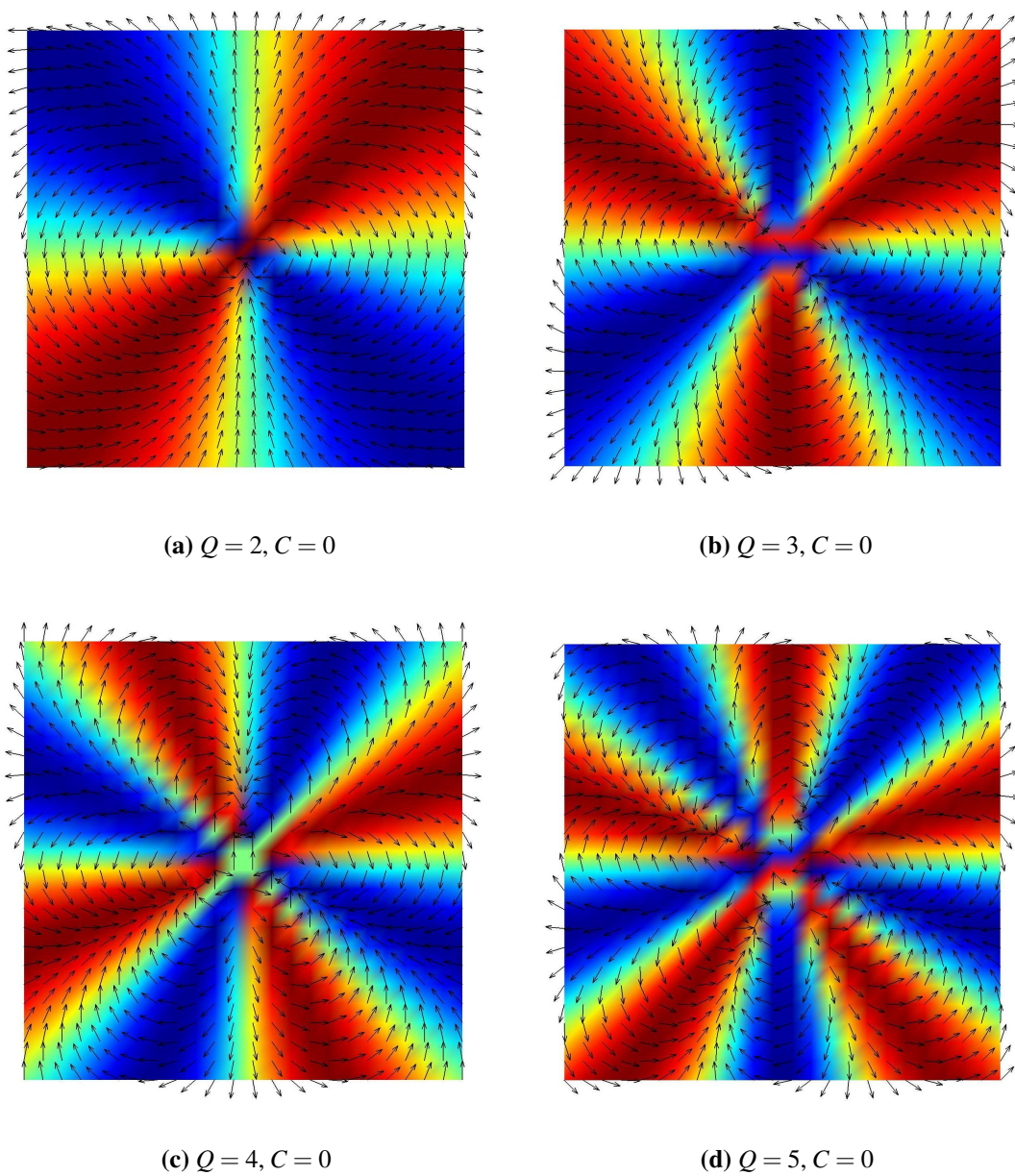
Na figura (B.3) é mostrado a energia da interação dipolar para as configurações de vórtice e antivórtices com  $Q = 1$ , note que a interação dipolar distingue algumas configurações, ao contrário da interação de troca. Assim, a quebra da degenerescência na energia total se deve à parcela da energia magnetostática.



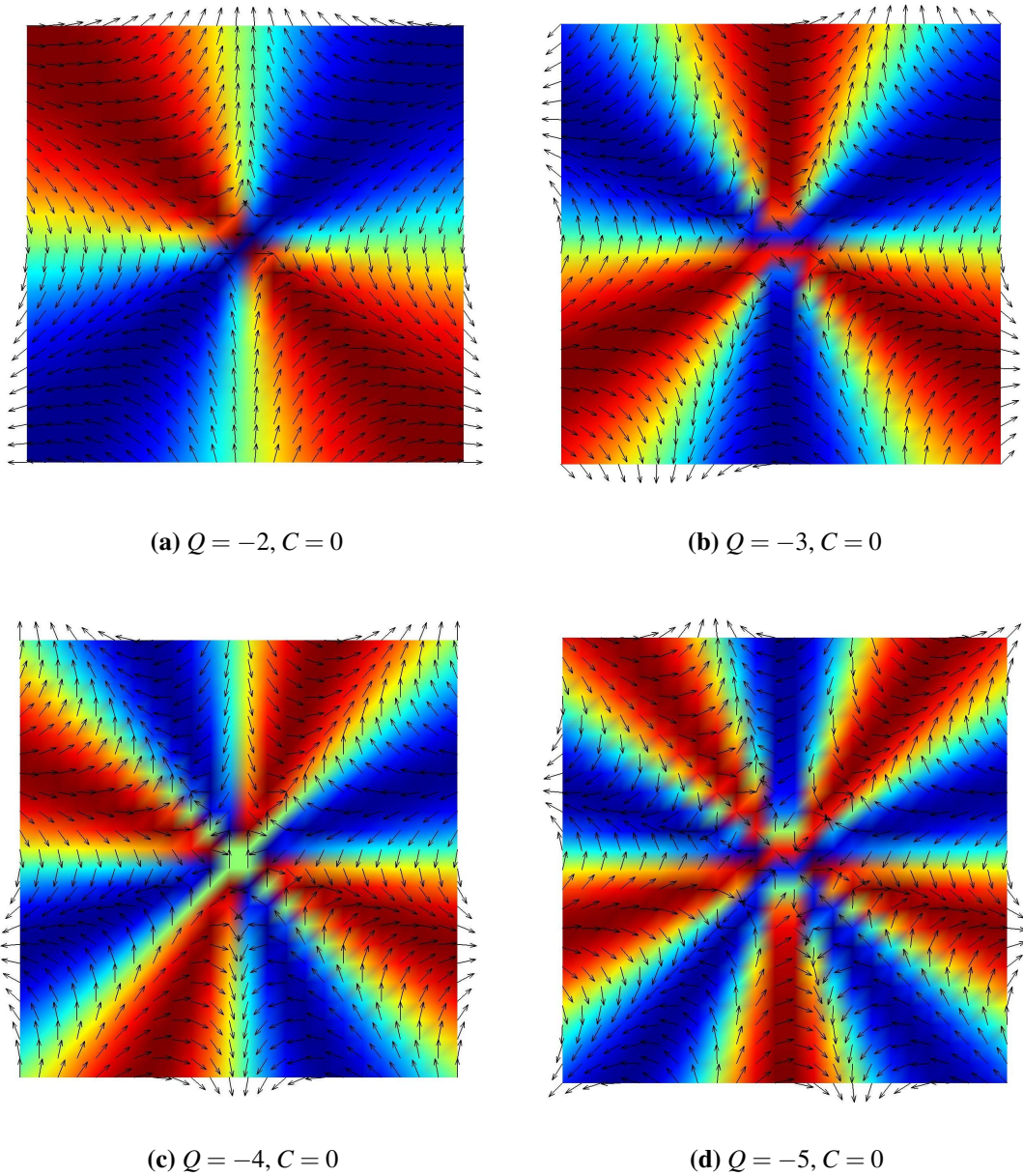
**Figura B.3** – Gráfico da energia dipolar em função da diferença de fase, para  $Q = 1$ .

Na figura (B.3), vemos que a energia dipolar é uma função periódica da diferença de fase  $C$ , além disso, as energias dos vórtices e antivórtices estão em fase. A energia da interação dipolar é maximizada para as configurações radiais do tipo vórtice e minimizada para as configurações circulares. As configurações espirais possuem energias intermediárias. O mínimo da energia dipolar, tanto para vórtices quanto para antivórtices, ocorre quando os spins da borda estão praticamente alinhados ao longo da direção que os une, ou seja, o contorno do material.

Outras configurações com cargas topológicas mais elevadas  $Q = \pm 2, \pm 3, \pm 4$ , centradas na origem, são mostradas nas figuras (B.4) e (B.5).

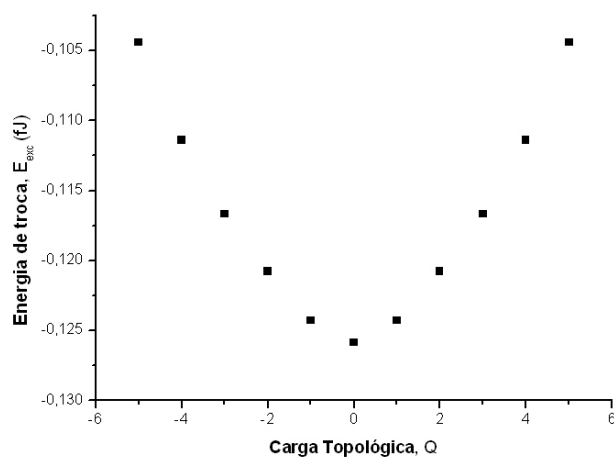


**Figura B.4** – Vórtices com diferentes cargas topológicas,  $Q = 2, 3, 4$



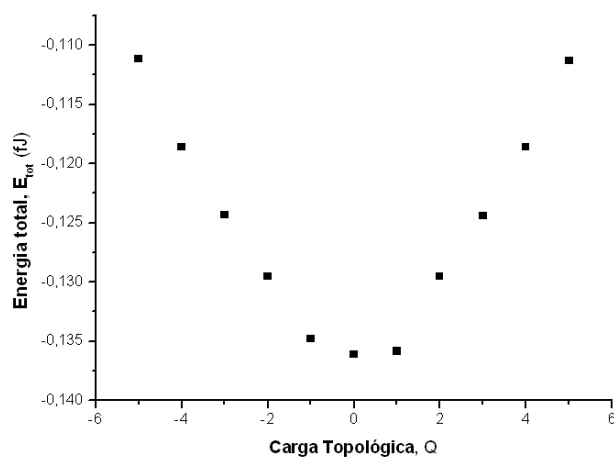
**Figura B.5** – Antivórtices com diferentes cargas topológicas,  $Q = -2, -3, -4, -5$

Determinou-se a dependência da energia de troca para cada uma dessas configurações, o resultado é apresentado na figura (B.6). Note que a energia de exchange é degenerada em relação à carga topológica, e sua dependência é quadrática, tal como ocorre para o rotor planar, veja a equação (4.41). O mínimo da parábola ocorre para o caso em que os spins estão alinhados.



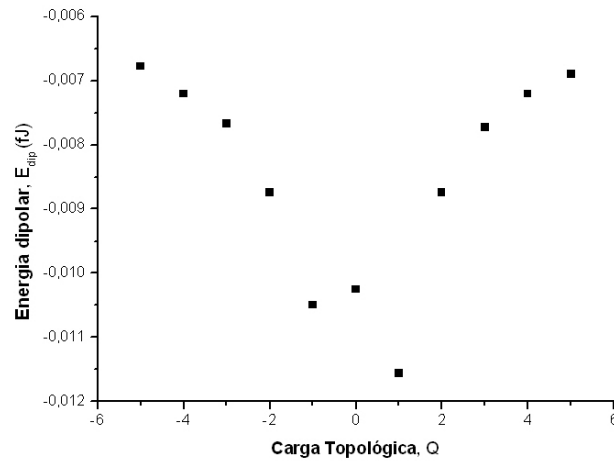
**Figura B.6** – Gráfico da Energia de exchange em função da carga topológica.

A energia total em função da carga topológica é mostrado na figura (B.7). A energia mais baixa ocorre para  $Q = 0$ , embora a energia do vórtice com carga  $Q = 1$  esteja muito próxima desse valor.



**Figura B.7** – Gráfico da energia total em função da carga topológica.

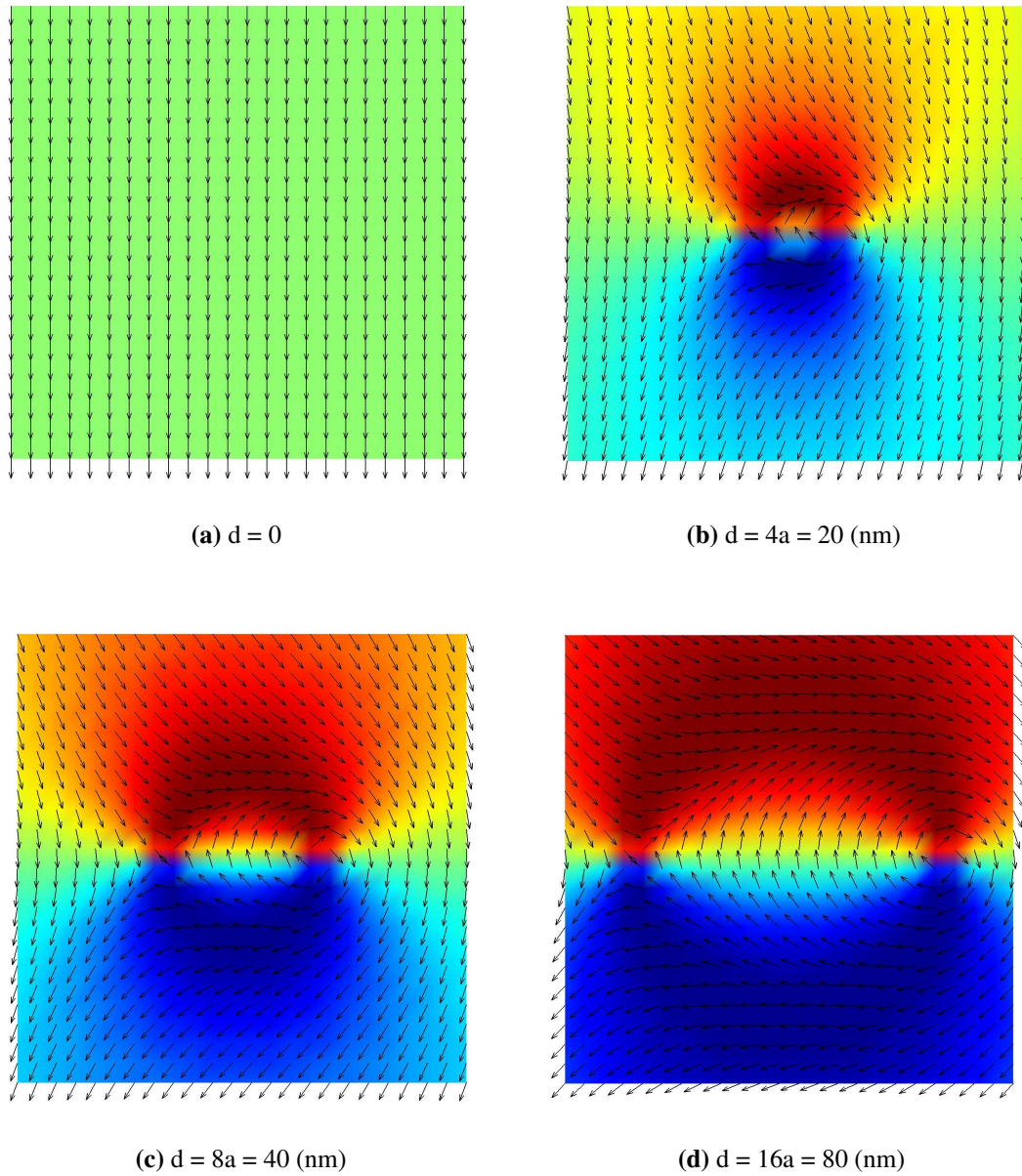
Novamente a quebra da degenerescência é devida à contribuição da energia magnetostática, fazendo com que as energias dos vórtices apresentem energia inferior do que os respectivos antivórtices. Para altos valores de carga essa diferença é mínima, entretanto, para o par com  $|Q| = 1$  ela é apreciável. Como pode ser notado na figura (B.8).



**Figura B.8** – Gráfico da energia dipolar em função da carga topológica.

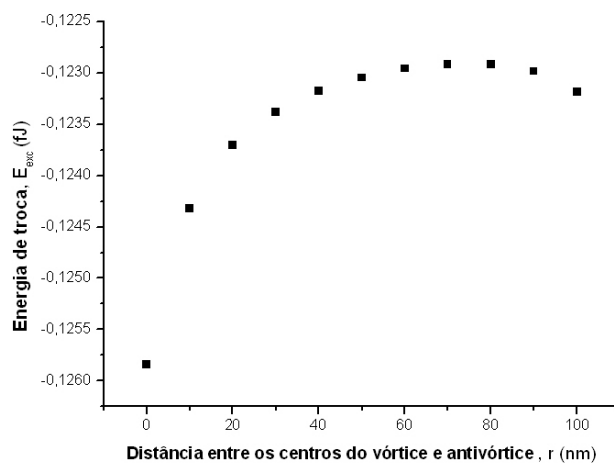
Ressalta-se que vórtices e antivórtices são excitações topológicas globais, entretanto um par vórtice-antivórtice com mesma carga topológica é uma excitação local  $Q = Q_{vo} + Q_{av} = 0$ . Na figura (B.9) é mostrada uma configuração de um par com carga topológica  $|Q| = 1$  para quatro diferentes distâncias relativas, isto é, centro a centro.



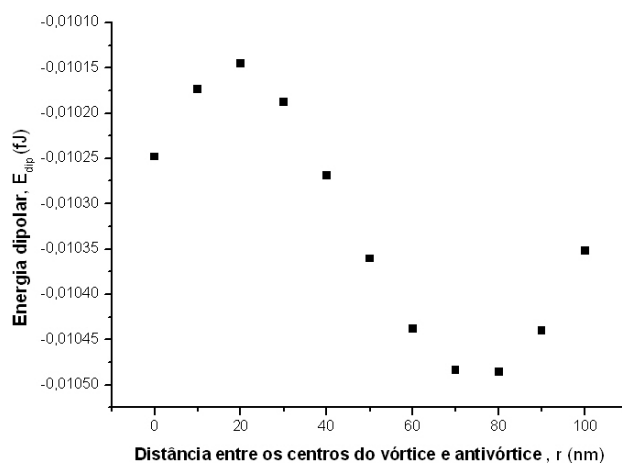


**Figura B.9** – Um par vórtice-antivórtice com  $|Q| = 1$ . Para várias distância relativas. Note que a carga topológica dessa estrutura é nula,  $Q = 1 - 1 = 0$ . Em (a) O centro do vórtice coincide com o do antivórtice. De (b) até (d) o vórtice está à direita e a distância relativa do par aumenta.

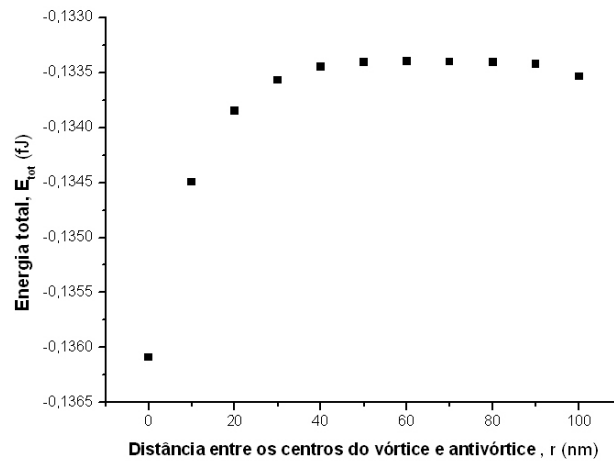
A seguir, determinou-se a as parcelas da energia total da configuração de um par vórtice-antivórtice com carga topológica  $|Q| = 1$ . Os resultados estão mostradas nas figuras (B.10),(B.11) e a energia total encontra-se na figura (B.12).



**Figura B.10** – Gráfico da energia de exchange em função da distância relativa do par vórtice-antivórtice com carga topológica  $Q = 1$ .

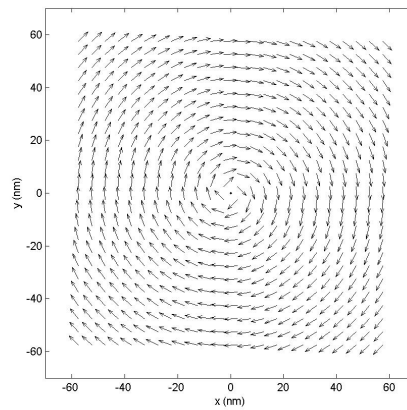
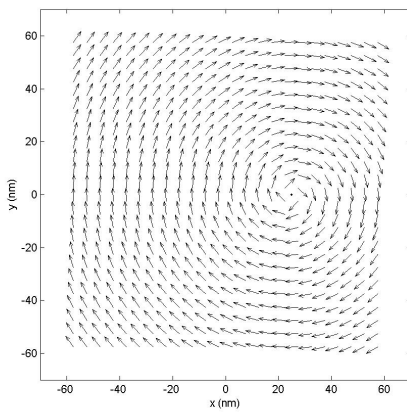
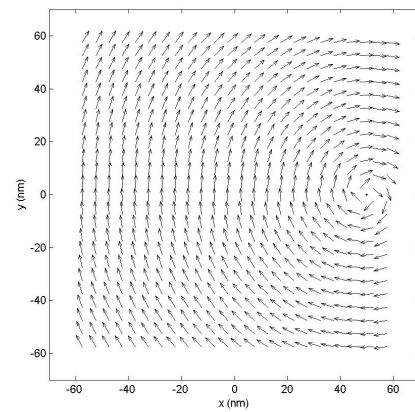


**Figura B.11** – Gráfico da energia dipolar em função da distância relativa do par vórtice-antivórtice com carga topológica  $Q = 1$ .



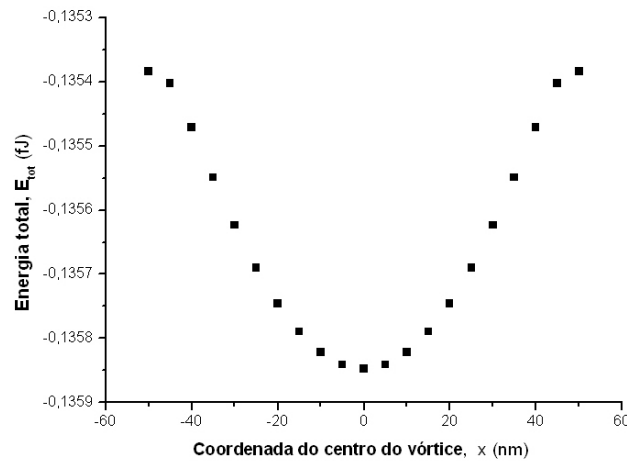
**Figura B.12** – Gráfico da energia total em função da distância relativa do par vórtice-antivórtice com carga topológica  $Q = 1$ .

Encerra-se este capítulo mostrando que o deslocamento do vórtice, com carga topológica  $Q = 1$ , da sua posição de equilíbrio altera a energia do sistema. Calculou-se a energia para diferentes condições iniciais, nas quais o vórtice é transladado ao longo do eixo-x, veja a figura (B.13).

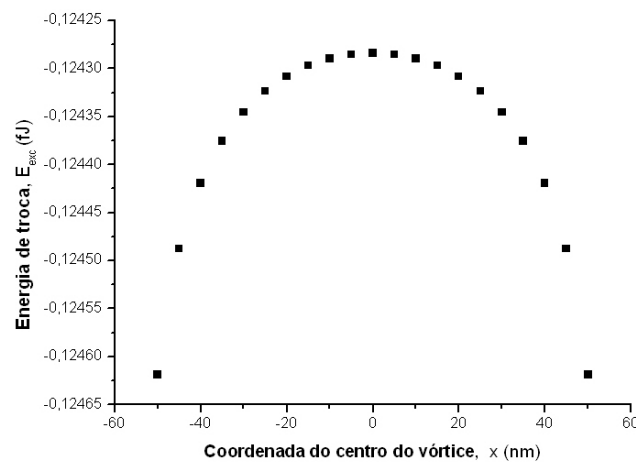
(a)  $x_{v0} = 0$ (b)  $x_{v0} = 25$  (nm)(c)  $x_{v0} = 50$  (nm)

**Figura B.13** – Um vórtice com carga topológica  $Q = 1$ . Em (a) O centro do vórtice coincide com centro geométrico do material, a origem do sistema de coordenadas. Em (b) e (c) o vórtice foi trasladado para a direita, no seu centro há um ponto  $(x_{v0}, 0)$  que localiza sua posição.

A energia total do sistema bem com as suas parcelas em diferentes posições para o núcleo do vórtice são apresentadas nas figuras (B.14), (B.15) e (B.16). Como pode ser visto no gráfico da energia total em função da coordenada  $x$  do vórtice, no centro geométrico do material  $x = 0$ , a energia total apresenta um mínimo, sendo a parcela da energia dipolar relevante para este ponto de equilíbrio estável.

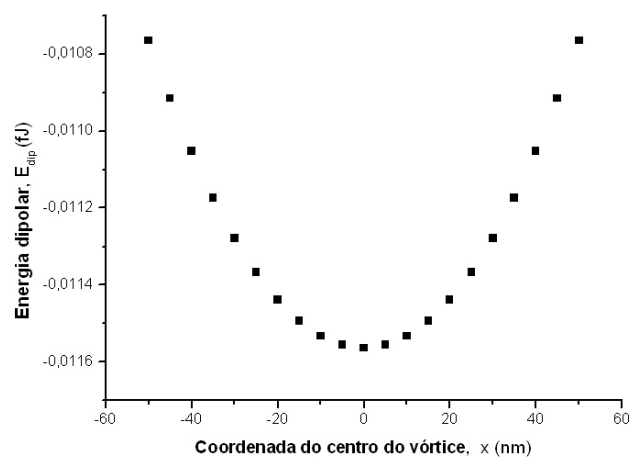


**Figura B.14** – Gráfico da energia total em função da coordenada  $x$  do núcleo do vórtice com carga topológica  $Q = 1$ .



**Figura B.15** – Gráfico da energia de exchange em função da coordenada  $x$  do núcleo do vórtice com carga topológica  $Q = 1$ .

Note que a dependência da energia magnetostática com a distância é quadrática, assim como ocorre nos osciladores harmônicos. Conclui-se que a força dipolar é do tipo restaurada. Assim, para deslocar o vórtice de sua posição é necessário realizar trabalho sobre o sistema, isto é, deve-se fornecer energia ao sistema. Entretanto, pelo gráfico da energia de exchange em função da posição do vórtice, vemos que o centro do material é um ponto de equilíbrio instável, assim se a interação dipolar não estivesse presente, uma pequena perturbação no sistema levaria ao deslocamento do núcleo do vórtice para longe desse ponto. Conclui-se que a interação



**Figura B.16** – Gráfico da energia dipolar em função da coordenada  $x$  do núcleo do vórtice com carga topológica  $Q = 1$ .

dipolar é responsável pela estabilidade da estrutura de vórtice.

## *Referências*

- [1] CHIEN, C.; ZHU, F.; ZHU, J. Patterned nanomagnets. *Physics Today*, v. 60, 2007.
- [2] PULWEY, R.; RAHM, M.; WEISS, D. Switching behavior of vortex structures in nanodisks. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 37, n. 4, 2001.
- [3] KOSTERLITZ, J.; THOULESS, D. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 6, n. 1181, 1973.
- [4] SCHNEIDER, M.; HOFFMANN, H.; ZWECK, J. Lorentz microscopy of circular ferromagnetic permalloy nanodisks. *Journal of Applied Physics Letters*, v. 77, n. 18, 2000.
- [5] COWBURN, R. P.; KOLTSOV, D. K.; TRICKER, D. M. Single-domain circular nanomagnets. *Physical Review Letters*, v. 83, n. 5, 1999.
- [6] SHINJO, T.; OKUNO, T.; HASSDORF, R. Magnetic vortex core observation in circular dots of permalloy. *Science*, v. 289, p. 930–932, 2000.
- [7] RAABE, J. et al. Magnetization pattern of ferromagnetic nanodisks. *Journal of Applied Physics*, v. 88, n. 7, 2000.
- [8] CHOE, S.-B.; PADMORE, H. A.; STÖHR, J. Vortex core-driven magnetization dynamics. *Science*, v. 304, p. 420, 2004.
- [9] NOVOSAD, V.; GUSLIENKO, K.; BADER, S. Magnetic vortex resonance in patterned ferromagnetic dots. *Physical Review B*, v. 72, n. 024455, 2005.
- [10] KIKUCHI, N. et al. Vertical bistable switching of spin vortex in a circular magnetic dot. *Journal of Applied Physics*, v. 90, n. 12, 2001.
- [11] HOLLINGER, R.; KILLINGER, A.; KREY, U. Statics and fast dynamics of nanomagnets with vortex structure. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 261, p. 178–189, 2003.
- [12] GAIDIDEI, Y.; SHEKA, D.; MERTENS, F. Controllable switching of vortex chirality in magnetic nanodisks by a field pulse. *Journal of Applied Physics Letters*, v. 92, n. 012503, 2008.
- [13] WAEYENBERGE, B.; PUZIC, A.; STOLL, H. Magnetic vortex core reversal by excitation with short burst of an alternating field. *Nature*, v. 444, n. 05240, p. 461–464, 2006.
- [14] CAPUTO, J.-G.; GAIDIDEI, Y.; SHEKA, D. Vortex polarity switching by a spin-polarized current. *Physical Review Letters*, v. 98, n. 056604, 2007.

- [15] YAMADA, K. et al. Electrical switching of the vortex core in a magnetic disk. *Nature*, v. 6, p. 269, 2007.
- [16] XIAO, Q.; RUDGE, J.; CHOI, B. Dynamics of magnetic vortex core switching in fe ferromagnetic nanodisks by applying in-plane magnetic field pulse. *Journal of Applied Physics*, v. 102, n. 103904, 2007.
- [17] HERTEL, R.; GLIGA, S. et al. Ultrafast nanomagnetic toggle switching of vortex cores. *Physical Review Letters*, v. 98, n. 117201, 2007.
- [18] LEE, K.-S. et al. Ultrafast vortex-core reversal dynamics in ferromagnetic nanodots. *Physical Review B*, v. 76, n. 174410, 2007.
- [19] KIM, S.-K.; LEE, K.-S.; CHOI, Y.-S. Electric-current-driven vortex-core reversal in soft magnetic nanodots. *Journal of Applied Physics Letters*, v. 91, n. 082506, 2007.
- [20] KRAVCHUK, V.; SHEKA, D.; GAIDIDEI, Y. Controlled vortex core switching in a magnetic nanodisk by a rotating field. *Journal of Applied Physics*, v. 102, n. 043908, 2007.
- [21] SHEKA, D.; GAIDIDEI, Y.; MERTENS, F. Current induced switching of vortex polarity in magnetic nanodisks. *Journal of Applied Physics Letters*, v. 91, n. 082509, 2007.
- [22] TOSCANO, D.; LEONEL, S. Magnetic vortex formation and gyrotropic mode in nanodisks. *Journal of Applied Physics*, v. 109, n. 014301, 2011.
- [23] BUSCHOW, K.; BOER, F. *Physics of Magnetism and Magnetic Materials*. Kluwer Academic Publishers, 2003.
- [24] NOLTING, W.; RAMAKANTH, A. *Quantum Theory of Magnetism*. Springer, 2009.
- [25] SALINAS, S. *Introdução à Física Estatística*. EDUSP, 1999.
- [26] ASHCROFT, N.; MERMIM, N. *Solid State Physics*. College edition. Saunders College Publishers, 1976.
- [27] SAKURAY, J. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, 1994.
- [28] TSAI, S.-H.; KRECH, M.; LANDAU, D. P. Symplectic integration methods in molecular and spin dynamics simulations. *Brazilian Journal of Physics*, v. 34, n. 2A, 2004.
- [29] WYSIN, G. M. Vortex-in-nanodot potentials in thin circular magnetic dots. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 22, n. 376002, 2010.
- [30] BERTOTTI, G. *Hysteresis in Magnetism for Physicists, Materials Scientists and Engineers*. Academic Press, 1998.
- [31] BOYCE, W.; DIPRIMA, R. *Elementary differential equations and boundary value problems*. 6. ed. John Willey & Sons, 1997.
- [32] APOLÔNIO, F. *Um modelo estrutural para defeitos em nanomagnetos*. Dissertação (Mestrado) — UFV, 2010.
- [33] MOL, L. *Estudo de materiais magnéticos de baixa dimensionalidade dopados com impurezas não magnéticas*. Dissertação (Mestrado) — UFV, 2004.



- [34] GOUVA, M. E.; WYSIN, G. M.; BISHOP, A. Vortices in the classical two-dimensional anisotropic heisenberg model. *Physical Review B*, v. 39, n. 16, 1989.
- [35] WYSIN, G. M. Instability of in-plane vortices in two-dimensional easy-plane ferromagnets. *Physical Review B*, v. 49, n. 13, 1994.
- [36] WYSIN, G. M. Magnetic vortex mass in two-dimensional easy-plane magnets. *Physical Review B*, v. 54, n. 15156, 1996.
- [37] THIELE, A. Steady-state motion of magnetic domains. *Physical Review Letters*, v. 30, n. 6, 1973.
- [38] THIELE, A. Applications of the gyrocoupling vector and dissipation dyadic in the dynamics of magnetic domains. *Journal of Applied Physics*, v. 45, n. 1, 1974.
- [39] HUBER, D. Equation of motion a spin vortex in a two-dimensional planar magnet. *Journal of Applied Physics*, v. 53, n. 3, p. 1899–1900, 1982.
- [40] HUBER, D. Dynamics of spin vortices in two-dimensional planar magnets. *Physical Review B*, v. 26, n. 7, 1982.
- [41] VOLKEL, A. et al. Collective-variable approach to the dynamics of nonlinear magnetic excitations with application to vortices. *Physical Review B*, v. 50, n. 17, 1994.
- [42] MERTENS, F.; SCHNITZER, H.; BISHOP, A. Hierarchy of equations of motion for nonlinear coherent excitations applied to magnetic vortices. *Physical Review B*, v. 56, n. 5, 1997.
- [43] GUSLIENKO, K. Low-frequency vortex dynamic susceptibility and relaxation in mesoscopic ferromagnetic dots. *Applied Physics Letters*, v. 89, n. 022510, 2006.
- [44] THIAVILLE, A.; NAKATANI, Y.; SUZUKI, Y. Micromagnetic understanding of current-driven domain wall motion in patterned nanowires. *Europhysics Letters*, v. 69, n. 6, 2005.
- [45] KRUGER, B.; DREWS, A. Harmonic oscillator model for current- and field-driven magnetic vortices. *Physical Review B*, v. 76, n. 224426, 2007.
- [46] KRUGER, B.; DREWS, A. Vortices and antivortices as harmonic oscillators. *Journal of Applied Physics*, v. 103, n. 07A501, 2008.
- [47] USOV, N.; PESCHANY, S. Magnetization curling in a fine cylindrical particle. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 118, n. 3, 1993.
- [48] ROCHA, J. et al. Diagram for vortex formation in quasi-two-dimensional magnetic dots. *Journal of Applied Physics*, v. 107, n. 053903, 2010.
- [49] PARK, J.; EAMES, P.; CROWELL, P. Imaging of spin dynamics in closure domain and vortex structures. *Physical Review B*, v. 67, n. 020403, 2003.
- [50] RAABE, J.; QUITMANN, C.; BUEHLER, C. Quantitative analysis of magnetic excitations in landau flux-closure structures using synchrotron-radiation microscopy. *Physical Review Letters*, v. 94, n. 217204, 2005.
- [51] STOLL, H.; PUZIC, A.; WEISS, D. High-resolution imaging of fast magnetization dynamics in magnetic nanostructures. *Applied Physics Letters*, v. 84, n. 17, 2004.

- [52] GAIDIDEI, Y.; SHEKA, D. Magnetic vortex dynamics induced by an electrical current. *International Journal of Quantum Chemistry*, v. 110, p. 83–97, 2010.
- [53] GUSLIENKO, K.; LEE, K.-S.; KIM, S.-K. Dynamics origin of vortex core switching in soft magnetic nanodots. *Physical Review Letters*, v. 100, n. 027203, 2008.
- [54] AHARONI, A. Surface anisotropy in micromagnetics. *Journal of Applied Physics*, v. 61, p. 3302–3304, 1987.
- [55] AHARONI, A. Exchange resonance modes in a ferromagnetic sphere. *Journal of Applied Physics Letters*, v. 69, n. 11, 1991.
- [56] FONER, S.; KODAMA, R. Surface spin disorder in nife2o4 nanoparticles. *Physical Review Letters*, v. 77, n. 2, 1996.
- [57] AHARONI, A. Effect of surface anisotropy on the exchange resonance modes. *Journal of Applied Physics*, v. 81, n. 2, p. 830–833, 1997.
- [58] SHILOV, V.; PERZYNSKI, R. Effect of unidirectional anisotropy on the ferromagnetic resonance in ferrite nanoparticles. *Physical Review B*, v. 60, n. 17, 1999.
- [59] AHARONI, A. Surface anisotropy in ferromagnetic prolate spheroids. *Journal of Applied Physics*, v. 87, n. 9, 2000.
- [60] ZHOU, C.; SCHULTHESS, T.; LANDAU, D. P. Monte carlo simulations of nife2o4 nanoparticles. *Journal of Applied Physics*, v. 99, n. 08H906, 2006.
- [61] HIKAMI, S.; TSUNETO, T. Phase transition of quasi-two dimensional planar system. *Progress of Theoretical Physics*, v. 63, n. 2, p. 387–401, 1980.
- [62] TAKENO, S.; HOMMA, S. Classical spin systems, nonlinear evolution equations and nonlinear excitations. *Progress of Theoretical Physics.*, v. 64, n. 4, p. 1193–1211, 1980.
- [63] COSTA, B.; COSTA, J. Static and dynamic simulation in the classical two-dimensional anisotropic heisenberg model. *Physical Review B*, v. 54, n. 2, 1996.
- [64] COSTA, B.; LANDAU, D. P.; COSTA, J. Dynamic behavior of vortices in the classical two-dimensional anisotropic heisenberg model. *Physical Review B*, v. 57, n. 18, 1998.
- [65] GUSLIENKO, K.; IVANOV, B.; NOVOSAD, V. Eigenfrequencies of vortex state excitations in magnetic submicron-size disks. *Journal of Applied Physics*, v. 91, n. 10, 2002.
- [66] GUSLIENKO, K.; HAN, X.; BADER, S. Magnetic vortex core dynamics in cylindrical ferromagnetic dots. *Physical Review Letters*, v. 96, n. 067205, 2006.
- [67] ZASPEL, C.; IVANOV, B.; CROWELL, P. Excitations in vortex-state permalloy dots. *Physical Review B*, v. 72, n. 024427, 2005.
- [68] STOHR, J.; SIEGMANN, H. *Magnetism from fundamentals to nanoscale dynamics*. Springer, 2006.
- [69] LANDAU, L.; LIFSHITS, E. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. *Phys. Zeitsch*, v. 8, p. 153–169, 1935.

- [70] GILBERT, T. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 40, n. 6, p. 3443–3449, 2004.