

GABRIEL ALVES DE OLIVEIRA

**UM ESTUDO SOBRE BICAMADAS RETANGULARES DE GELO DE SPIN
ARTIFICIAIS**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

Orientador: Winder A. Moura-Melo

**VIÇOSA - MINAS GERAIS
2023**

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

O48e
2023
Oliveira, Gabriel Alves de, 1998-
Um estudo sobre bicamadas retangulares de gelo de spin
artificiais / Gabriel Alves de Oliveira. – Viçosa, MG, 2023.
1 dissertação eletrônica (67 f.): il. (algumas color.).

Inclui apêndices.

Orientador: Winder Alexander de Moura Melo.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa,
Departamento de Física, 2023.

Referências bibliográficas: f. 57-62.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2023.624>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Gelo de Spin. 2. Magnetismo - Métodos de simulação.
3. Modelos geométricos. I. Melo, Winder Alexander de Moura,
1973-. II. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de
Física. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDD 22. ed. 538.3

GABRIEL ALVES DE OLIVEIRA

**UM ESTUDO SOBRE BICAMADAS RETANGULARES DE GELO DE SPIN
ARTIFICIAIS**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 21 de julho de 2023.

Assentimento:



Gabriel Alves de Oliveira
Autor



Winder Alexander de Moura-Melo
Orientador

AGRADECIMENTOS

Gostaria de expressar meus mais profundos agradecimentos, primeiramente, à minha família, que sempre cuidou, com muito amor, carinho e compreensão de mim e da chama da curiosidade que arde em mim. Sem o carinho incondicional de meu pai Edilson e de minha mãe Reily, do companheirismo e do afeto que meus irmãos, Henrique e Ana Clara, e da confiança de todos meus familiares, próximos e distantes, eu não estaria onde hoje estou. Essa conquista é não apenas minha, mas também suas.

Agradeço também, de todo meu coração, aos meus amigos antigos, novos e futuros. Sem eles, meu caminho até aqui seria monótono e sem propósito. Aos amigos que trago da minha infância e adolescência, muito obrigado por sua presença na minha evolução. Aos amigos que trago de Itajubá, obrigado por me ensinarem o que significa pertencimento e orgulho. Aos amigos que conheci em Viçosa, obrigado por me receberem e, em tão pouco tempo, fazer eu me sentir pertencente. Aos companheiros do departamento, em especial, obrigado pelas ricas discussões - sobre física ou não. Vocês todos fizeram parte dessa construção e, para todo o sempre, carregarei uma parte de vocês comigo.

Ao professor Winder, por sua orientação rica em discussões profundas e pelo entusiasmo pelo desconhecido. Sua curiosidade contagia à todos que o rodeiam e cativou em especial esse jovem cientista. Obrigado pela confiança em trabalhar comigo e por conduzir essa pesquisa com tanta disposição. Que novos trabalhos venham e que novos resultados nos aguardem!

Agradeço também ao estado brasileiro pela educação pública, gratuita e de qualidade, sem a qual não teria a mínima possibilidade de alcançar tal patamar. Em especial, gostaria de agradecer à Universidade Federal de Viçosa pela estrutura disponibilizada e ao Departamento de Física pelo ambiente tão rico e estruturado. Essa pesquisa utilizou tanto da infraestrutura do Grupo de Investigação em Sistemas Complexos (GISC) quanto do cluster da Universidade Federal de Viçosa. Meus sinceros agradecimentos à ambos.

Por fim, agradeço à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro, sem o qual seria impossível realizar a pesquisa aqui apresentada.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

“Ninguém, a não ser aqueles que as tenham experimentado, pode compreender as seduções da ciência”

(Mary Shelley)

RESUMO

OLIVEIRA, Gabriel Alves, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, julho de 2023. **Um estudo sobre bicamadas retangulares de gelo de spin artificial.** Orientador: Winder Alexander de Moura-Melo.

Nesse trabalho, estudamos os efeitos do desvio de uma geometria quadrada em uma bicamada retangular de gelo de spin artificial (BRASI). Especificamente, investigaremos como sistemas com parâmetro de rede diferentes se comportam e como eles se diferenciam do caso quadrado. Para isso, simulamos três configurações com proporção entre lados $\gamma = a/b = \sqrt{2}$, $\sqrt{3}$, e $\sqrt{4}$. Os resultados obtidos mostram que as interações possuem duas partes: uma polinomial, do tipo Ah^B (onde A e B são constantes) e uma exponencial do tipo Ce^{Dh} (onde C e D são constantes). Tal comportamento sugere que, ao nos distanciarmos da geometria quadrada, os monopolos residuais presentes nos vértices dessa rede passam à contribuir cada vez mais fortemente na energia de interação do sistema. Mostramos também que, ao alcançarmos uma rede retangular com parâmetro de rede $\gamma > \sqrt{3}$, o potencial se torna quase insensível à variações desse parâmetro. Por fim, estudamos qual o efeito na energia de interação de incluirmos rotações entre as monocamadas do sistema. Encontramos que, para cada parâmetro de rede, é possível obtermos dois valores de mínimo de energia, mostrando então possíveis ângulos com forte estabilidade que podem ser explorados para aplicações magnetrônicas utilizando tais sistemas.

Palavras-chave: Gelo de spin. Simulação magnética. Sistemas frustrados.

ABSTRACT

OLIVEIRA, Gabriel Alves, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, July, 2023. **A study on bilayered rectangular artificial spin ice.** Adviser: Winder Alexander de Moura-Melo.

Here, we study a rectangular bilayer artificial spin ice (BRASI). Namely, we shall investigate how its underlying geometry alters the results obtained for the square case. For such, we simulate three configurations with aspect ratios $\gamma = a/b = \sqrt{2}$, $\sqrt{3}$, and $\sqrt{4}$. The obtained results show that the interactions are composed by two parts: a polynomial one, with Ah^B (where A and B are constants) and an exponential one, with Ce^{Dh} (where C and D are constants). Such behaviour suggests that, as we go further away from the square geometry, the residual monopoles present in each vertex of this lattice contribute more strongly on the interaction energy of the system. We also show that, as we reach a rectangular lattice with aspect ratio $\gamma > \sqrt{3}$, the potential becomes almost insensible to variations on such parameter. Lastly, we study what are the effects on the interaction energy from including rotation between the monolayers of our system. We find that, for each aspect ratio investigated, there are two minima in the energy, implying possible angles with strong stability which can be exploited for magnetronic applications using such systems.

Keywords: Spin Ice. Magnetic simulations. Frustrated systems.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1.1	Representação de uma organização de dipolos em um sistema anti-ferromagnético. Do lado esquerdo temos esses spins dispostos em uma rede quadrada. Já do lado direito, temos uma rede triangular.	17
Figura 2.2.1	Θ parâmetro J_{ij} define o comportamento coletivo de um determinado material. Caso ele seja positivo e isotrópico, teremos a situação (a) . Caso ele seja positivo e anisotrópico, teremos a situação em (b) . Já para o caso em que ele é negativo, temos o caso em (c)	19
Figura 2.2.2	Configurações de menor energia para dois dipolos situados a) em linha vertical; b) paralelamente; c) um na vertical e outro na horizontal (em L).	20
Figura 2.2.3	Substituição utilizada no modelo de halter.	21
Figura 2.2.4	Representação de um monopolo de Dirac e sua corda. Ao lado esquerdo, temos a visão do campo magnético da corda, enquanto que ao lado direito, temos o monopolo e impomos a restrição à corda. No caso dos monopolos de Nambu, temos uma situação mais próxima à situação da direita. Figura retirada de	23
Figura 2.3.1	Configurações metaestáveis em nanoilhas (a) Circulares e (b) quadradas. Como podemos notar, a forma da nanoilha afeta drasticamente o comportamento do monodomínio estável da estrutura magnética. Imagens retiradas de	24
Figura 3.1.1	Em a temos uma representação da molécula de água e em b temos a representação da estrutura wurtzite, adotada no processo de solidificação.	27
Figura 3.2.1	Representação de uma rede pirocloro de $Di_2Ti_2O_7$. As setas na figura representam o momento magnético de cada átomo de Ti, apontando para o interior ou o exterior da rede. Figura retirada de	29
Figura 3.2.2	Em (a) e (b) temos um mapeamento dos dipolos magnéticos em uma rede cristalina de diamante, no estado fundamental e em uma excitação após a inversão de um dos spins, respectivamente. Em (c) e (d) temos um mapeamento desses mesmos estados utilizando o modelo de halter. Já em (e) temos uma exemplificação do distanciamento do par monopolo anti-monopolo e a corda que os liga está evidenciado em branco. Figura retirada de	31

Figura 3.3.1	Medidas de gelos de spin obtidas pelo LabSpin - UFV. Em (a) , vê-se a estrutura quadrada das redes feitas de permalloy. Já em (b) , temos uma imagem de AFM de uma dessas redes. Os pontos brancos representam um polo magnético, enquanto os pontos pretos representam o outro polo. Imagens gentilmente concedidas por Hamilton A.	33
Figura 3.4.1	Tipos de vértices em uma configuração quadrada. Aqui eles estão apresentados de acordo com sua energia, do menos energético para o mais energético. Figura retirada de	34
Figura 3.4.2	Diferença entre X e R representada em uma rede quadrada com dois monopolos distantes. Figura retirada de e adaptada.	36
Figura 3.5.1	Em (a) temos uma representação de um vértice T_1 em uma configuração retangular, com um enfoque na carga residual Q, que depende de γ . Em (b) temos uma representação de um vértice T_2 também em uma configuração retangular, demonstrando que a carga residual Q é nula. Em (c) temos todos os tipos de vértices da rede retangular. Podemos notar a divisão do tipo T_3 da rede quadrada em dois novos tipos: T_{3-1} e T_{3-2} . Embaixo dos vértices temos as cargas residuais de cada um. Por fim, em (d) temos os estados fundamentais da rede quadrada (State-0) e da rede retangular (State-1).	37
Figura 3.5.2	Propriedades termodinâmicas das redes com quadriláteros. Em (a) temos o calor específico em função da temperatura. Podemos notar que, conforme γ aumenta, o pico do calor específico ocorre em uma temperatura menor. Esse comportamento fica evidenciado em (b) , onde temos a temperatura em que tal pico ocorre em função de γ . Figura retirada de	38
Figura 3.6.1	Energia de interação entre as camadas em função do distanciamento h . É possível notar o aumento vertiginoso da magnitude de interação ao se aproximar as camadas, tanto no caso GS1-GS1 quanto no caso GS2-GS2. Produção do autor.	39
Figura 3.6.2	(a) Temos uma situação em que existe um monopolo apenas na camada inferior. Ao se computar a energia de interação extra nessa situação, temos o gráfico intermediário. O último gráfico nos mostra o resultado do módulo dessa energia. (b) Temos aqui uma situação com um par de monopolos em ambas as camadas. Novamente, o gráfico intermediário apresenta a energia de interação extra desse sistema, e o último mostra o módulo do mesmo. Figura retirada de	40
Figura 3.6.3	A inclusão de um ângulo de rotação entre as camadas de uma BASI é capaz de trazer à tona características ainda mais interessantes desses sistemas. Figura retirada de	41

Figura 4.0.1	Em a temos a configuração de uma placa no estado State-0, enquanto que em b temos a configuração de uma placa no estado State-1.	44
Figura 4.1.1	Gráficos dos dados encontrados na simulação dos sistemas. Em a temos a energia total de cada sistema em função de h . Para simplificar a visualização e compreensão dos mesmos, em b apresentamos a densidade energética por número total de vértices.	45
Figura 4.1.2	Diferença da energia das camadas retangulares e das camadas quadradas. Os símbolos preenchidos representam os dados obtidos pela simulação e as linhas mostram os ajustes exponenciais utilizados. No inset, temos o mesmo gráfico, porém em uma escala logarítmica, para confirmar nossas suspeitas quanto ao formato exponencial desses dados.	46
Figura 4.2.1	Gráficos dos dados encontrados na simulação dos sistemas. Em a temos a energia total de cada sistema em função de h . Novamente, apresentamos as densidades energéticas em b . Chamamos atenção para o fato de que as curvas se mantêm extremamente próximas, mesmo na situação em que $h < 0.6$	47
Figura 4.3.1	Em a , temos uma representação gráfica de dois vértices do tipo T_1 , enquanto que em b temos a representação de dois vértices do tipo T_2 . Tais vértices possuem, naturalmente, uma diferença estrutural. Por esse motivo, a interação entre os mesmos é bastante diferente.	49
Figura 4.4.1	Energia de interação normalizada em função do ângulo θ	50
Figura 4.4.2	Energia normalizada em função do ângulo rotacionado para o caso em que $\gamma = \sqrt{2}$	51
Figura 4.4.3	Configuração de dipolos na rede com $\gamma = \sqrt{2}$	52
Figura 4.4.4	Energia normalizada em função do ângulo rotacionado para o caso em que $\gamma = \sqrt{3}$ nos dois casos - State-0 e State-1.	52
Figura 4.4.5	Configuração de dipolos na rede com $\gamma = \sqrt{3}$ no State-0.	53
Figura 4.4.6	Configuração de dipolos na rede com $\gamma = \sqrt{3}$ no State-1.	54
Figura 4.4.7	Energia normalizada em função do ângulo rotacionado para o caso em que $\gamma = \sqrt{4}$	54
Figura 4.4.8	Configuração de dipolos na rede com $\gamma = \sqrt{4}$ nos ângulos de mínima e máxima do potencial.	55

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Ajuste utilizando (4.1) - State 0	45
Tabela 2 – Ajuste utilizando (4.3) - State-0	47
Tabela 3 – Ajuste utilizando (4.1) - State 1	48

LISTA DE ABREVIATURAS

ASI	<i>Artificial spin ice</i> , Gelo de spin artificial
BASI	<i>Bilayered artificial spin ice</i> , Bicamadas de gelo de spin artificial
pMC	Passo de Monte Carlo
UFV	Universidade Federal de Viçosa

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	CONCEITOS NORTEADORES	15
2.1	Os três pilares conceituais	15
2.1.1	Emergência	15
2.1.2	Fracionalização	16
2.1.3	Frustração	17
2.2	Noções de magnetismo	17
2.2.1	Interação de troca	18
2.2.2	Interação dipolar	19
2.2.2.1	Modelo de <i>halter</i>	20
2.2.3	Monopolos magnéticos	21
2.3	Anisotropia de forma	23
2.4	Método de Monte Carlo	24
3	GELOS DE SPIN	27
3.1	Gelo de água	27
3.2	Gelo de spin natural	28
3.3	Gelo de spin artificial	32
3.4	Redes quadradas	34
3.5	Redes retangulares	36
3.6	Bicamada de gelo de spin	38
4	BICAMADAS DE GELO DE SPIN RETANGULAR	42
4.1	State-0	43
4.2	State-1	47
4.3	As diferenças entre vértices	48
4.4	As rotações e suas influências	50
4.4.1	Rede com $\gamma = \sqrt{2}$	51
4.4.2	Rede com $\gamma = \sqrt{3}$	51
4.4.3	Rede com $\gamma = \sqrt{4}$	53
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	56
	REFERÊNCIAS	57

APÊNDICES

63

APÊNDICE A	–	INTERAÇÃO DE TROCA	64
APÊNDICE B	–	MOMENTO MAGNÉTICO DE UM VÉRTICE DO TIPO T2	67

1 INTRODUÇÃO

O tema de materiais magnéticos frustrados tem recebido cada vez mais atenção, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental. Isso, por conta da grande variedade de fenômenos emergentes que esses sistemas apresentam, fornecendo um terreno fértil para a reprodução de partículas fora do modelo padrão, quase como um "laboratório de partículas" [1–6]. Esses fenômenos também são responsáveis por comportamentos eletromagnéticos de alto interesse para dispositivos tecnológicos de ponta, tais quais memristores [7], portas lógicas [8] e até mesmo spintrônica [9, 10].

Dentre esses, o sistema que possivelmente mais recebeu atenção nos últimos anos são os gelos de spin. Devido ao avanço de técnicas litográficas [11], a facilidade de reprodução desses objetos fez com que as especulações teóricas, tais quais monopolos magnéticos emergentes [6], pudessem ser estudados experimentalmente e o comportamento real dos mesmos fosse posto à prova. Uma grande vantagem que esses sistemas magnéticos tem sobre os outros estudados anteriormente é a facilidade de manipulação de propriedades termodinâmicas via mudança de geometria, como será desenvolvido mais adiante no trabalho.

Nesse panorama, algumas geometrias de grande importância são: as redes kagomé, com suas cargas residuais; as redes quadradas, com sua simplicidade configuracional e as redes retangulares, com sua entropia residual idêntica à dos gelos de água. Além disso, o estudo de combinações.

Neste trabalho, iremos focar nas duas últimas. Em específico, iremos avaliar como o distanciamento da rede quadrada afeta as interações entre placas, estudando a energia das mesmas. Além disso, estudaremos como é a interação dessas placas quando introduzimos um novo grau de liberdade para o sistema através de rotações entre placas. Para isso, dividimos essa dissertação em cinco capítulos além deste. No segundo, apresentamos conceitos norteadores de extrema importância para a compreensão desses sistemas e de nossas simulações. Em seguida, no terceiro capítulo, apresentamos uma breve revisão histórica sobre os gelos de spin: sua origem, evolução e estado atual. Depois desses dois capítulos embasadores, partimos para o cerne do nosso trabalho: no quarto capítulo apresentamos os resultados da comparação energética entre redes quadradas e redes retangulares, além de uma possível explicação para a mudança comportamental que esses sistemas exibem. Já no quinto, apresentamos os resultados das simulações incluindo rotações para todas as configurações testadas. Por fim, no sexto capítulo, concluímos apresentando um breve resumo dos resultados obtidos e os próximos passos à serem tomados no estudo desses sistemas tão ricos e ainda não explorados.

2 CONCEITOS NORTEADORES

2.1 Os três pilares conceituais

Se quisermos compreender com maior profundidade os sistemas de gelo de spin, precisamos, antes disso, lembrarmos três conceitos primordiais:

- Fracionalização;
- Frustração;
- Emergência.

Cada um desses conceitos possuem grande protagonismo no ramo de física dos materiais, porém, também tem sido bastante utilizados no estudo de topologia aplicada [12–14], teoria de campos [15–17] e até mesmo em física de partículas [18, 19]. Além disso, tais conceitos são primordiais para se entender o interesse e as várias aplicações dos gelos de spin. Por essa razão, reservaremos um tempo para definirmos e nos aprofundar um pouco nesses temas.

2.1.1 Emergência

Dizemos que um fenômeno é emergente quando o comportamento coletivo de um grupo de entes dá origem à uma estrutura física diferente daquela presente individualmente no sistema [20, 21]. Em outras palavras, dizemos que um fenômeno é emergente quando a interação entre os objetos constituintes do sistema apresenta propriedades diferentes dos próprios objetos constituintes originais.

Para exemplificar melhor, daremos alguns exemplos. Talvez o exemplo mais usual de partícula emergente sejam os fônons. Em sistemas cristalinos, os átomos de uma rede estão fixos em sua posição. Dessa forma, existe uma quebra de simetria translacional dessas partículas. Porém, apesar de estarem "presos" em uma certa posição, esses átomos ainda podem vibrar nessa rede. Ao realizar esse tipo de movimento, a interação coletiva da rede de átomos é perturbada de tal forma que a energia dessas vibrações seja quantizada. Cada quanta de energia desse tipo é denominada "fônon" e pode ser descrita como uma partícula que se movimenta pela rede através de operadores de criação e destruição, como uma partícula virtual. Ou seja, apesar do sistema como um todo ser composto unicamente por átomos e partículas, o comportamento coletivo dessa rede pode ser descrito como um conjunto de outras partículas (fônons).

Outro exemplo bastante estudado atualmente são os skyrmions magnéticos. O modelo de skyrmions foi inicialmente proposto por Skyrme [13] ao apresentar soluções para sólitons 3D com características bariônicas como uma tentativa de se explicar a interação de píons. No entanto, essa teoria recebeu bastante atenção no campo de matéria condensada, onde skyrmions magnéticos são estruturas tipo vórtice que possuem uma topologia não trivial e carregam, em si, uma carga topológica não nula. Em resumo, essas estruturas são sólitons topológicos, i.e. configurações estáveis e topologicamente protegidas [12,22], compostas por uma textura vorticial dos momentos magnéticos do sistema. Essas estruturas, tipicamente presentes em materiais que apresentam algum tipo de anisotropia, interação e se comportam como se fossem partículas independentes, mesmo sendo efeito de um coletivo de spins.

2.1.2 Fracionalização

O conceito de fracionalização, apesar de ser um pouco mais tangível logicamente, seu mecanismo é um pouco mais etéreo. Dizemos que um sistema sofre fracionalização quando existe a dissociação ou alteração de propriedades de uma determinada partícula dentro do sistema graças ao seu comportamento coletivo.

Um exemplo bastante claro desse tipo de fenômeno ocorre no efeito Hall quântico fracionário, onde cargas elétricas com apenas uma fração da carga do elétron são observadas. Esse efeito foi observado experimentalmente inicialmente por Willet em 1982 [23] e posteriormente teorizada por Laughlin em 1983 [24], mas desde então tem sido uma das áreas mais ativas da matéria condensada, tanto por seu potencial de atuar tal qual um "laboratório teórico" para teorias quânticas de campo, como também por sua alta aplicabilidade em sistemas eletrônicos (em especial no grafeno [25]). Esse fenômeno surge devido à forte correlação de elétrons, causada pela interação coulombiana bastante intensa nos níveis de Landau parcialmente preenchidos em sistemas bi-dimensionais. Nessas situações, os elétrons se condensam em um estado quântico cujas excitações exibem números quânticos fracionários - entre eles, a carga elétrica [19].

Podemos também encontrar materiais que apresentam "separação spin-carga", isto é, a separação de um elétron em duas quasipartículas, o spinon e o chargon (ou holon). A primeira carrega o momento magnético do elétron (spin) e interage com o restante do material como se fosse uma partícula por si só. Já a segunda possui uma carga elétrica associada (negativa no caso de chargons e positiva no caso de holons). Esses dois objetos surgem devido à interação de vários elétrons quando os mesmos são confinados em um espaço muito pequeno, como nanotubos. Devido à forte repulsão de origem coulombiana, os elétrons se "dividem" nessas duas quasipartículas para manter o sistema em uma configuração estável [26–29].

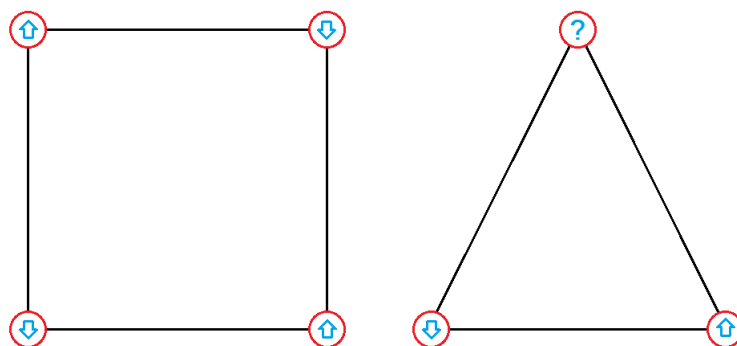


Figura 2.1.1: Representação de uma organização de dipolos em um sistema antiferromagnético. Do lado esquerdo temos esses spins dispostos em uma rede quadrada. Já do lado direito, temos uma rede triangular.

2.1.3 Frustração

Por fim, talvez o conceito mais importante no estudo de gelos de spin é o de frustração. Dizemos que um sistema é frustrado quando é impossível minimizar todas as interações de seus constituintes simultaneamente [30–32]. Obviamente, isso gera uma situação de degenerescência energética no sistema, onde mais de uma configuração possui uma certa energia.

Um exemplo pode ser visto na figura 2.1.1. Considere um sistema antiferromagnético composto por dipolos de Ising, onde dipolos dispostos em uma rede devem ser rodeados por dipolos em uma orientação diferente da sua. Nesse caso, se dispormos esses dipolos em uma rede quadrada todas as interações conseguem ser simultaneamente minimizadas, alcançando assim uma configuração estável. Porém, se dispormos esse mesmo sistema em uma rede triangular conseguimos minimizar, no máximo, duas interações simultâneas. Não importa qual orientação escolhamos para o terceiro dipolo, sempre haverá uma interação que não respeita a ordem antiferromagnética. Dessa forma, dizemos que esse sistema possui uma **frustração geométrica**, já que a origem dessa dissonância é causada unicamente pela geometria da rede.

O fenômeno da frustração é bastante interessante ao se estudar novos materiais, uma vez que ele pode causar degenerescências no estado fundamental dos sistemas sem ter, necessariamente, uma origem quântica.

2.2 Noções de magnetismo

O eletromagnetismo é a interação fundamental mais bem conhecida e estudada dentre as quatro interações fundamentais. Toda a dinâmica do campo eletromagnético

pode ser resumida em oito equações, conhecidas como "Leis de Maxwell":

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= \frac{\rho_{total}}{\epsilon_0}, & \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0, & \nabla \times \vec{B} &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \mu_0 \vec{J}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Esse conjunto de aparentemente simples equações conseguem descrever, juntamente com condições de contorno, qualquer sistema que possua interações eletromagnéticas que se possa imaginar. Nessa seção, iremos discutir alguns sistemas e interações de muito interesse, principalmente para o magnetismo.

2.2.1 Interação de troca

Uma das maiores responsáveis pelo surgimento de ordenamento magnético de longo alcance em diversos materiais é a interação de troca. Essa interação possui uma origem quântica, surgindo devido ao princípio de exclusão de Pauli, que estabelece que dois férmions idênticos não podem ocupar o mesmo estado quântico simultaneamente. A consequência de tal princípio é o estabelecimento da estatística de Fermi-Dirac para partículas com spin meio-inteiro, que estabelece que a autofunção de onda total para um sistema de elétrons deve ser antissimétrica. O modo como esse princípio atua para o surgimento da interação de troca pode ser visto no apêndice A.

Por ser de origem quântica, essa interação possui um baixíssimo alcance, sendo muito relacionada com a superposição das funções de onda da nuvem eletrônica interatômica. Dessa forma, em uma rede cristalina com átomos que apresentam momento magnético, apenas os vizinhos mais próximos estarão ligados por esse tipo de interação. Porém, nessas circunstâncias, essa se torna uma das ligações mais importantes no estabelecimento da ordem magnética, visto que sua magnitude é altíssima.

O primeiro a propor um modelo que descreva essa interação foi Werner Heisenberg, em 1928. Seu estudo levou à descoberta do modelo de Heisenberg, ainda usado na descrição de inúmeros sistemas magnéticos, inclusive em física de ponta. O modelo é bastante simples e pode ser descrito pela hamiltoniana

$$H_{exc} = - \sum_{i>j} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.2)$$

onde $J_{i,j}$ é o parâmetro de troca entre os momentos magnéticos localizados nos sítios i e j . Esse parâmetro é crucial no entendimento de materiais magnéticos, uma vez que ele determinará se o mesmo é ferromagnético, ferrimagnético (em caso de anisotropia) ou antiferromagnético (vide figura 2.2.1).

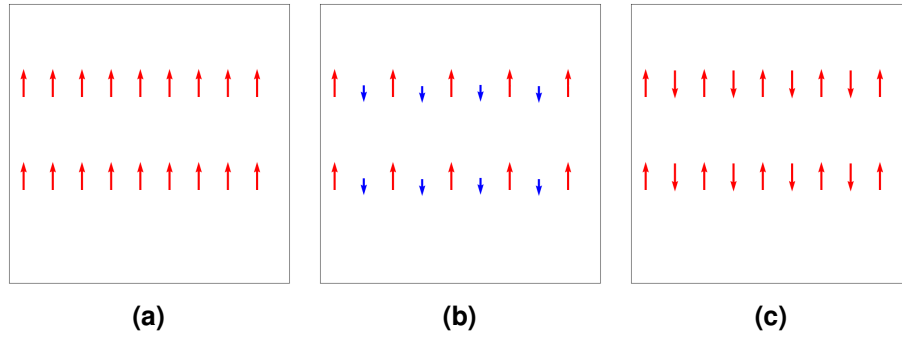


Figura 2.2.1: O parâmetro J_{ij} define o comportamento coletivo de um determinado material. Caso ele seja positivo e isotrópico, teremos a situação **(a)**. Caso ele seja positivo e anisotrópico, teremos a situação em **(b)**. Já para o caso em que ele é negativo, temos o caso em **(c)**.

2.2.2 Interação dipolar

Um dipolo é definido como um sistema que apresente dois polos opostos ligados de alguma forma (seja energeticamente ou por uma limitação física). Nesse sentido, um dipolo magnético é aquele sistema que possui um polo norte e um polo sul, sendo assim um sistema neutro de cargas magnéticas, mas que exibe um campo da forma

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [3(\vec{m} \cdot \hat{r})\hat{r} - \vec{m}], \quad (2.3)$$

onde μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo, \vec{m} é o momento magnético do dipolo, \hat{r} é o versor que aponta na direção que une o dipolo e o ponto onde se calcula o campo e r é o módulo desse mesmo vetor. Caso esses polos estejam separados por uma distância muito pequena em relação à r , podemos dizer que esse dipolo é *pontual*, no sentido de que o momento dipolar do mesmo está basicamente concentrado em um ponto.

Ao se incluir um segundo dipolo pontual nessa configuração, a interação do mesmo com o campo pode ser visualizada através da energia de interação, dada por

$$E_{dip} = -\vec{m}_2 \cdot \vec{B}_1. \quad (2.4)$$

Desse modo, utilizando (2.3), a energia de interação entre os dois dipolos é

$$E_{dip} = -\frac{\mu_0}{4\pi r^3} [3(\vec{m}_1 \cdot \hat{r})(\vec{m}_2 \cdot \hat{r}) - \vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2]. \quad (2.5)$$

Note que essa interação é de origem puramente magnética, sendo causada unicamente pela influência que um dipolo possui no outro. Além disso, devido à forma do campo magnético, essa interação é de longo alcance, sendo de grande importância em sistemas macroscópicos.

Por fim, podemos considerar um sistema constituído por diversos ímãs pontuais, separados por distâncias r_{ij} . Nesse caso, a energia que representa essa configuração é dada por

$$E_{dip} = \frac{\mu_0}{2\pi} \sum_{ij} \left[\frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j) - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right]. \quad (2.6)$$

Através dessa energia, é possível encontrar quais as configurações mais estáveis para dois dipolos, de acordo com suas posições relativas um ao outro. A figura 2.2.2 apresenta essas configurações para três casos de especial interesse no presente trabalho.

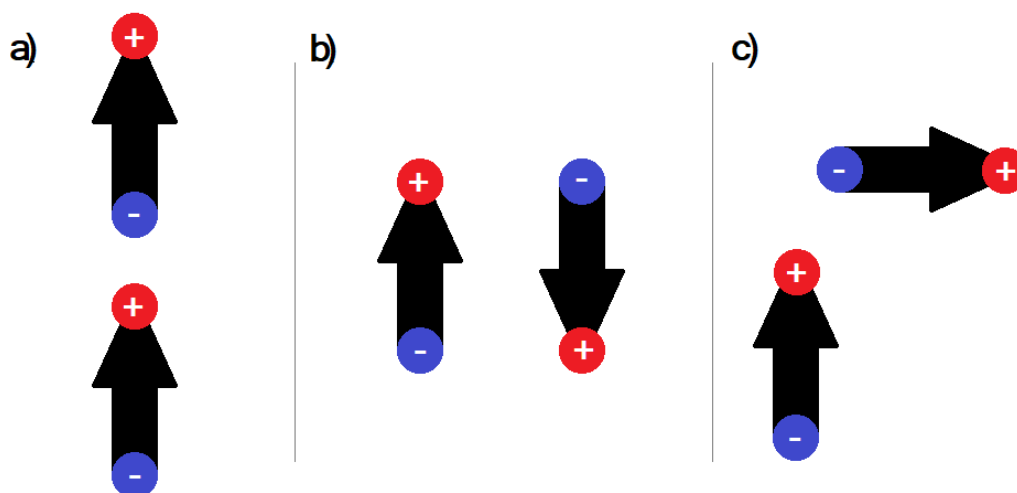


Figura 2.2.2: Configurações de menor energia para dois dipolos situados **a)** em linha vertical; **b)** paralelamente; **c)** um na vertical e outro na horizontal (em L).

2.2.2.1 Modelo de *halter*

Ao se tentar modelar computacionalmente um fenômeno físico, muitas vezes é necessário fazer simplificações no modelo de modo a encontrar o equilíbrio entre verossimilidade com o experimento e o tempo de computação necessário para rodar a simulação. Um exemplo desse tipo de simplificação pode ser encontrado ao se construir uma simulação para vários dipolos interagindo simultaneamente.

Acontece que, devido à dependência da interação dipolar com a direção de cada dipolo par a par e ao seu longo alcance, computar toda a interação do sistema pode ser demasiadamente laborioso até mesmo para uma máquina, levando assim à um gigantesco tempo de execução para a simulação. Para simplificar esse processo, muitas aplicações utilizam-se do modelo de *halter*.

Ele consiste, basicamente, em substituir cada dipolo por um par de monopolo-antimonopolo com carga q e separados por uma distância d igual ao tamanho do dipolo original, tal qual um halter, de modo que o momento de dipolo original $\vec{m} = q\vec{d}$. Uma representação dessa troca pode ser visualizada na figura 2.2.3. Ao se fazer tal substituição, passamos a lidar com $2N$ cargas no sistema, podendo então modelar a interação através de uma interação de Coulomb do tipo

$$E_{halt} = \frac{q^2}{4\pi r^2}, \quad (2.7)$$

onde r é a distância entre cada carga magnética pertencente à dipolos diferentes.

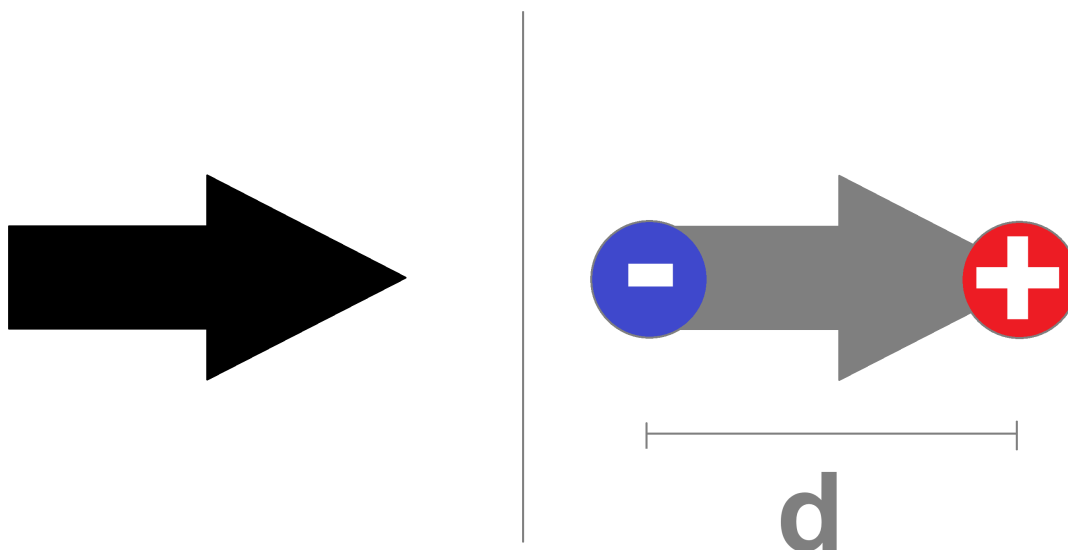


Figura 2.2.3: Substituição utilizada no modelo de halter.

Note que, embora tenhamos dobrado o número de corpos interagentes do sistema, obtemos uma significativa melhora no tempo de execução por não termos mais que lidar com o produto interno presente na equação (2.6), eliminando assim o caráter vetorial dessa interação. Esse tipo de simplificação é frequentemente utilizado em simulações moleculares, onde temos um grande número de partículas interagindo e um grau de liberdade muito grande para a direção do momento magnético das partículas.

2.2.3 Monopolos magnéticos

Apesar de os campos elétricos e magnéticos serem partes igualmente importantes da expressão do campo eletromagnético, existe uma diferença fundamental entre ambas: o campo elétrico possui fontes e sorvedouros isolados, conhecidos como cargas elétricas; já o campo magnético só pode apresentar fontes e sorvedouros em pares, como dipolos, quadrupolos e etc. Essa diferença, por mais simples que seja, possui consequências enormes. Uma delas, por exemplo, é a impossibilidade de se estabelecer correntes magnéticas, análogas às correntes elétricas.

Mesmo com a impossibilidade teórica imposta pelas leis de Maxwell, a ideia de um monopolo magnético nunca fugiu da mente de teóricos que trabalhavam com eletromagnetismo. A primeira conjectura de tal estrutura foi proposta por Pierre Curie, em 1894. Porém, a teoria capaz de prover tal estrutura só seria apresentada em 1931, por Paul Dirac em seu seminal artigo "*Quantised singularities in the electromagnetic field*" [33]. Nesse artigo, Dirac discorre sobre uma possível estrutura capaz de comportar monopolos magnéticos, denominada posteriormente de "Corda de Dirac", que

traria, como consequência de sua existência, a quantização da carga elétrica.

Em resumo, esse sistema pode ser visualizado como um solenoide semi-infinito e de área infinitesimal que se estende desde a origem do sistema de referência até o infinito. Nessa situação, cada ponta do solenoide se comporta exatamente como um monopolo magnético. Porém, para que essa estrutura não viole condições da teoria quântica, a corda que liga um monopolo ao seu par (o corpo do solenoide) não pode ser observável. Ao se fazer tal imposição, o resultado é que a carga elétrica deve ser um múltiplo inteiro da carga magnética existente na ponta da corda, levando então à famosa "condição de quantização de Dirac". Note que, até mesmo hoje, o problema da quantização da carga é uma incógnita na teoria eletromagnética. Por esse motivo essa estrutura recebeu grande atenção, tanto teórica quanto experimental. Apesar de todo o interesse, nenhuma prova de sua existência foi observada até o momento.

Após a publicação do artigo de Dirac, diversos outros sistemas que levavam a estruturas monopolares para o magnetismo foram sugeridos. Um deles se baseava na topologia do campo eletromagnético em uma determinada estrutura espaço-temporal. Esse sistema ficou conhecido como *monopolo de t'Hooft-Polyakov* [34, 35] e, até hoje, ainda é bastante utilizado no estudo de sistemas magnéticos topológicos e em sistemas de matéria condensada.

Por fim, o último sistema que gostaríamos de visitar nessa dissertação se trata dos monopolos de Nambu. Em 1974, Nambu propõe uma estrutura parecida com a corda de Dirac, porém, dessa vez, sem a imposição de que a corda seja inobservável [36]. Ao se retirar essa condição, claramente obtemos um sistema que não leva à condição de quantização da carga elétrica, mas que se assemelha muito mais às estruturas de sistemas reais, inclusive em sistemas de matéria condensada, como veremos posteriormente. A diferença entre ambos pode ser vista na figura 2.2.4

É notório o interesse da comunidade científica em encontrar ou propor teorias que sejam capazes de descrever monopolos magnéticos, visto que a assimetria entre os campos elétrico e magnético parecem sugerir uma incompletude da teoria, que poderia ser resolvida por tais estruturas. Porém, apesar de todo esse entusiasmo, nenhuma prova experimental da existência desses objetos como estruturas fundamentais foi obtida nos últimos 100 anos e, ao que tudo indica, ainda faltam caminhos para obter quaisquer sombras desses objetos, se é que eles existem. Por sua vez, sistemas de matéria condensada são um universo à parte e, nessas estruturas, é possível se obter pseudo-partículas de todo tipo! por essa razão, muitos teóricos que trabalharam com monopolos magnéticos migraram para o estudo desses sistemas tão interessantes e ricos.

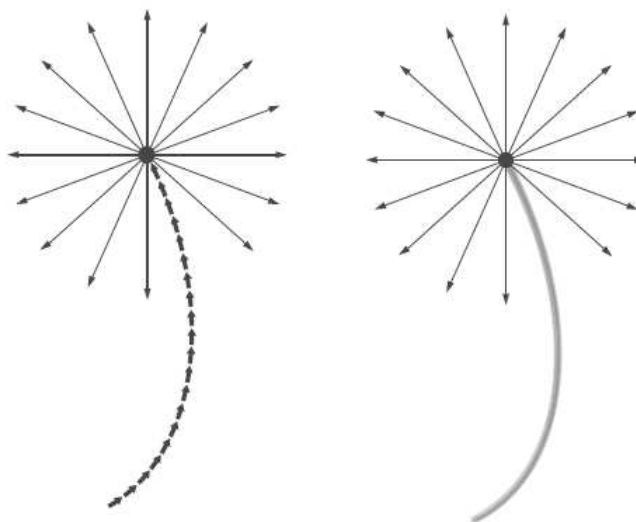


Figura 2.2.4: Representação de um monopolo de Dirac e sua corda. Ao lado esquerdo, temos a visão do campo magnético da corda, enquanto que ao lado direito, temos o monopolo e impomos a restrição à corda. No caso dos monopolos de Nambu, temos uma situação mais próxima à situação da direita. Figura retirada de [37].

2.3 Anisotropia de forma

A anisotropia de forma é o nome dado ao fenômeno em que o formato de um determinado sistema (usualmente magnético) impacta drasticamente no comportamento de propriedades magnéticas do mesmo. Esse tipo de fenômeno é de extrema importância no estudo de materiais magnéticos e em suas aplicações, como em dispositivos eletrônicos, spintrônicos e em dispositivos de conversão energética.

Tal efeito tem como origem a competição entre a energia magnética associada às orientações dos momentos magnéticos do material e a energia associada à organização estrutural do próprio sistema. Essa competição faz com que o sistema tenda à uma configuração capaz de minimizar a energia, alinhando os momentos magnéticos em uma determinada direção. Esse balanço fino pode ser perturbado através da escolha de uma geometria específica, como um cilindro ou um disco. Isso faz com que uma determinada direção seja mais energeticamente favorável do que outra, criando assim um eixo fácil para o alinhamento magnético. Por exemplo, em uma geometria alongada, o eixo fácil é definido como o eixo de maior dimensão do material. Quando isso acontece, dizemos que o sistema apresenta anisotropia de forma. Esse alinhamento, inclusive, pode ser tanto positiva quanto negativa, levando à um ordenamento ferro ou antiferromagnético.

A importância desse fenômeno está na possível manipulação de propriedades magnéticas de diferentes materiais através da simples escolha de uma determinada geometria. Isso simplifica enormemente o trabalho de confeccionar sistemas que atendam às necessidades ou que otimizem um dispositivo eletrônico, por exemplo. Em [2.3.1](#) podemos ver como o formato de uma determinada estrutura magnética pode

modificar os domínios que compõem a mesma.

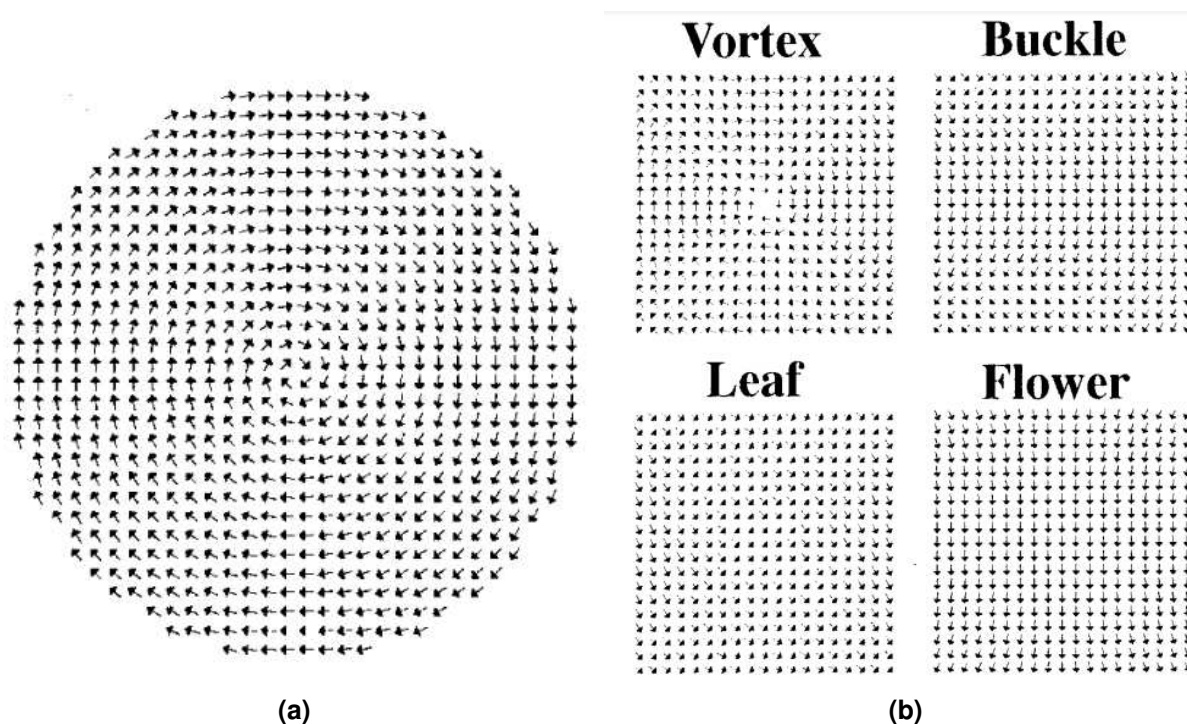


Figura 2.3.1: Configurações metaestáveis em nanoilhas (a) Circulares e (b) quadradas. Como podemos notar, a forma da nanoilha afeta drasticamente o comportamento do monodomínio estável da estrutura magnética. Imagens retiradas de [38, 39] respectivamente.

No contexto de gelos de spin, a anisotropia de forma tem um papel fundamental na simplificação das interações entre nano ilhas. Isso se deve ao fato de que as mesmas costumam ser confeccionadas em um formato cilíndrico, criando assim um eixo preferencial de ordenamento e, conseqüentemente, fazendo com que as nano ilhas se comportem como um monodomínio, sendo então descritas como um simples spin de Ising, apontando na direção do eixo de maior dimensão.

2.4 Método de Monte Carlo

As simulações computacionais tem se configurado como parte primordial de diversas ciências atuais, tais quais biologia, economia, química, matemática, etc. Dentre os métodos numéricos utilizados para isso, uma classe que tem recebido bastante protagonismo em especial na física é o método de Monte Carlo [40, 41]. Esses algoritmos tem sido aplicados nas mais diversas áreas, desde simulações de sistemas magnéticos até o estudo de redes complexas. Por sua relativa simplicidade e poderosos resultados, tem-se utilizado tais métodos principalmente para a obtenção de grandezas termodinâmicas.

Em específico, utilizaremos simulações de Monte Carlo (sMC) para obter configurações de equilíbrio e o estado fundamental de redes de gelo de spin, além de

estimar quantidades necessárias para tal.

Para que um método computacional seja considerado válido, contudo, ele deve seguir duas condições: ergodicidade e balanço detalhado. A primeira estabelece que, partindo-se de um estado inicial μ , qualquer outro estado ν do sistema possa ser alcançado através de um número finito de passos. Já a condição de balanço detalhado está relacionado à reversibilidade dos processos de transição associados ao sistema. Em outras palavras, a probabilidade do sistema em equilíbrio sair de um estado μ e ir para um estado ν , dado por $W(\mu \rightarrow \nu)$ deve ser igual à probabilidade do sistema em sair do estado ν e ir para o estado μ , dado por $W(\nu \rightarrow \mu)$, explicitado pela equação

$$W(\mu \rightarrow \nu)\mathcal{P}(\mu) = W(\nu \rightarrow \mu)\mathcal{P}(\nu). \quad (2.8)$$

No caso das sMC, utiliza-se um processo de Markov, no qual cada nova configuração do sistema depende da configuração atual, que siga a distribuição de Boltzmann, para garantir as condições acima citadas. Esse processo pode ser visualizado como a evolução temporal do sistema e é mediado pela equação mestra

$$\frac{\partial \mathcal{P}(\mu, t)}{\partial t} = - \sum_{\nu} [\mathcal{P}(\mu, t)W(\mu \rightarrow \nu) - \mathcal{P}(\nu, t)W(\nu \rightarrow \mu)]. \quad (2.9)$$

Note que a condição de balanço detalhado nos diz que, no equilíbrio, não há variação da probabilidade $\mathcal{P}(\mu, t)$. Isso está de acordo com a condição inicial do nosso método, já que, nessa situação, as configurações serão geradas seguindo a distribuição de Markov.

Para se fazer essa escolha de nova configuração, porém, é necessário escolher uma taxa de transição $W(\mu \rightarrow \nu)$. A escolha mais usual é a apresentada por Metropolis em 1953 [42], onde a nova configuração terá uma possibilidade maior de ocorrer quanto menos energética ela for. A taxa é dada por

$$W(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} \frac{e^{-\beta[E(\nu)-E(\mu)]}}{t}, & \text{se } E(\nu) - E(\mu) > 0, \\ \frac{1}{t} & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.10)$$

onde t se refere ao tempo transcorrido.

O algoritmo de Metropolis em si é bastante simples e pode ser explicado em alguns simples passos:

- Gere uma configuração inicial do sistema, usualmente aleatória;
- Selecione um dos elementos distintos do seu sistema de maneira aleatória;
- Calcule a diferença de energia caso esse elemento seja modificado (usualmente, em um spin, a energia caso o mesmo seja flipado);
- Caso essa energia dE seja negativa, aceitamos a mudança de estado e voltamos para o primeiro passo;

- Caso $dE > 0$, sorteamos um número aleatório entre 0 e 1;
- Caso o número aleatório seja menor que $e^{-dE/k_B T}$, aceitamos a mudança e voltamos para o primeiro passo;
- Caso contrário, mantemos o elemento intacto e voltamos para o primeiro passo.

Apesar de bastante simples, esse algoritmo pode ser bastante poderoso. Ele é utilizado, por exemplo, para calcular quantidades termodinâmicas de sistemas magnéticos de altíssima magnitude, com mais de 10^6 dipolos em questões de dias!

Para garantirmos que esse algoritmo seja eficiente e cumpra todas as condições de ergodicidade de uma teoria estatística, devemos repeti-lo tantas vezes quanto necessárias para se encontrar um estado de equilíbrio. É importante frisar que esse método é utilizado para se encontrar o estado de equilíbrio do sistema dado uma quantidade térmica, não para analisar como esse sistema evolui de um estado para outro! Portanto, só nos é relevante o resultado final depois que o sistema atingiu seu estado mais estável. Isso usualmente é alcançado com um total de $10^4 - 10^6$ passos de Monte Carlo (pMC), onde cada pMC consiste da aplicação de N vezes do algoritmo.

Esse número é importante para que o sistema percorra todas as possibilidades de variação, fazendo com que apenas o mais estável energeticamente se mantenha, no fim.

3 GELOS DE SPIN

Tendo em mente esses conceitos norteadores, podemos agora nos aprofundar um pouco mais nos materiais conhecidos como gelos de spin. Esses materiais possuem uma longa história, se iniciando em 1997, porém seus fundamentos se iniciam em 1956 com o mapeamento molecular do gelo de água.

3.1 Gelo de água

Por volta de 1930, enquanto estudava o comportamento do calor específico do gelo de água em sua fase mais comum (hexagonal), Giauque encontrou uma entropia residual de $S_0 = 0.82 \pm 0.05$ Cal/deg · mol [43, 44]. Tal característica chamou a atenção da comunidade científica, uma vez que configura uma quebra da terceira lei da termodinâmica como ela era conhecida na época. Uma explicação convincente só seria apresentada 5 anos depois, por Pauling, utilizando-se da degenerescência fundamental da água. Para compreendermos melhor essa explicação, é importante antes termos um certo entendimento sobre as duas regras do gelo de Bernal e Fowler [45].

A molécula de água, apesar de bastante simples, possui uma variedade enorme de comportamentos anômalos, apresentando mais de 70 anomalias registradas até o momento. Em seu cerne, a molécula é composta por um átomo de oxigênio em uma ligação covalente à dois átomos de hidrogênio, com uma distância de 0.96 Å. Devido à distorção eletrônica causada pela ligação covalente, os átomos de hidrogênio adquirem carga positiva e, portanto, se repelem mutuamente. Dessa forma, a partícula apresenta um ângulo de 104° entre cada hidrogênio e uma representação esquemática pode ser vista na figura 3.1.1a.



Figura 3.1.1: Em **a** temos uma representação da molécula de água e em **b** temos a representação da estrutura wurtzite, adotada no processo de solidificação.

Quando esse material se solidifica, as ligações entre moléculas se fortalecem, gerando assim uma ligação O-O com distância característica de 2.76 Å. Os átomos de

hidrogênio, por sua vez, se organizam de tal modo à manter a estrutura da molécula intacta, se posicionando não no ponto médio dessa ligação, mas sim próximo à um dos átomos de oxigênio. Dessa configuração, surgem as duas regras de Bernal e Fowler:

1. Para cada ligação O-O do gelo de água, deve existir, em média, um (e apenas um) átomo de hidrogênio.
2. Para cada átomo de oxigênio, devemos ter dois hidrogênios próximos e dois hidrogênios distantes.

A rede formada pode ser visualizada na figura 3.1.1b. Uma vez que essa rede não consegue minimizar as interações entre os átomos de hidrogênio, ela se torna frustrada e, devido às várias formas de se situar os átomos de hidrogênio em uma mesma célula da rede, essa célula torna-se também degenerada.

Pauling, então, utilizou-se dessas propriedades para construir o seguinte raciocínio [46]: em um mol de gelo, temos N_0 átomos de O^{2-} e $2N_0$ átomos de H^+ . Cada átomo de oxigênio se liga à dois outros átomos de oxigênio, gerando assim $2N_0$ ligações. Seguindo a regra do gelo, para cada ligação, temos duas posições possíveis para os átomos de hidrogênio. Isso configura um total de 2^{2N_0} arranjos possíveis para o sólido todo. Porém, apenas 6 dos 16 arranjos possíveis para cada molécula mantém a estrutura original da água. Dessa forma, o número verdadeiro de arranjos possíveis para esse sistema é de $\Omega = (6/16)^{N_0} 2^{2N_0}$. A entropia configuracional, portanto, é dada por

$$S = k_B \ln \Omega = N_0 k_B \ln(6/4) = N_0 k_B \ln(3/2) = 0.806 \text{ Cal/deg} \cdot \text{mol} = 1.68 \text{ Jmol}^{-1} \text{K}^{-1}. \quad (3.1)$$

Essa estimativa está extremamente de acordo com o valor encontrado por Giauque em 1930 e pôs um fim à discussão iniciada pelo mesmo.

Esse tipo de comportamento termodinâmico posteriormente foi associado à um grande número de materiais que também apresentavam algum tipo de frustração em sua estrutura, em especial em materiais com grande momento magnético. Por esse motivo as regras do gelo ficaram bastante conhecidas e se tornaram um pilar importantíssimo no estudo de matéria condensada de sistemas frustrados. Entre esses, um dos mais conhecidos e explorados até hoje com certeza são os gelos de spin naturais e artificiais, os quais discorreremos com mais profundidade nas próximas seções.

3.2 Gelo de spin natural

Os gelos de spin naturais são materiais conhecidos por apresentarem propriedades muito parecidas com os gelos de água discutidos anteriormente [32]. Usualmente,

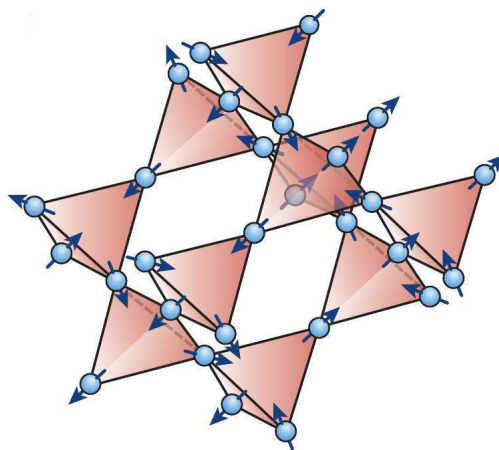


Figura 3.2.1: Representação de uma rede pirocloro de $\text{Di}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$. As setas na figura representam o momento magnético de cada átomo de Ti, apontando para o interior ou o exterior da rede. Figura retirada de [52]

esses são cristais que possuem uma rede pirocloro, tendo como base óxidos de terras-raras do tipo $T_2A_2O_7$. O íon T^{+3} deve ser um átomo magnético do grupo de terras-raras, enquanto o íon A^{+4} não pode apresentar momento magnético [47].

Esses materiais foram inicialmente propostos no fim da década de 90, com Bramwell *et. al* [48], quando o mesmo apresentaram os resultados de um estudo de espalhamento de nêutrons em titanato de Hólmio ($\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$). Tendo exatamente a forma apresentada anteriormente, esse cristal demonstrou ter características termodinâmicas muito parecidas com as do gelo de água no estado wurtzite. Porém, a dificuldade experimental de se estudar a termodinâmica de baixas temperaturas desse material fez com que outras alternativas cristalinas fossem propostas. Posteriormente, o cristal de titanato de Disprósio ($\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$) demonstrou as mesmas características do gelo de spin "original", além de ser muito mais conveniente de se trabalhar experimentalmente [49–51]. Por essas e outras razões (que serão vistas em seu devido momento), o titanato de disprósio assumiu as rédeas como carro chefe no estudo de gelos de spin naturais. Uma esquematização da estrutura atômica desses cristais pode ser vista na figura 3.2.1.

Existem, basicamente, duas características principais que esses materiais apresentam em comum com o gelo de água:

- Regra do gelo no estado fundamental;
- Presença de uma entropia residual.

A analogia com a regra do gelo se dá através de um paralelo entre os momentos magnéticos da rede pirocloro e os vetores de deslocamento que partem do ponto médio das ligações O-O e apontam na direção do átomo de hidrogênio mais próximo. Em ambos os casos, é possível notar a manutenção da regra *two-in two-out* nos estados fundamentais de ambas as redes. O motivo dessa regra surgir em cada caso, porém,

é bastante diferente. No caso do gelo de água, essa regra surge devido à repulsão elétrica entre átomos de H^+ e atração elétrica entre os íons de H^+ e O^- . Já nos gelos de spin naturais, essa regra surge devido à uma anisotropia cristalina que faz com que os momentos magnéticos fiquem paralelos com a linha que conecta os centros de dois tetraedros vizinhos.

Já a presença de uma entropia residual pode ser calculada através de um argumento muito parecido com aquele apresentado por Pauli para o gelo da água: uma vez que os tetraedros são independentes entre si, a entropia será proporcional ao número de configurações possíveis para o sistema. Considerando os momentos magnéticos como tendo apenas dois sentidos possíveis (para dentro ou para fora da rede), cada tetraedro apresenta dezesseis configurações possíveis, das quais seis respeitam a regra do gelo. Portanto, se temos N átomos magnéticos, teremos $N/2$ tetraedros e o número de configurações possíveis será $\Omega = 2^N (3/8)^{N/2}$. Da relação de Boltzmann, encontramos que

$$S_0 = k_B \ln \left[\frac{2^N}{2^N} \left(\frac{3}{2} \right)^{N/2} \right] = \frac{k_B * N}{2} \ln \left(\frac{3}{2} \right) = 1,68 \text{ mol K}^{-1}. \quad (3.2)$$

Posteriormente, Ramirez *et al.* [53] encontrou um valor de $S = 1,86 \frac{J}{\text{mol K}}$ à temperatura $T = 0,3K$ para o titanato de disprósio, demonstrando assim a fase de gelo de spin desses materiais.

Além dessas propriedades do $Di_2Ti_2O_7$, uma terceira característica chamou a atenção da comunidade científica em meados de 2008: a presença de monopolos magnéticos como excitações da rede [6] Essa característica se estabeleceria como o primeiro caso de fracionalização em três dimensões espaciais. Para compreender melhor esse processo, antes precisamos entender como o material é descrito. Para isso, devemos estudar a hamiltoniana do sistema.

Os átomos magnéticos que constituem esses compostos apresentam momentos magnéticos extremamente fortes, da ordem de $10 \mu_B$, de forma que para se descrever o sistema de maneira adequada, é necessário levar em consideração a interação dipolar do mesmo. Porém, essa não é a única interação presente. Visto que o espaçamento de rede desses átomos magnéticos é de aproximadamente 3 a 4 Å, devemos incluir a interação de troca também nessa descrição através do termo de Heisenberg. É importante notar, contudo, que a interação de troca possui um papel muito menos significativo do que a dipolar, já que o distanciamento entre dipolos é razoavelmente alto. Dessa forma, a hamiltoniana do sistema deve ser da forma

$$H = - \sum_{i>j} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i>j} \left[\frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j) - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right]. \quad (3.3)$$

Chamamos atenção para o fato de que essa hamiltoniana é completamente constituída de termos dipolares em sua natureza. Observa-se que a fracionalização

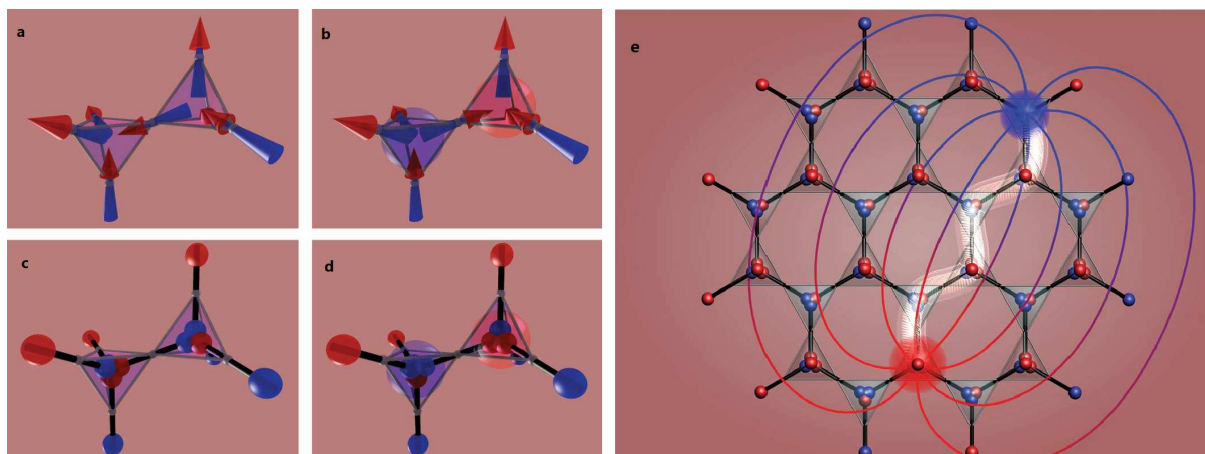


Figura 3.2.2: Em (a) e (b) temos um mapeamento dos dipolos magnéticos em uma rede cristalina de diamante, no estado fundamental e em uma excitação após a inversão de um dos spins, respectivamente. Em (c) e (d) temos um mapeamento desses mesmos estados utilizando o modelo de halter. Já em (e) temos uma exemplificação do distanciamento do par monopolo anti-monopolo e a corda que os liga está evidenciado em branco. Figura retirada de [6].

ocorre e os monopolos surgem devido à estrutura das redes tetragonais do composto, que respeitam a regra do gelo. Os momentos magnéticos presentes na rede acabam se cancelando mutuamente, resultando em uma rede neutra e altamente estável em baixas temperaturas. Porém, ao se excitar tais redes, é possível mudar a direção do momento magnético de um dos átomos, causando assim um desbalanceamento de momentos magnéticos. Com isso, um vértice da rede adquire uma carga monopolar positiva e outro vértice adquire carga negativa. Note que, independentemente da magnitude da excitação, o material ainda deve possuir um balanço entre o número de cargas positivas e cargas negativas, garantindo assim a neutralidade da rede em sua totalidade.

Através de subsequentes excitações dos vértices vizinhos podemos inverter spins e, conseqüentemente, distanciar um monopolo de seu anti-monopolo. Existe, contudo, um resquício desse distanciamento. Como pode-se notar na figura 3.2.2, existe um "caminho" de dipolos que ligam os dois polos no cristal. Uma vez que esse caminho pode ser observado, podemos concluir que os monopolos presentes nesses materiais são do tipo Nambu. Apesar disso, essa corda não é energética e não influi em nenhuma força restritiva aos monopolos, sendo eles livres para se mover pelo material. Isso faz desses materiais excelentes protagonistas em pesquisas relacionados à spintrônica, um análogo magnético da eletrônica.

Muitos outros materiais têm sido estudados como possíveis candidatos à gelos de spin, porém poucos possuem características magnéticas relevantes em médias ou altas temperaturas (cerca de 200K), cenário esse onde as aplicações de nanomateriais se situam.

3.3 Gelo de spin artificial

Apesar de toda sua versatilidade, existe um problema de liberdade nos sistemas de gelos de spin naturais. Acontece que, por sua construção, esses sistemas requerem propriedades bastante específicas, que não são encontradas tão facilmente. Além disso, temos uma certa rigidez quanto à manipulação dos mesmos, visto que estamos restritos às interações atômicas e moleculares dos materiais que compõem tais estruturas. Isso torna bastante interessante a busca por metamateriais ou estruturas que apresentem propriedades magnéticas e de frustração que imitem os gelos de spin naturais, porém mantendo a liberdade de alguns parâmetros, para que se possa modificá-los conforme necessário.

Com esse intuito, os gelos de spin artificiais foram propostos em 2006 por Wang [54]. As primeiras estruturas a serem construídas eram compostas por nanoilhas de materiais magnéticos, organizados como as arestas de uma rede quadrada, de maneira a manter um análogo da regra do gelo *two-in, two-out* em cada vértice da configuração. Esses materiais possuíam uma frustração geométrica bastante parecida com os gelos de spin naturais, uma vez que também possuem quatro momentos magnéticos dispostos de maneira a minimizar a energia de interação entre eles.

Em laboratório, esses sistemas costumam ser confeccionados com nanoilhas da ordem de 220 nm X 80 nm X 25 nm e um distanciamento de aproximadamente 320 nm [54]. Dessa maneira, a interação de troca entre nanoilhas pode ser desconsiderada sem grandes perdas, já que ela só é relevante até uma distância de 20 nm. Obviamente, caso se deseje estudar a dinâmica e o comportamento de cada nanoilha, tal interação deve ser levada em consideração.

Outro aspecto que influencia fortemente a estrutura da interação do sistema é o formato das nanoilhas. Uma técnica utilizada para simplificar a maneira de se estudar esses sistemas é utilizar-se da anisotropia de forma, confeccionando nanoilhas alongadas em um eixo fácil. Fazendo isso, os dipolos podem ser considerados basicamente como dipolos de Ising, apontando em uma única direção.

Dito isso, portanto, podemos definir a hamiltoniana do sistema como um conjunto de interações dipolares, dadas da seguinte maneira

$$H = \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi} \sum_{i>j} \left[\frac{\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\hat{e}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\hat{e}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] s_i s_j, \quad (3.4)$$

onde μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo, μ é o módulo do momento dipolar do monodomínio, \hat{e}_i é o versor que aponta na direção do momento magnético, \vec{r}_{ij} é a distância entre as nanoilhas i e j e s_i nos dá a orientação do momento dipolar da nanoilha (por convenção, adotamos +1 na direção positiva dos eixos x ou y e -1 na direção negativa).

Usualmente, esses materiais são feitos de permalloy, uma liga metálica com

cerca de 70~90 % níquel e o restante de ferro. Apesar desse não ser o único material utilizado na confecção dos gelos de spin artificiais (alguns artigos, por exemplo, utilizam uma liga composta por níquel e cobalto), o permalloy é o mais utilizado devido ao seu baixo custo e fácil manipulação. Esse material apresenta um momento magnético de aproximadamente $\mu \approx 10^7$ magnetons de Bohr. Podemos, inclusive, definir a constante de acoplamento dipolar $D = \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi a^3} \approx 8,598 \times 10^{-19} \text{ J}$, onde a é a distância de separação entre nanoilhas (entre 100 e 200 nm). Isso nos diz aproximadamente a ordem de magnitude da energia de interação entre os dipolos. Graças à esse momento magnético extremamente grande, portanto, a temperatura necessária para se flipar uma nanoilha é de cerca de $T \approx 10^4 \text{ K}$, o que faz com que esses materiais possam ser considerados atérmicos. Essa independência de flutuações térmicas é excelente para o sistema, uma vez que isso previne as nanoilhas de mudarem de direção em um momento indesejado. Em 3.3.1 apresentamos imagens de medidas desses materiais obtidas pelo LabSpin que foram gentilmente concedidas por Hamilton.

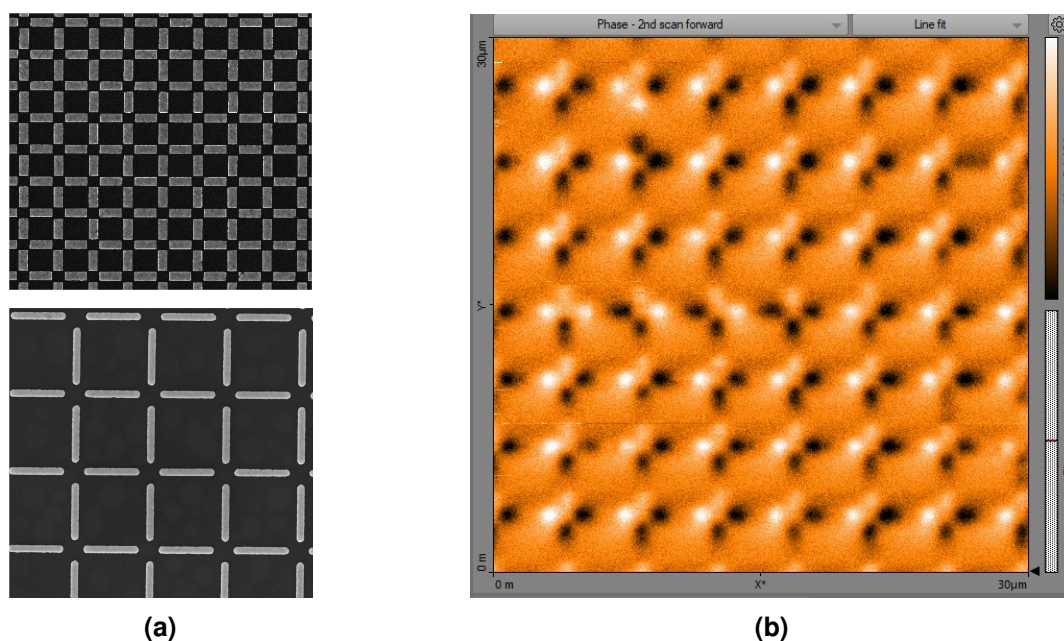


Figura 3.3.1: Medidas de gelos de spin obtidas pelo LabSpin - UFV. Em (a), vê-se a estrutura quadrada das redes feitas de permalloy. Já em (b), temos uma imagem de AFM de uma dessas redes. Os pontos brancos representam um polo magnético, enquanto os pontos pretos representam o outro polo. Imagens gentilmente concedidas por Hamilton A..

Uma grande vantagem desses materiais é que podemos explorar diversas características de sistemas magnéticos frustrados apenas modificando o material utilizado na confecção ou na geometria dos mesmos. Cada geometria possui suas características específicas e se constitui como um sistema altamente rico por si só. Diversos trabalhos já exploraram diferentes geometrias, como a kagomé, a pinwheel, a quadrada, a retangular, entre várias outras. Iremos explorar duas em específico nessa dissertação: a rede quadrada e a rede retangular.

3.4 Redes quadradas

A rede de gelos de spin artificiais quadradas se configura como uma das mais importantes no estudo de sistemas magnéticos frustrados devido à sua simplicidade de confecção, além de ser uma configuração que possui diversos paralelos diretos com a geometria dos gelos de spin naturais. Isso pois, nessa rede, também temos quatro dipolos magnéticos interagindo em cada vértice, sendo a configuração de menor energia aquelas que respeitam a regra do gelo, assim como no caso natural.

Existe, no total, 16 configurações possíveis de organizar as nanoilhas em um vértice dessa rede, podendo estes serem categorizados em 4 tipos, conforme pode ser visto na figura 3.4.1. Essas configurações se diferem de muitas maneiras, tanto por algumas serem mais prováveis do que outras (devido à grande variedade de formas) quanto por suas propriedades magnéticas. Por exemplo, as configurações do Tipo 1 (T_1) respeitam a regra do gelo e não possuem nem carga, nem momento dipolar residual, sendo assim uma configuração bastante pouco energética. Já as configurações do Tipo 2 (T_2), apesar de também respeitarem a regra do gelo, possuem um momento dipolar intrínseco, causado pela proximidade de dois polos iguais em um canto do vértice. Os vértices Tipo 3 (T_3) são os primeiros a não respeitar a regra, gerando assim uma carga residual diferente de zero. E, por fim, os vértices Tipo 4 (T_4) são os mais energéticos e apresentam uma carga residual quatro vezes maior que as presentes nos vértices T_3 .

As configurações de menor energia são aquelas que respeitam a regra do gelo *2-in 2-out*, isto é, os tipos T_1 e T_2 . Porém, na configuração T_2 , temos dois polos iguais muito próximos um do outro. Isso faz com que a energia dessa configuração seja muito maior do que o tipo T_1 . Além disso, essa proximidade faz com que um momento magnético residual exista nesses tipos de vértices. Dessa forma, em baixas temperaturas, o gelo de spin quadrado adota configurações com vértices T_1 em sua totalidade [55]. Esse estado fundamental é amplamente conhecido na literatura e essa transição de fase ocorre em uma temperatura de aproximadamente $T = 7.6K$. Nos referimos à tal configuração como "State-0".

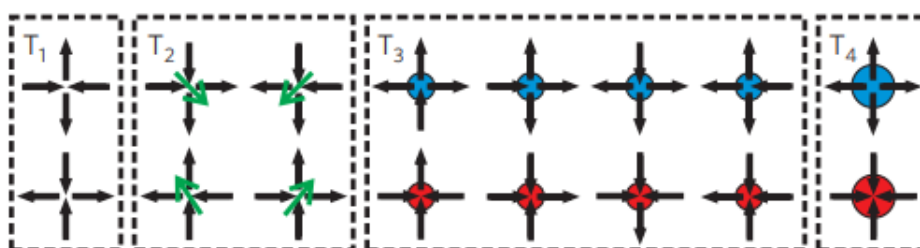


Figura 3.4.1: Tipos de vértices em uma configuração quadrada. Aqui eles estão apresentados de acordo com sua energia, do menos energético para o mais energético. Figura retirada de [55]

Uma situação de grande interesse é a de excitações sobre o estado fundamental.

Note que, em uma rede composta por vértices do tipo T_1 , caso viremos um dos dipolos da rede, necessariamente criamos dois vértices do tipo T_3 , que possuem carga magnética diferente de zero! Dessa forma, as excitações energéticas dessas redes podem ser descritas como monopolos magnéticos de carga $\pm Q$ e, em determinados casos, podem ser movidos pela rede. Essa movimentação é feita excitando alguma das nanoilhas do vértice, fazendo com que o monopolo "caminhe" naquela direção. Porém, nesse processo, devemos necessariamente transformar um vértice T_1 em um T_2 , sendo necessário então, fornecer uma energia maior do que a necessária apenas para se "flipar" uma nano ilha. Além disso, é possível notar que, nessa situação, existe um rastro do movimento dos monopolos pela rede. Esse resquício é o que chamamos de "corda de Dirac" que liga os dois monopolos. Essa corda possui uma energia não nula, devido à interação dos momentos magnéticos dos vértices ali presentes e, portanto, exerce uma espécie de tensão entre os monopolos, quase como se tentasse uni-los novamente.

Essa tensão cresce de acordo com o tamanho da corda X , que por sua vez é diferente do distanciamento R entre o par monopolo-antimonopolo, muito embora exista uma relação de proporcionalidade $X \propto R$ (vide figura 3.4.2). Dessa forma, segundo [56], o potencial de separação entre o par é dado por

$$V_N(R, X) = \frac{q}{R} + bX + c, \quad (3.5)$$

onde q é o valor da interação coulombiana entre as cargas magnéticas, b é uma constante de proporcionalidade, e c é um valor referente à criação do par monopolo-antimonopolo, ou seja, ao valor energético necessário para "flipar" uma das nanoilhas. Tal efeito faz com que os monopolos estejam confinados e o estabelecimento de correntes magnéticas seja energeticamente inviável nessas redes, tornando esses sistemas não muito atrativos para os dispositivos spintrônicos.

Para que se possa, então, neutralizar essa tensão, é necessário encontrar maneiras de se igualar as energia entre os vértices T_1 e T_2 . Esse processo deconfinaria os monopolos e reavivaria a ideia de se usar os gelos de spin para se compor sistemas em spintrônica. Até o momento, são conhecidas duas técnicas capazes de fazer isso mantendo-se uma geometria de quadrilátero. A primeira é o deslocamento de uma fileira de nano ilhas de maneira tridimensional, tornando a rede, antes bidimensional, em um sistema em três dimensões. Ao se alcançar um certo valor de distância entre os spins mais baixos e aqueles com um *offset* [58–61] de $h_c = 0,27a$, as tensões se tornam quase nulas e recuperamos o comportamento das excitações encontradas nos gelos de spin naturais.

A outra modificação, conforme veremos na próxima seção se trata do "esticamento" de uma determinada direção da rede, transformando-a em uma rede retangular.

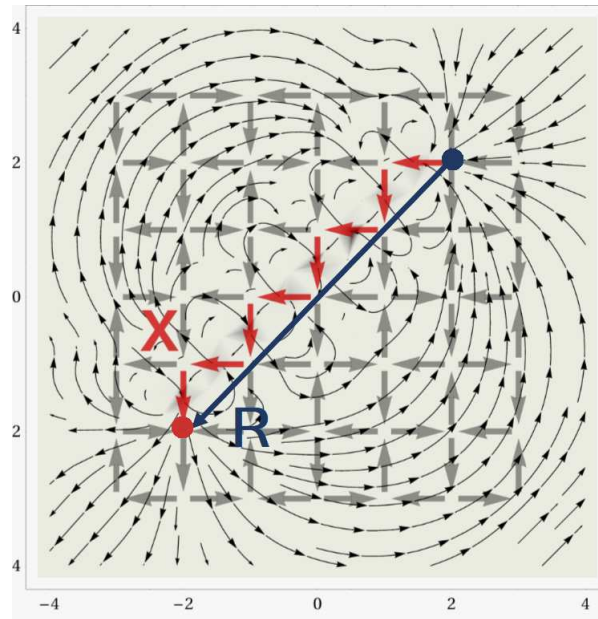


Figura 3.4.2: Diferença entre X e R representada em uma rede quadrada com dois monopólos distantes. Figura retirada de [57] e adaptada.

3.5 Redes retangulares

Ao se esticar uma rede quadrada em uma direção específica, podemos alcançar uma situação em que todos os dipolos estão à uma distância exatamente igual. Isso ocorre quando $\gamma = a/b = \sqrt{3}$, sendo a a distância horizontal e b a distância vertical. Quando isso acontece, as configurações do tipo T_1 e T_2 apresentam a mesma energia, o que faz com que a corda de Nambu que existia anteriormente no caso quadrado exiba uma tensão praticamente nula. Desse modo, os monopólos ficam deconfinados e o estabelecimento de uma corrente magnética no material se torna factível. Além disso, essa configuração faz com que a degenerescência do estado fundamental da rede seja ainda mais intensa, já que agora temos 6 configurações de menor energia dentro das 16 possíveis. Essa situação, inclusive, aproxima ainda mais essa estrutura do gelo da água.

Isso, porém, não vem sem um certo custo. Acontece que, ao se adotar um parâmetro de rede $\gamma > 1$, a distância entre as nanoilhas foge do equilíbrio estabelecido na rede quadrada, fazendo com que as possíveis configurações para os vértices dessa rede sejam completamente alterados. Por exemplo, os vértices do tipo T_1 adquirem uma carga magnética residual, proveniente da maior proximidade entre nanoilhas de um certo sentido, como pode ser visto na figura 3.5.1. Além disso, os vértices do tipo T_3 se dividem agora em dois tipos: T_{3-1} e T_{3-2} , cada um com uma carga magnética diferente. Essas alterações, inclusive, fazem com que o estado fundamental da rede retangular seja completamente diferente do estado fundamental da rede quadrada. Nessa situação, os vértices do tipo T_1 e T_2 possuem a mesma energia, de maneira que o estado fundamental dessa rede seja uma combinação desses dois tipos de vértices.

Para redes com $\gamma > \sqrt{3}$, por sua vez, vértices do tipo T_2 se tornam mais energeticamente favoráveis. Dessa forma, o estado fundamental se torna aquele que possui um momento magnético residual diferente de zero e com carga magnética nula. Porém, à fim de minimizar a energia e maximizar a entropia do sistema, a rede como um todo tende a uma configuração que não possui um momento magnético total apreciável. Sendo assim, a configuração é do tipo "State-1", apresentada na figura 3.5.1.

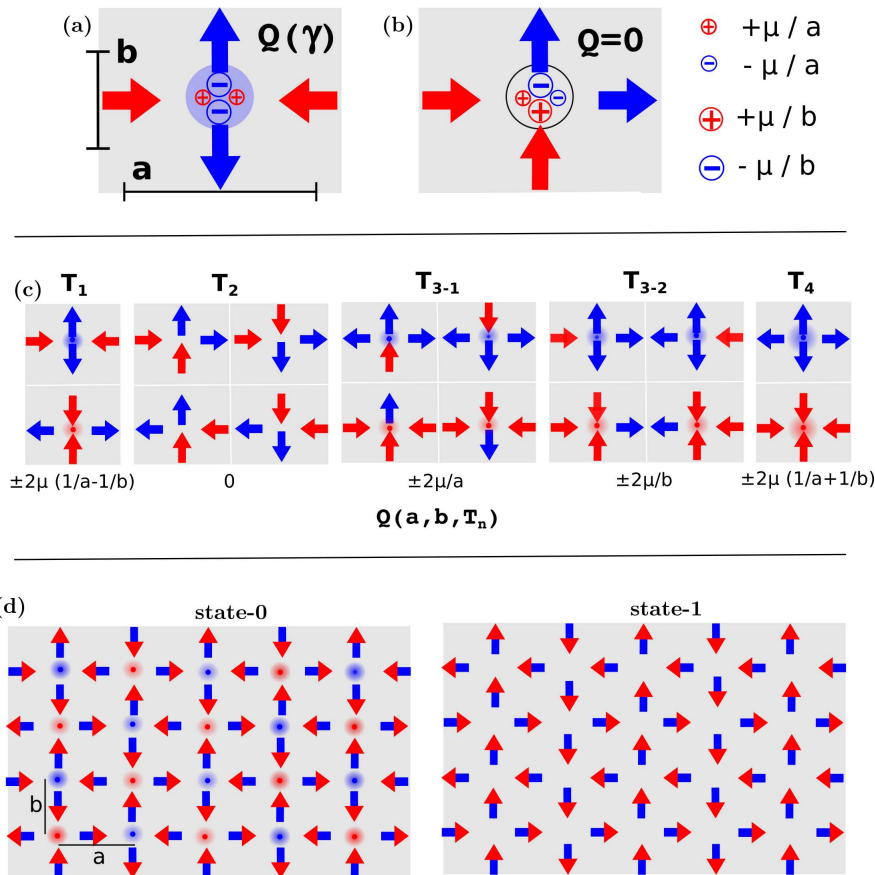


Figura 3.5.1: Figura retirada de [62]. Em (a) temos uma representação de um vértice T_1 em uma configuração retangular, com um enfoque na carga residual Q , que depende de γ . Em (b) temos uma representação de um vértice T_2 também em uma configuração retangular, demonstrando que a carga residual Q é nula. Em (c) temos todos os tipos de vértices da rede retangular. Podemos notar a divisão do tipo T_3 da rede quadrada em dois novos tipos: T_{3-1} e T_{3-2} . Em baixo dos vértices temos as cargas residuais de cada um. Por fim, em (d) temos os estados fundamentais da rede quadrada (State-0) e da rede retangular (State-1).

Essas consequências, inclusive, afetam de maneira expressiva as quantidades termodinâmicas desses sistemas. Um dos efeitos mais claros é a diminuição da temperatura de transição de fase conforme aumenta-se o parâmetro de rede (vide figura 3.5.2). Por sua vez, para $\gamma \geq \sqrt{3}$, a temperatura de transição se torna basicamente fixa e igual à $T = 0.3K$.

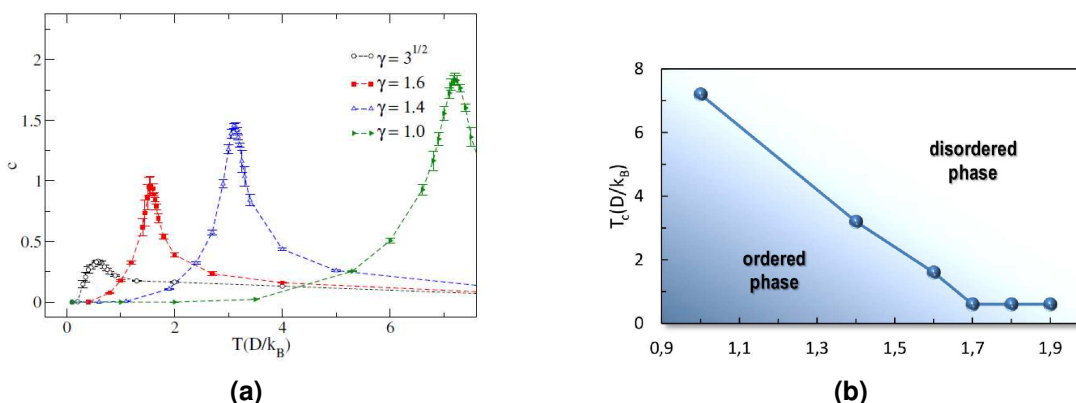


Figura 3.5.2: Propriedades termodinâmicas das redes com quadriláteros. Em (a) temos o calor específico em função da temperatura. Podemos notar que, conforme γ aumenta, o pico do calor específico ocorre em uma temperatura menor. Esse comportamento fica evidenciado em (b), onde temos a temperatura em que tal pico ocorre em função de γ . Figura retirada de [62].

3.6 Bicamada de gelo de spin

Graças à alta versatilidade dos gelos de spin, as pesquisas teóricas puderam se basear no teste de geometrias distintas, cada qual de modo à obter uma propriedade diferente e desejada. Tal qual uma criança brincando de tetrís, os pesquisadores começavam à procurar maneiras de se organizar nanoilhas cada vez mais exóticas, estudando o que poderia ser utilizado e o que deveria ser descartado.

Nesses estudos, porém, o uso da tridimensionalidade nos sistemas era raramente explorada. Isso se deve principalmente ao fato de que as técnicas litográficas para a fabricação de configurações desse tipo só foram desenvolvidas muito recentemente [61, 63, 64], de modo que o estudo experimental e pragmático desses sistemas só se fez possível poucos anos atrás. O sistema mais pesquisado nesse contexto foi o de placas quadradas com um *offset*, conforme já apresentamos brevemente na seção 3.4, essencialmente por conta de suas excitações monopolares deconfinadas.

Existia, porém, um vácuo teórico que deveria ser preenchido caso se desejasse construir dispositivos spintrônicos de grande porte com gelos de spin. Até recentemente, pouco se sabia sobre como diferentes camadas interagem entre si. Em 2021, porém, o trabalho de Santos apresentou uma simulação de qual seria o comportamento das BASI - *Bilayered Artificial Spin Ice* -, um sistema composto por duas camadas de gelo de spin sobrepostas uma à outra, além de estudar como essa interação evoluiria conforme tais camadas se aproximassem [65].

Com uma estrutura razoavelmente simples, os resultados foram bastante interessantes: primeiramente, o estado fundamental não era apenas uma junção dos estados fundamentais de cada rede separadamente. Esse fato é bastante óbvio quando se entende que haverá uma interação entre as placas que deve modificar como o menor estado de energia se apresenta. Mas a grande questão não é essa, mas sim a quebra da degenerescência dos estados fundamentais das placas. Acontece que, para cada

camada isolada, temos duas possíveis configurações de vértices do tipo T_1 . Ambas respeitam a regra do gelo e possuem a mesma energia. Porém, ao se adicionar uma segunda camada de gelo de spin ao sistema, os spins dessa rede tenderão à se alinhar de tal modo que o vértice presente em uma placa seja diferente do vértice presente na outra placa. Sendo assim, há uma quebra de simetria entre as configurações de vértices das redes.

Além disso, essas configurações apresentam uma característica ainda mais interessante: as camadas poderiam atrair-se ou repelir-se, dependendo apenas se elas estavam com uma configuração exatamente igual (GS1-GS1), com os dipolos da placa superior e inferior apontando todos na mesma direção, ou se elas estivessem com configuração contrária (GS1-GS2), com os dipolos da placa superior e inferior apontando em direções contrárias. Para um sistema composto por duas camadas com 1740 nanoilhas cada, o potencial se comporta de acordo com uma função que depende de h^{-6} . A figura 3.6.1 mostra como a energia varia conforme aproximamos as monocamadas uma da outra. Esse comportamento chama a atenção uma vez que possui o mesmo formato que a interação atômica de Van-der-Waals.

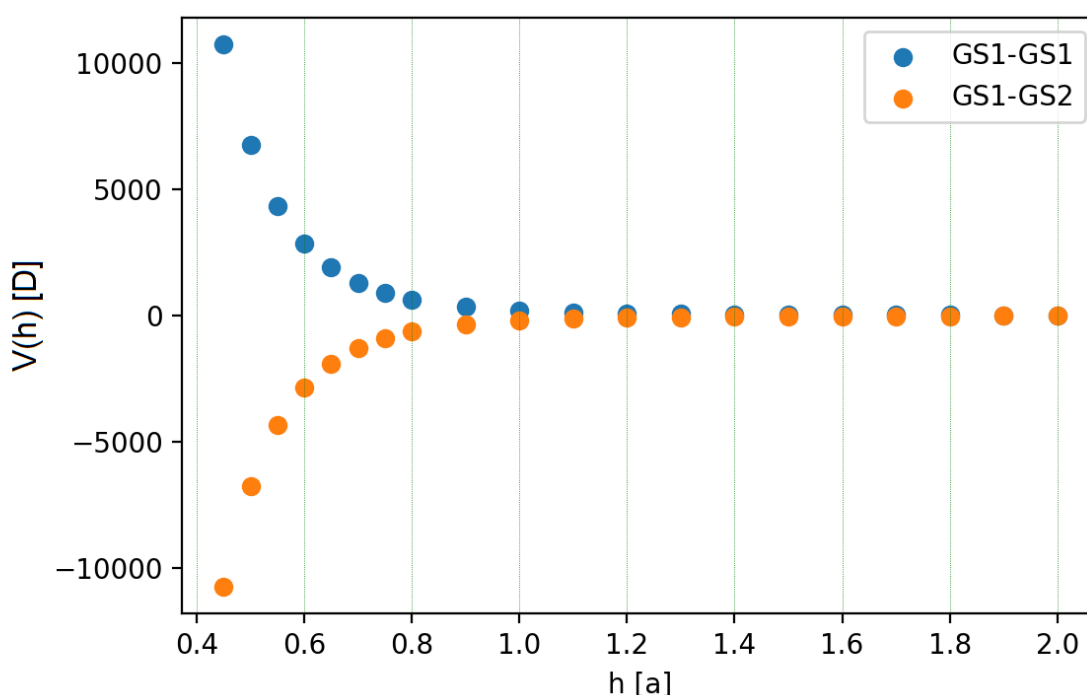


Figura 3.6.1: Energia de interação entre as camadas em função do distanciamento h . É possível notar o aumento vertiginoso da magnitude de interação ao se aproximar as camadas, tanto no caso GS1-GS1 quanto no caso GS2-GS2. Produção do autor.

No caso GS1-GS1, temos uma repulsão entre as camadas, o que faz sentido uma vez que elas estão alinhadas e com configurações exatamente iguais. Já no caso GS1-GS2, temos uma atração mútua entre as mesmas. Esse comportamento é

bastante interessante ao se imaginar que seja possível construir um tipo de interruptor ou disjuntor, trocando o funcionamento de uma determinada estrutura ao mudar de uma configuração para outra.

Além disso, o trabalho também estuda como excitações em cada uma das redes interferem nessa interação. Mais especificamente, o trabalho estuda quatro situações: dois monopolos em uma camada; dois monopolos em cada camada; um monopolo e uma "string" em uma camada; um monopolo e uma "string" em cada camada. O que pode ser observado é que essas excitações também interagem, mas de uma maneira bastante incomum: através de um potencial exponencial, conforme pode ser visualizado na figura 3.6.2. As razões para esse formato de potencial ainda estão sendo debatidas, mas muito provavelmente, esse comportamento pode ser causado devido à blindagem magnética que os dipolos da rede oferecem para os monopolos.

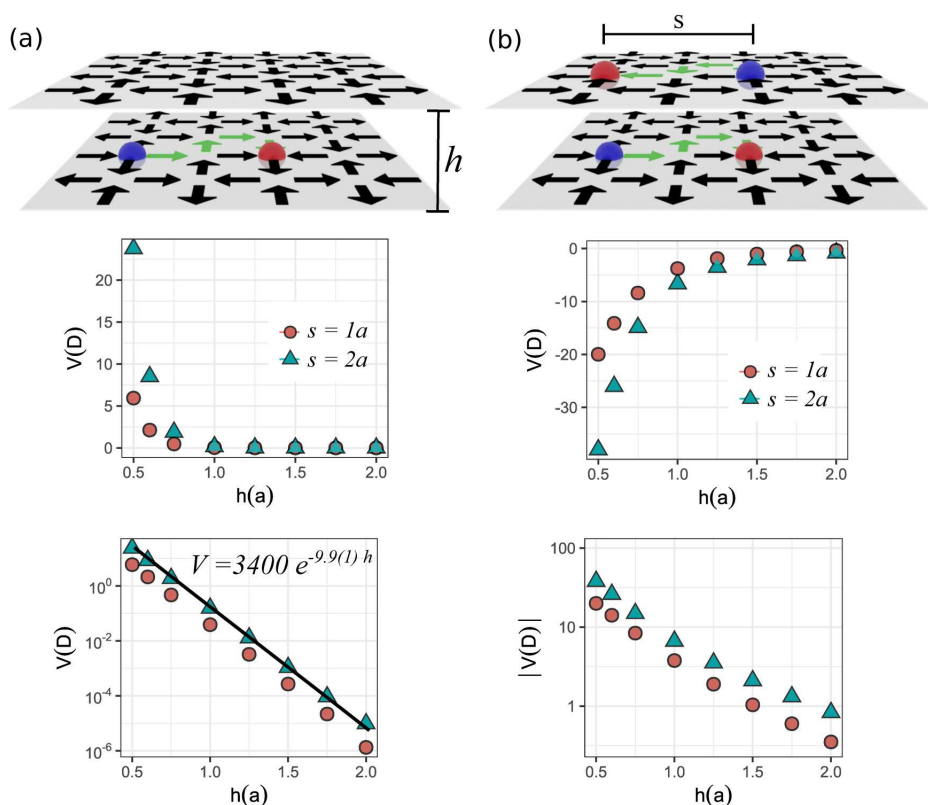


Figura 3.6.2: (a) Temos uma situação em que existe um monopolo apenas na camada inferior. Ao se computar a energia de interação extra nessa situação, temos o gráfico intermediário. O último gráfico nos mostra o resultado do módulo dessa energia. (b) Temos aqui uma situação com um par de monopolos em ambas as camadas. Novamente, o gráfico intermediário apresenta a energia de interação extra desse sistema, e o último mostra o módulo do mesmo. Figura retirada de [65].

Mais recentemente, Rehana [66] demonstrou em sua tese de mestrado que ainda existiam comportamento à serem aproveitados desse sistema ao introduzir uma rotação entre a camada inferior e a camada superior, conforme exemplificado na figura 3.6.3. Ao fazer tal modificação, mostrou-se que existem situações de mínimo e máximo local no potencial, o que configura uma situação estável e instável para as camadas.

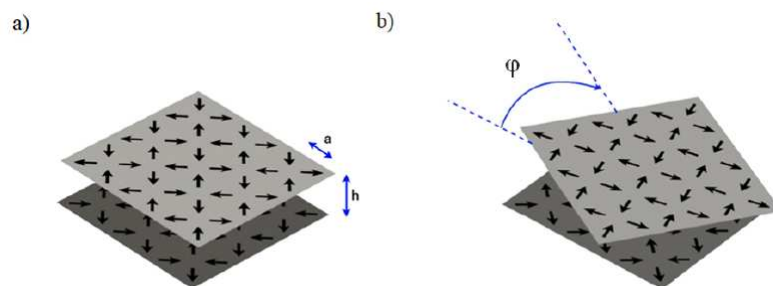


Figura 3.6.3: A inclusão de um ângulo de rotação entre as camadas de uma Basi é capaz de trazer à tona características ainda mais interessantes desses sistemas. Figura retirada de [67].

Esses estados de mínimo e máximo apresentam, inclusive, estruturas periódicas bastante não usuais, além de um comportamento termodinâmico completamente diferente do caso em que não há rotação. Um exemplo de comportamento que é modificado são as curvas de histerese, não só aumentam de espessura como se tornam mais suaves em uma rotação com $\phi = 38^\circ$. Esse tipo de comportamento pode ser bastante interessante na aplicação das Basi em sistemas eletrônicos mais gerais.

4 BICAMADAS DE GELO DE SPIN RETANGULAR

Tendo agora uma certa compreensão de como vieram a surgir os gelos de spin e como tais sistemas já foram explorados, podemos então partir para o trabalho desenvolvido nesse mestrado. Nossa pesquisa se baseia no estudo dos efeitos do esticamento de uma rede quadrada na interação de BASI's, transformando-as em redes retangulares. Esse estudo tem como intuito analisar o uso de redes retangulares e seus monopolos deconfinados como possíveis bases para sistemas spintrônicos, de modo que a interação entre placas deve ser conhecida e levada em consideração.

Para nossa simulação, escolhemos utilizar a linguagem C++ devido à sua simplicidade de aprendizado e definição de objetos, além de rapidez quando se demanda grande poder computacional. Em nosso programa, construímos 2 redes com 1740 dipolos pontuais, dispostos em duas redes interpenetradas, cada uma com 29x30 dipolos. Esse arranjo nos garante um gelo de spin com geometria quadrilátera e um total de $29 \times 29 = 841$ vértices totais. No momento de construção dessa rede na memória computacional, devemos fixar um parâmetro de rede $\gamma = a/b$. Esse parâmetro se mantém fixo para todo o resto da aplicação e é compartilhado pelas duas redes, para que tenhamos certeza de que estamos observando os efeitos do esticamento de ambas as estruturas.

Com a rede então definida, prosseguimos com um protocolo de termalização do sistema através de um annealing térmico utilizando o método Monte Carlo (vide 2.4). Nesse processo, tratamos as monocamadas como se estivessem à uma distância muito grande, de maneira que a termalização se dá para cada uma separadamente e independente da interação entre elas. O annealing então prossegue de uma temperatura $T = 1$ até $T = 0.1$. No fim, portanto, teremos duas camadas completamente termalizadas e em seu estado fundamental.

Para seguirmos adiante, fixamos os momentos magnéticos das nanoilhas em cada camada, basicamente "congelando-os" em sua direção. À partir desse passo, nenhuma alteração se dará nesses objetos (o que chamamos de "flip" do momento). Fazemos esse tratamento unicamente como simplificação do sistema. Em tratamentos anteriores, avaliamos utilizar pMC's para cada distância h que simulássemos, porém esse código se mostrou extremamente demorado e não muito eficiente. Portanto, uma vez que o tempo se mostrava valioso, decidimos atacar o problema por essa ótica à fim de encontrar possíveis efeitos interessantes, enquanto mantemos essa análise anterior ocorrendo em paralelo para trabalhos futuros.

Por fim, então, aproximamos essas camadas e medimos a energia total do

sistema, juntamente com a energia que provém unicamente da interação entre as mesmas.

Repetimos esse processo para três sistemas com os seguintes parâmetros de rede: $\gamma = 1, \sqrt{2}, \sqrt{3}$ e $\sqrt{4}$. Estudamos esses quatro casos para que possamos ter um panorama mais rico de como esse sistema evolui conforme nos distanciamos da rede quadrada e para entendermos quais as situações otimizadas.

Os estados fundamentais dessas redes já são muito bem conhecidos e já foram bastante explorados em diversas simulações [5]. De acordo com a literatura, as redes com parâmetro $\gamma < \sqrt{3}$ apresentam, como estado de menor energia, uma configuração populada por vértices do tipo T_1 . Em nossas simulações, encontramos esses mesmos estados, conforme apresentado na figura 4.0.1a.

Para as redes com parâmetro $\gamma > \sqrt{3}$, por sua vez, a literatura aponta para um estado de menor energia populado por vértices do tipo T_2 . Novamente, em nossas simulações, obtivemos também essa configuração, conforme pode ser visto na figura 4.0.1b.

Já para o caso em que $\gamma = \sqrt{3}$, existe uma dificuldade. Nessa situação, tanto o State-0 quanto o State-1 se configuram como estados fundamentais da rede. Isso se deve ao fato de que, nessa situação, os vértices T_1 e T_2 possuem a mesma energia. Dessa forma, o estado fundamental da rede pode ser qualquer combinação desses dois ajustes. Nossa simulação apresentou exatamente esse tipo de comportamento, tendo uma combinação de vértices em toda sua extensão. Mas, para que possamos analisar e comparar melhor as diferenças entre as redes retangular e quadrada, podemos utilizar essa degenerescência ao nosso favor. Para isso, estudamos a rede com $\gamma = \sqrt{3}$ nos dois casos: State-0 e State-1. Dessa forma, podemos comparar com os estados fundamentais das outras redes sem maiores complicações. Dito isso, partimos para os resultados das simulações.

4.1 State-0

Para as redes com $\gamma \leq \sqrt{3}$, o estado fundamental é dado pelo State-0, conforme visto na figura 3.5.1. Nesse caso, os vértices estão, em sua totalidade, em uma configuração T_1 . Apesar disso, as cargas magnéticas residuais das redes com $\gamma \neq 1$ podem afetar drasticamente como esses sistemas interagem entre si.

Os resultados da simulação podem ser visto nos gráficos da figura 4.1.1. É visível que, conforme o parâmetro de rede aumenta, naturalmente a energia total do sistema também aumenta. Esse comportamento era esperado, uma vez que os vértices são mais energéticos conforme γ cresce. Inclusive, essas diferenças de energia fazem com que, até mesmo um sistema que seria aparentemente mais estável, como uma configuração GS1-GS2 para camadas com $\sqrt{2}$ seja mais energética até do que a

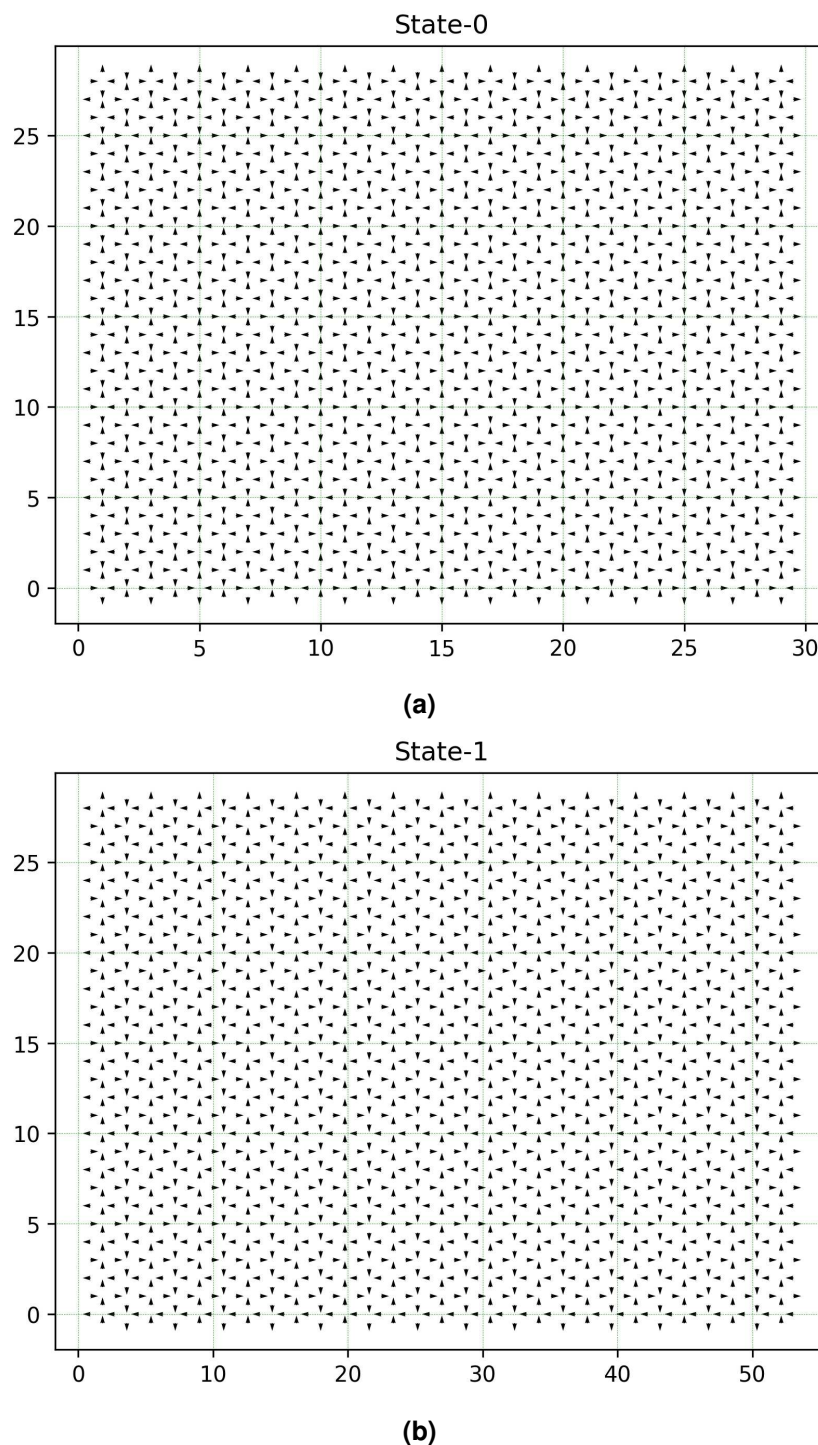


Figura 4.0.1: Em **a** temos a configuração de uma placa no estado State-0, enquanto que em **b** temos a configuração de uma placa no estado State-1.

configuração com GS1-GS1 da rede quadrada. A característica mais interessante, todavia, fica em maior evidência quando analisamos apenas a energia de interação entre as placas. Esses dados são apresentados na figura 4.3.1b.

É possível notar que, conforme o parâmetro de rede aumenta, a interação se torna mais energética, gerando assim uma repulsão ou atração mais intensa. Isso simboliza que a interação deve estar sendo intensificada pelo esticamento das redes.

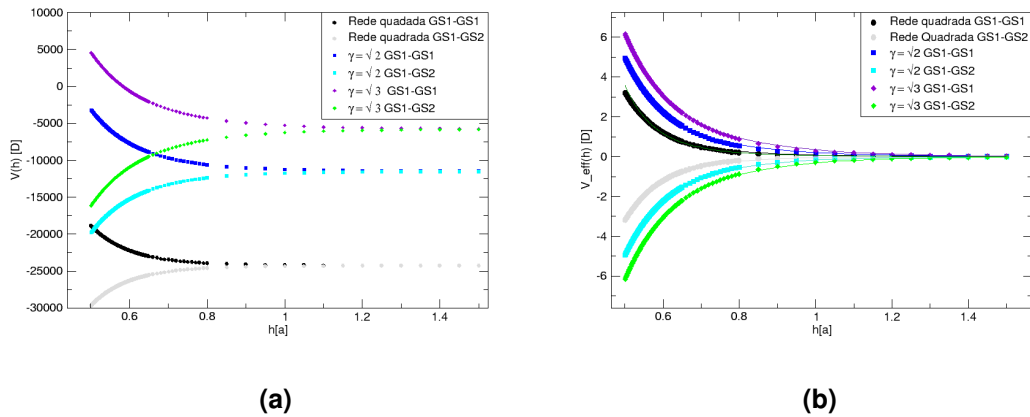


Figura 4.1.1: Gráficos dos dados encontrados na simulação dos sistemas. Em **a** temos a energia total de cada sistema em função de h . Para simplificar a visualização e compreensão dos mesmos, em **b** apresentamos a densidade energética por número total de vértices.

Essa intensificação é bastante evidenciada pelo distanciamento apreciável entre as curvas das redes retangulares e das redes quadradas, principalmente nas situações em que $h < 0.7$.

Para entender o comportamento desse sistema, inicialmente tentamos fazer uma análise do potencial através de uma função potência, conforme o apresentado por Nascimento [65], utilizando um método de regressão. Essa primeira análise não parecia concordar tão bem com os dados, tendo um desvio muito grande principalmente para baixos valores de h . Depois disso, tentamos utilizar uma função exponencial para a regressão, visto que as excitações das BASI interagem dessa maneira e as redes retangulares apresentam monopolos residuais. Novamente, esse ajuste não obteve grande sucesso, ficando sempre abaixo dos resultados obtidos. A solução encontrada, portanto, foi juntar as duas análises em uma única, ajustando uma função do tipo

$$V(h) = Ah^B + Ce^{Dh}, \tag{4.1}$$

através do método "Non-linear curve fitting" do software QtGrace.

Os resultados obtidos nessa situação podem ser visualizadas na tabela 1.

Tabela 1 – Ajuste utilizando (4.1) - State 0

γ	A	B	C	D	χ^2
1	0.0495	-6.2	-	-	-
$\sqrt{2}$	0.645	-3.412	-7.016	-2.6	0.0006
$\sqrt{3}$	0.952	-3.1	-5.5	-2.1	0.001

Apesar desses ajustes para os potenciais se adequarem muito bem aos resultados obtidos ($\chi^2 \approx 10^{-6}$), não fomos capazes de encontrar uma relação entre os parâmetros A, B, C e D e γ . Notamos que, obviamente, a interação se torna mais

intensa, mas para que pudéssemos ter maiores informações do efeito da rede retangular, seria interessante encontrar a dependência desse aumento da intensidade com o parâmetro de rede. Esse tipo de diagnóstico, apesar de ter sido discutido, não foi completamente elucidado e ainda estamos tentando encontrar uma boa explicação para tal. Por essa razão, partimos para uma mudança de ponto de vista. Para isso, decidimos subtrair a energia de interação da rede quadrada (já conhecida) da energia de interação das redes retangulares. O resultado pode ser visualizado na figura 4.1.2. Dessa forma, dizemos que a interação possui o seguinte perfil:

$$V_{eff}(h) = V_{quad} + V_{extra}, \quad (4.2)$$

onde $V_{quad} = 0.0495h^{-6.2}$ é a interação entre placas quadradas, obtida através de um método de regressão e V_{extra} é a interação que surge entre as placas nos casos retangulares.

O que encontramos é que a diferença entre a interação em ambos os casos é basicamente uma função exponencial dependente do distanciamento entre as placas. Ou seja,

$$V_{extra}(h) = A_{exp}e^{B_{exp}h}. \quad (4.3)$$

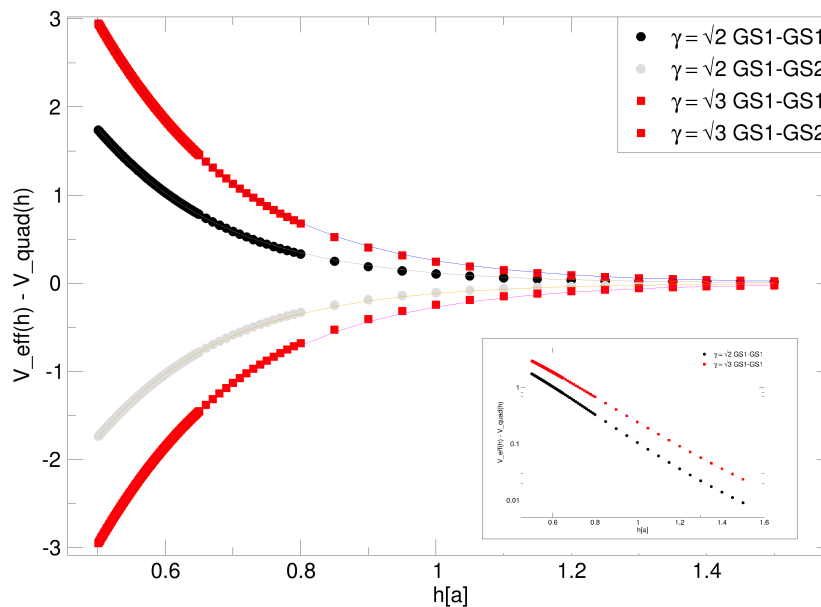


Figura 4.1.2: Diferença da energia das camadas retangulares e das camadas quadradas. Os símbolos preenchidos representam os dados obtidos pela simulação e as linhas mostram os ajustes exponenciais utilizados. No inset, temos o mesmo gráfico, porém em uma escala logarítmica, para confirmar nossas suspeitas quanto ao formato exponencial desses dados.

Ao concluirmos essa segunda análise do formato do potencial novamente utilizando o método "Non-linear curve fitting" do software QtGrace, encontramos que os potenciais efetivos em cada caso são aqueles apresentados na tabela 2. Podemos notar que, conforme aumentamos o parâmetro de rede, a interação exponencial aumenta de magnitude, além de decair mais lentamente.

Tabela 2 – Ajuste utilizando (4.3) - State-0

γ	A'	B'	Erro_{const}	Erro_{coef}
$\sqrt{2}$	26.90	-5.4	0.007	0.006
$\sqrt{3}$	35.531	-4.9	0.03	0.05

Esse processo pode estar relacionado com a maneira de interagir dos monopólos residuais de cada camada em relação às nanoilhas do sistema. Tal hipótese se fortalece ao notarmos que, segundo Nascimento *et. al* [65], a presença de uma excitação em uma única placa faz com que uma nova interação surja, exatamente com uma forma exponencial.

4.2 State-1

Os outros dois casos de interesse que apresentamos nessa dissertação são aqueles com $\gamma \geq \sqrt{3}$, cujo estado fundamental é dado pelo State-1 apresentado na figura 4.0.1b. Para essa situação, os vértices estão em uma configuração T_2 , que apresenta uma magnetização residual devido à proximidade de polos iguais em cada canto do vértice. Apesar disso, esse ordenamento se mostra menos energético que os outros caso a magnetização total da rede seja nula, que é a situação aqui analisada.

Os resultados dessa simulação são apresentados no gráfico 4.2.1. É bastante notável a diferença entre o comportamento das energias do caso anterior e o desse caso. A diferença mais interessante está na proximidade das energias dos sistemas com $\gamma = \sqrt{3}$ e $\gamma = 2$, quase se sobrepondo uma à outra. Isso simboliza que, para esse estado de rede, o esticamento possui uma influência bastante fraca nessa interação.

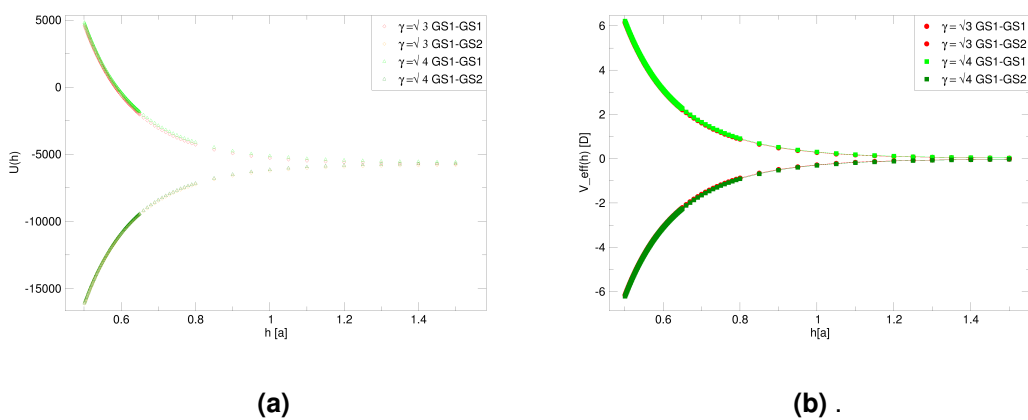


Figura 4.2.1: Gráficos dos dados encontrados na simulação dos sistemas. Em **a** temos a energia total de cada sistema em função de h . Novamente, apresentamos as densidades energéticas em **b**. Chamamos atenção para o fato de que as curvas se mantêm extremamente próximas, mesmo na situação em que $h < 0.6$.

Para termos uma maior compreensão de como esse sistema se configura de

um ponto de vista matemático, prosseguimos com uma análise do formato do potencial. Novamente, os ajustes com funções potências e funções exponenciais puros com os mesmos métodos mencionados anteriormente na seção 4.0.1a não foram de grande ajuda, portanto utilizamos uma função da mesma forma de (4.1). Os resultados da mesma são apresentados na tabela 3.

Tabela 3 – Ajuste utilizando (4.1) - State 1

γ	A	B	C	D	χ^2
$\sqrt{3}$	0.936	-3.104	-5.178	-2.068	0.003
$\sqrt{4}$	0.944	-3.096	-5.068	-2.061	0.0005

Através dessas funções, podemos constatar de maneira algébrica a proximidade dessas energias. Isso mostra que, à partir de $\gamma = \sqrt{3}$ o esticamento das redes não apresenta modificações apreciáveis na energética do sistema. Isto é, parece existir uma estagnação quanto à tal modificação. Simulações com maiores parâmetros de rede podem ser úteis para compreender essa estagnação, porém é necessário cautela, uma vez que existe um ponto onde a rede se torna tão disforme que as nanoilhas se distanciam demais da geometria quadrada e passamos à ter espécies de "fitas", não mais redes bidimensionais.

Na próxima seção, desenvolveremos melhor uma possível explicação para essa diferença.

4.3 As diferenças entre vértices

Conforme pudemos constatar, a diferença de comportamento entre os sistemas com State-0 e com State-1 são consideráveis. O primeiro apresenta um agravamento das interações conforme o parâmetro de rede aumenta. Já o segundo, não parece ser substancialmente alterado pelo mesmo processo. Obviamente, não seria esperado que esses objetos se comportassem de maneira parecida, visto que são estruturas de vértices muito diferentes. Porém, vale a pena tentar compreender as bases teóricas para essa diferenciação, principalmente para se aprofundar no entendimento dessas estruturas.

Começamos a análise dessa diferença notando que os vértices T_1 e T_2 apresentam duas estruturas magnéticas residuais diferentes: uma carga magnética e um momento dipolar magnético, respectivamente. Isso, por si só já aponta para nosso primeiro argumento, o de que a interação entre monopolos residuais sente com maior intensidade os efeitos do esticamento do que entre dipolos residuais.

Esse argumento vêm da seguinte análise: Considere um modelo de *dumbbell* para um vértice simples com parâmetro de rede γ . No caso da configuração T_1 , conforme apresentado na figura 3.5.1, a carga residual seria de $Q = \pm 2\mu \left(\frac{b-a}{a*b}\right)$. Dessa

forma, a energia de interação de dois vértices seria basicamente uma interação de Coulomb

$$E_{State-0}(a, b, r_{12}) = \frac{\pm 4\mu_0\mu^2(b-a)^2}{4\pi r_{12}(ab)^2}, \quad (4.4)$$

onde r_{12} é a distância entre os dois vértices, μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo e a energia pode ser tanto atrativa quanto repulsiva, dependendo da configuração específica do sistema.

Já no caso da configuração T_2 , seguindo o modelo dumbbell, devemos ter um momento magnético com magnitude da forma $m = \mu \left(\frac{a+b}{ab}\right) \sqrt{a^2 + b^2}$ (apresentamos o método utilizado para encontrar essa grandeza no apêndice B). Portanto, a interação de um vértice com outro seria mediado por uma interação dipolo-dipolo

$$E_{State-1}(a, b, r_{12}) = \frac{\mu_0\mu^2(b+a)^2(a^2+b^2)}{4\pi r_{12}^3(ab)^2} [\pm 1 - 3 * (\hat{m}_1 \cdot \hat{r}_{12})(\hat{m}_2 \cdot \hat{r}_{12})], \quad (4.5)$$

onde, novamente, r_{12} é a distância entre os vértices, μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo e a energia pode ser positiva ou negativa dependendo da direção na qual o dipolo residual aponta.

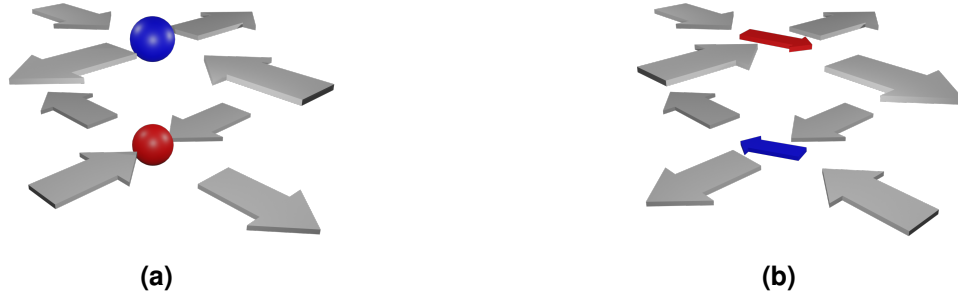


Figura 4.3.1: Em **a**, temos uma representação gráfica de dois vértices do tipo T_1 , enquanto que em **b** temos a representação de dois vértices do tipo T_2 . Tais vértices possuem, naturalmente, uma diferença estrutural. Por esse motivo, a interação entre os mesmos é bastante diferente.

Considere, por simplicidade, que os vértices estão um acima do outro, separados por uma distância $h = 0.5$ e o parâmetro de rede $\gamma = \sqrt{3}$ (ou seja, $a = 1$ e $b = \sqrt{3}$). Nessa situação, teremos as seguintes energias de interação

$$E_{State-0}(1, \sqrt{3}, 0.5) = \pm 1.43\mu_0\mu^2 \quad E_{State-1}(1, \sqrt{3}, 0.5) = \pm 6.34\mu_0\mu^2 \quad (4.6)$$

Agora, se o parâmetro de rede for $\gamma = \sqrt{2}$, encontraremos

$$E_{State-0}(1, \sqrt{2}, 0.5) = \pm 0.69\mu_0\mu^2 \quad E_{State-1}(1, \sqrt{2}, 0.5) = \pm 5.56\mu_0\mu^2. \quad (4.7)$$

Por fim, podemos agora fazer uma comparação entre a energia de um parâmetro de rede e outro, ou seja,

$$\frac{E_{State-0}(1, \sqrt{3}, 0.5)}{E_{State-0}(1, \sqrt{2}, 0.5)} \approx 2.08 \quad \frac{E_{State-1}(1, \sqrt{3}, 0.5)}{E_{State-1}(1, \sqrt{2}, 0.5)} \approx 1.14. \quad (4.8)$$

Isto é, a energia de interação dobra ao se esticar de $\gamma = \sqrt{2}$ para $\gamma = \sqrt{3}$ em uma configuração de State-0, enquanto o mesmo não ocorre para a configuração de State-1, se mantendo quase inalterada.

Outro argumento que pode ser utilizado pra essa mudança brusca está no fato de que dipolos magnéticos são muito mais eficazes em blindar magneticamente um determinado vértice do que monopolos. Sendo assim, esse estado possuiria uma característica muito forte de blindagem que o caso anterior não possui.

4.4 As rotações e suas influências

Para finalizar nossas investigações, iremos tocar brevemente na introdução de um novo grau de liberdade para o sistema: angulação. Seguindo o espírito da pesquisa de Rehana [66], estudamos como as placas reagem ao serem rotacionadas em torno de um ponto no meio das placas. Pretendemos, com isso, procurar situações de máximo e mínimo do potencial de interação, situações essas onde podemos ter disposições bastante interessantes de spins entre as camadas.

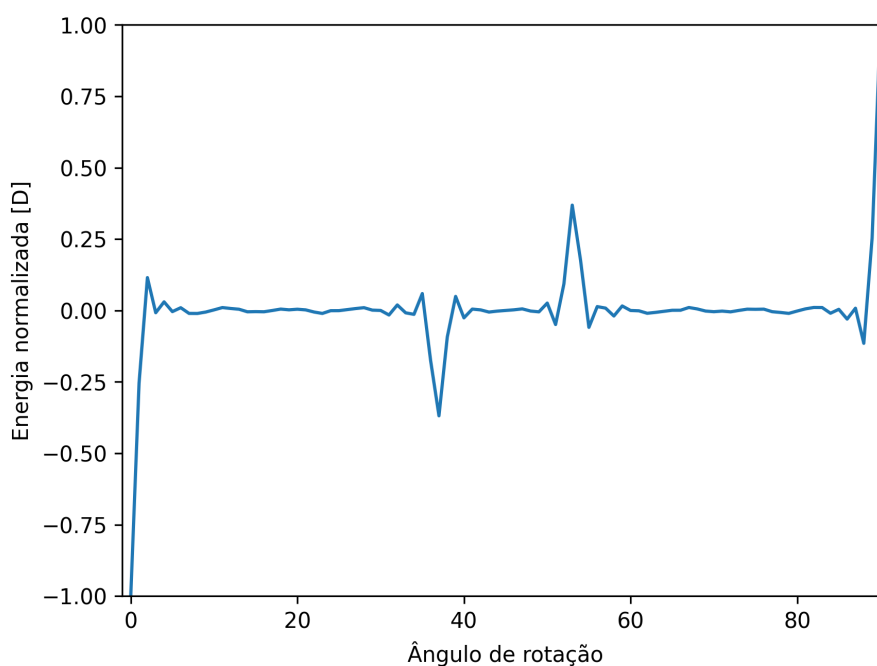


Figura 4.4.1: Energia de interação normalizada em função do ângulo θ .

Para isso, devemos antes definir algumas coisas. Em nossa simulação, utilizamos configurações State-0 com $\gamma = \sqrt{2}$ e $\sqrt{3}$, ambas em um sistema de BRASI com distanciamento $h = 0.5$ entre placas e em um estado GS1-GS2. Com essas definições, podemos iniciar a simulação e estudar como varia a energia em função do ângulo θ . Para facilitar a visualização, normalizamos a energia de interação. Um primeiro teste para sabermos se nosso algoritmo de rotação estava fornecendo o resultado desejado é simularmos uma rede quadrada nessas condições, e conferir se os dados batem

com o que existe na literatura. O resultado desse teste pode ser visto na figura 4.4.1. De fato, os picos de potencial se assemelham com aqueles encontrados por Rehana, com $\theta = 37^\circ$ e $\theta = 53^\circ$. Isso nos diz, portanto, que nosso código está apto à estudar as rotações das redes retangulares.

4.4.1 Rede com $\gamma = \sqrt{2}$

Para a rede com $\gamma = \sqrt{2}$, os resultados são apresentados no gráfico 4.4.2. Um novo comportamento pode ser visualizado nessa rede, uma vez que não temos mais a presença de máximos, nem mesmo quando $\theta = 90^\circ$. Isso se deve ao fato de que, como nossa rede é retangular, uma rotação de noventa graus não leva uma configuração GS1-GS2 em outra GS1-GS2, como ocorre no caso quadrado. Na realidade, essa rotação leva a uma configuração muito mais complexa, já que, nessa situação, teremos áreas não sobrepostas das camadas, gerando assim um tipo de "efeito de borda", por se dizer. Dito isso, podemos ainda reconhecer mínimos expressivos de potencial em $\theta = 50^\circ$ e $\theta = 130^\circ$.

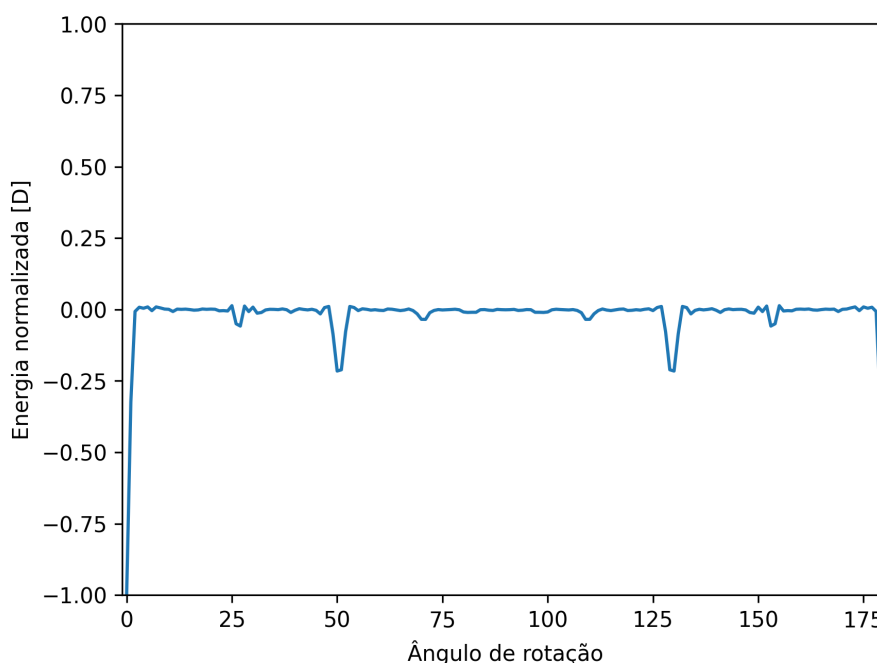


Figura 4.4.2: Energia normalizada em função do ângulo rotacionado para o caso em que $\gamma = \sqrt{2}$.

As configurações dos dipolos nesses pontos de mínimo podem ser conferidas nas figuras 4.4.3. Podemos notar a presença de algumas estruturas nessas imagens, porém não existe grande periodicidade dos mesmos.

4.4.2 Rede com $\gamma = \sqrt{3}$

Para a rede com $\gamma = \sqrt{3}$, decidimos novamente estudar os dois estados (State-0 e State-1). Os resultados dessas simulações podem ser conferidos nos gráficos 4.4.4.

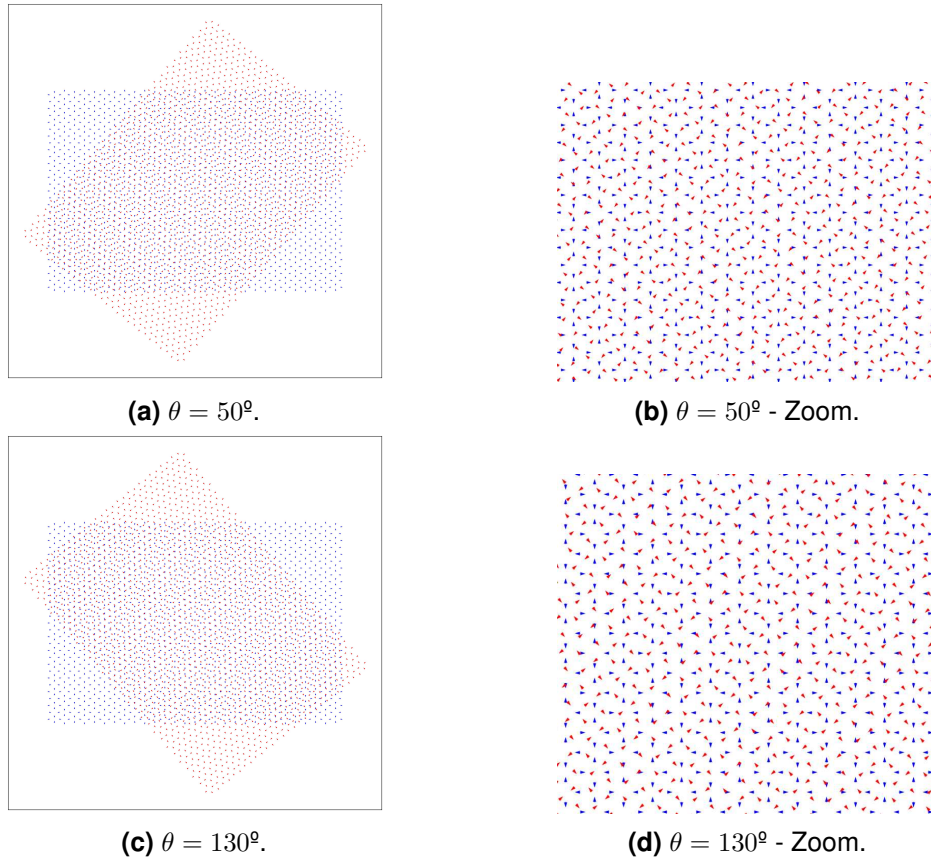


Figura 4.4.3: Configuração de dipolos na rede com $\gamma = \sqrt{2}$.

Aqui, duas situações bastante interessantes acontecem. A primeira é para o State-0, onde novamente temos o efeito da retangularidade da rede faz com que a interação possua apenas mínimos locais situados em $\theta = 60^\circ$ e $\theta = 120^\circ$. Já para o State-1, temos configurações com mínimo e máximo bastante próximas, localizadas em $\theta = 82^\circ$ e $\theta = 98^\circ$.

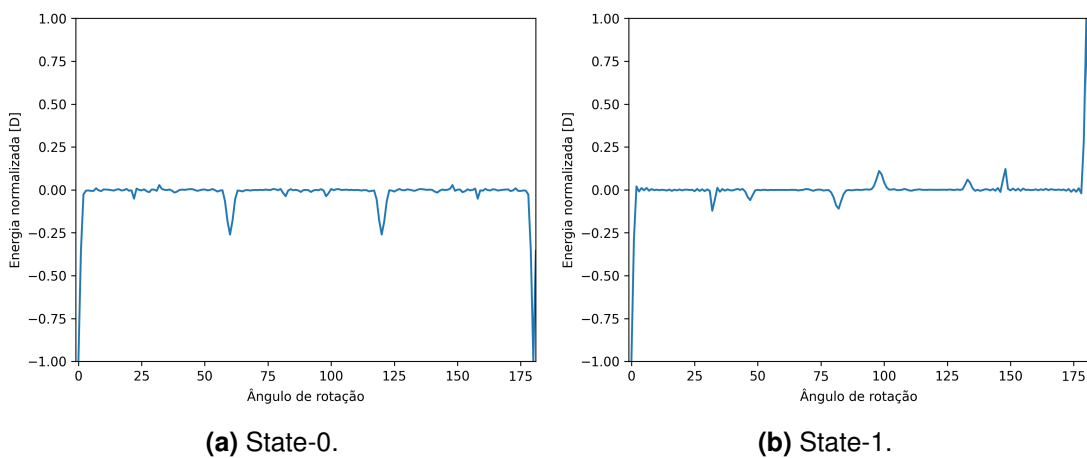


Figura 4.4.4: Energia normalizada em função do ângulo rotacionado para o caso em que $\gamma = \sqrt{3}$ nos dois casos - State-0 e State-1.

As configurações de dipolos nessas situações são extremamente diferentes e trazem questões bastante interessantes que ainda precisam ser melhor exploradas.

No caso do State-0, nos ângulos de mínimo local, encontramos configurações onde os dipolos de uma rede não se sobrepõe à nenhum outro dipolo da outra rede! Desse modo, esses ângulos se tornam menos energéticos pois os dipolos das redes se encontram, em sua totalidade, à maior distância possível de qualquer dipolo da outra rede. Essas configurações podem ser visualizadas nas figuras 4.4.5.

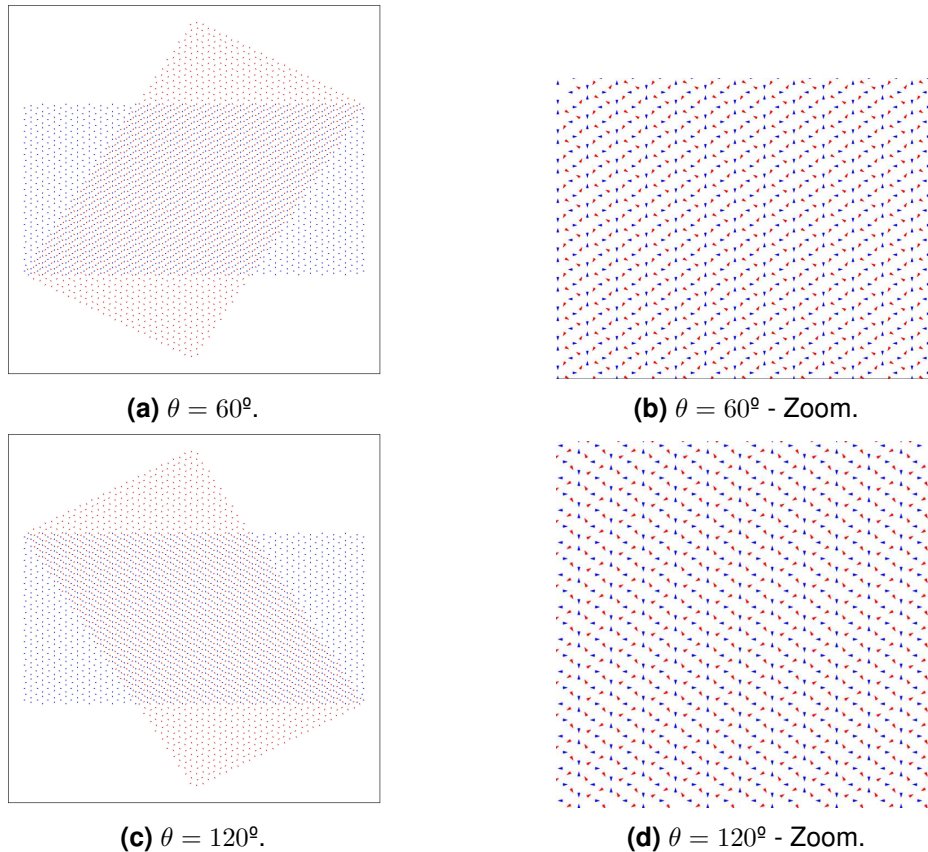


Figura 4.4.5: Configuração de dipolos na rede com $\gamma = \sqrt{3}$ no State-0.

Já para a situação do State-1 temos as configurações apresentadas nas figuras 4.4.6 e é possível notar o surgimento de alguns padrões, embora bastante difusos no caso de mínimo, ao superpormos essas redes. Já par ao caso de máximo, o padrão se torna extremamente visível, com aparentes círculos periódicos na rede.

4.4.3 Rede com $\gamma = \sqrt{4}$

Por fim, para a rede com $\gamma = \sqrt{4}$, utilizamos o estado fundamental State-1 e os resultados podem ser vistos no gráfico 4.4.7. Resultados bastante interessantes aparecem nesse caso, onde temos vários mínimos e máximos locais. Os maiores estão em $\theta = 28^\circ$ e $\theta = 152^\circ$. Nesse caso, podemos notar que, ao rotacionarmos o sistema de 180° , obtemos um máximo de energia. Isso está relacionado ao fato de que, nesse caso, os dipolos residuais todos apontarão para o sentido oposto ao caso inicial. Essa situação é exatamente análoga à diferença entre uma configuração GS1-GS1 e uma configuração GS1-GS2, no State-0.

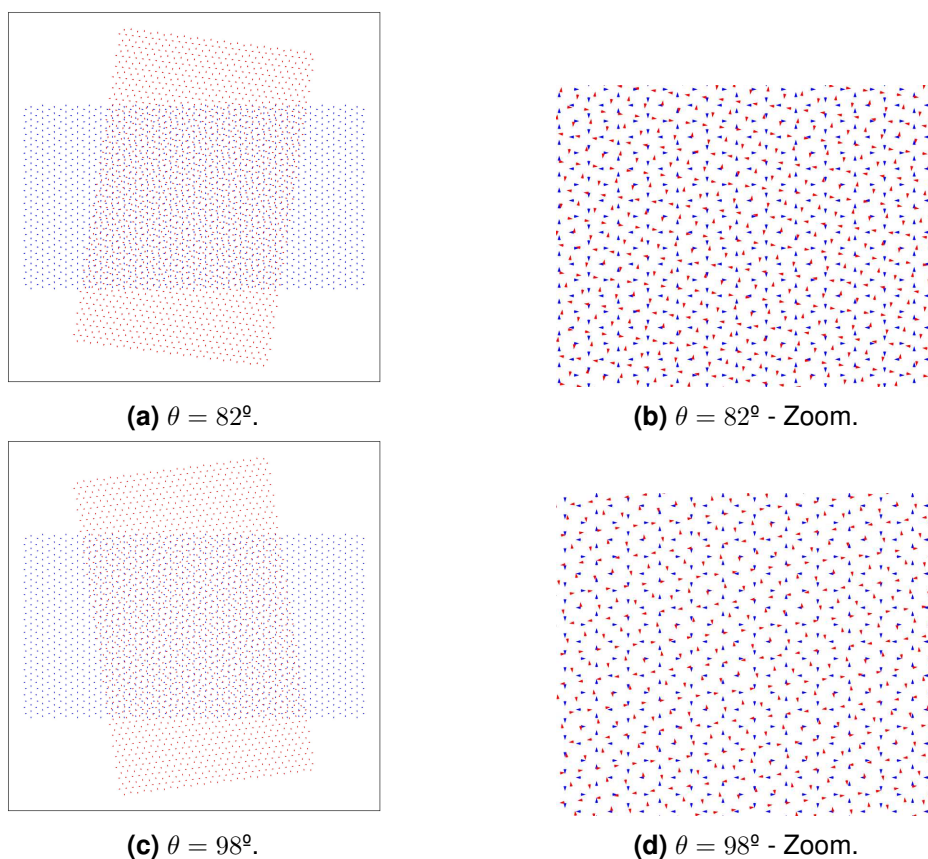


Figura 4.4.6: Configuração de dipolos na rede com $\gamma = \sqrt{3}$ no State-1.

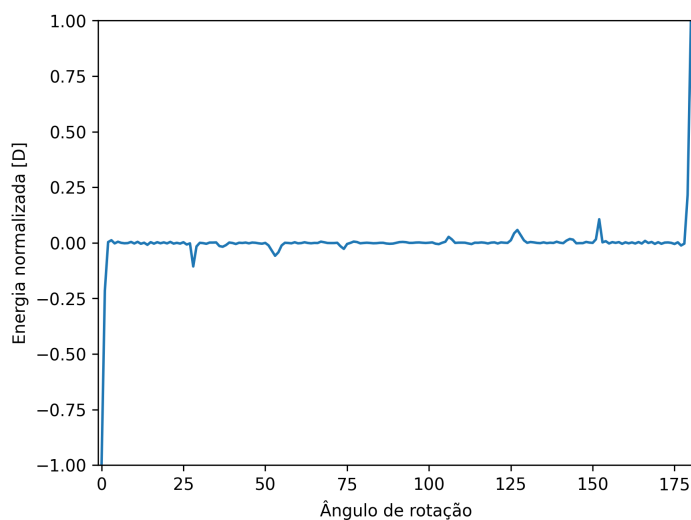


Figura 4.4.7: Energia normalizada em função do ângulo rotacionado para o caso em que $\gamma = \sqrt{4}$

Uma situação curiosa surge ao avaliarmos como fica a configuração de dipolos nas duas camadas nos pontos de máximo e mínimo nos casos de State-1. Algumas estruturas periódicas surgem aqui também, similarmente ao caso quadrado. Porém, aqui, elas aparecem um pouco mais complexas e disformes. A diferença pode estar relacionada ao fato de que utilizamos uma rede levemente diferente daquela já estudada na literatura. As configurações e os padrões podem ser visualizados na figura ??.

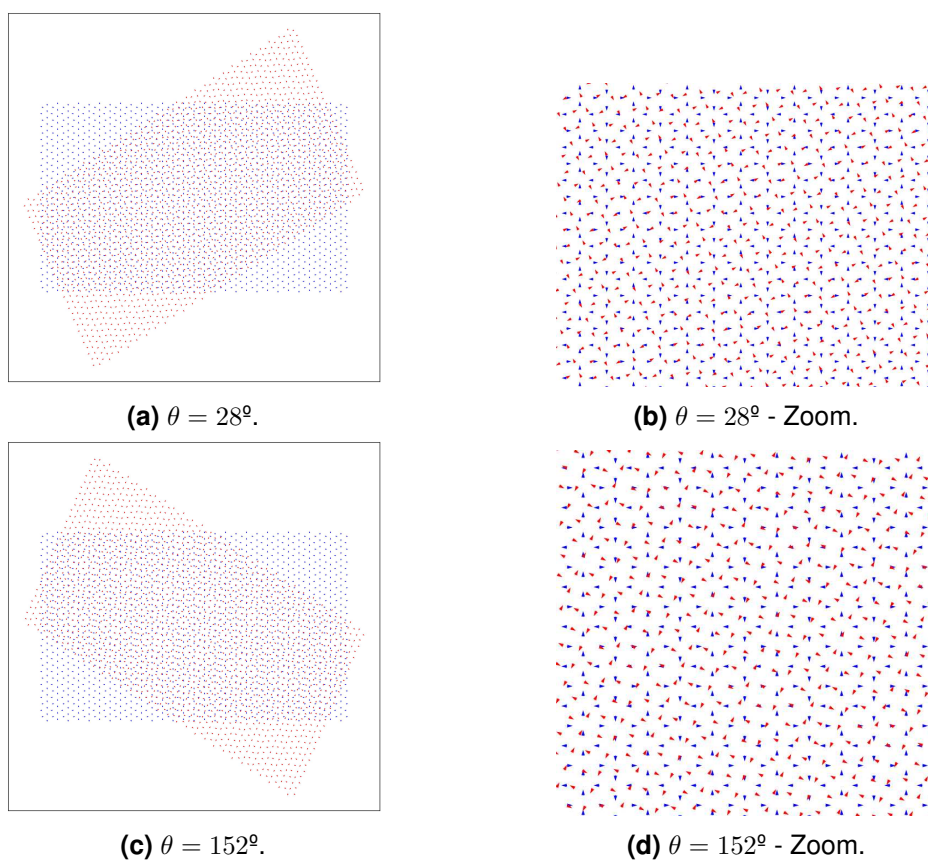


Figura 4.4.8: Configuração de dipolos na rede com $\gamma = \sqrt{4}$ nos ângulos de mínima e máxima do potencial.

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Através das simulações aqui apresentadas, fomos capazes de nos aprofundar um pouco mais nos efeitos que a distorção de uma rede quadrada produz. Mostramos no capítulo 4 que tal esticamento é capaz de introduzir uma nova interação ao conjunto de bicamadas, sendo mediado por um potencial exponencial que nos remete à estruturas de blindagem magnética. Além disso, encontramos que, à partir de um determinado ponto ($\gamma = \sqrt{3}$), a interação se torna pouco dependente do parâmetro de rede, se configurando bastante estável para as configurações com State-1 como configuração de menor energia. Também propusemos uma explicação satisfatória para essa mudança de comportamento, iluminando parcialmente o efeito de blindagem que os dipolos magnéticos dessa rede são capazes de produzir.

Ademais, encontramos que o esticamento é capaz de fazer com que as redes se comportem de maneira muito diferente ao incluirmos um novo grau de liberdade ao sistema. As estruturas periódicas apresentadas no capítulo 4.4 ainda precisam ser mais estudadas e compreendidas, mas o simples evidenciamento dos ângulos em que tais configurações ocorrem já é capaz de chamar a atenção de possíveis futuros trabalhos.

Apesar desses apontamentos serem de grande interesse para o avanço do estudo de sistemas frustrados, muitas dúvidas ainda permanecem. E, é nesse terreno bastante fértil que nosso trabalho se configura. Uma dúvida que ainda nos falta responder é: as configurações estudadas aqui são de fato os estados fundamentais das BRASI? Esse tipo de questionamento, embora muito importante, perpassa uma dificuldade: o tempo de simulação. Uma vez que nosso sistema possui um grande número de dipolos, a implementação de passos de Monte Carlo demanda um processamento muito mais demorado. Ainda assim, pretendemos desenvolver esse sistema em oportunidades futuras.

Outra situação que ainda requer mais atenção é a da rotação nas BRASI. Pretendemos, no futuro, estudar como são as curvas de histerese dessas estruturas e como o transporte de monopolos magnéticos se dá nesses sistemas. Essa última curiosidade vêm da aparição de padrões que muito se assemelham com padrões de Moirée, estruturas muito importantes no estudo de fitas de grafeno, e que são responsáveis pelo aumento significativo da capacidade de transporte elétrico desses materiais. Outra alternativa é a de relacionar esses padrões obtidos na rotação com aqueles estudados no modelo molecular de Bohr-Heisenberg. Esperamos, com isso, descobrir se as BRASI são uma melhor alternativa para a confecção de estruturas spintrônicas do que as BASI ou não.

Referências

- [1] J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, J. Richter, and H.-J. Schmidt, “Macroscopic magnetization jumps due to independent magnons in frustrated quantum spin lattices,” *Physical review letters*, vol. 88, no. 16, p. 167207, 2002. Citado na página 14.
- [2] J. Richter, “Localized-magnon states in strongly frustrated quantum spin lattices,” *Low Temperature Physics*, vol. 31, no. 8, pp. 695–703, 2005. Citado na página 14.
- [3] R. P. Loreto, “Topological states applied to spintronics devices,” 2018. Citado na página 14.
- [4] J. Liang, J. Yu, J. Chen, M. Qin, M. Zeng, X. Lu, X. Gao, and J.-M. Liu, “Magnetic field gradient driven dynamics of isolated skyrmions and antiskyrmions in frustrated magnets,” *New Journal of Physics*, vol. 20, no. 5, p. 053037, 2018. Citado na página 14.
- [5] F. Nascimento, L. Mól, W. Moura-Melo, and A. Pereira, “From confinement to deconfinement of magnetic monopoles in artificial rectangular spin ices,” *New Journal of Physics*, vol. 14, no. 11, p. 115019, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 43.
- [6] C. Castelnovo, R. Moessner, and S. L. Sondhi, “Magnetic monopoles in spin ice,” *Nature*, 2008. Citado 3 vezes nas páginas 14, 30 e 31.
- [7] F. Caravelli, G. W. Chern, and C. Nisoli, “Artificial spin ice phase-change memory resistors,” *New Journal of Physics*, 2022. Citado na página 14.
- [8] F. Caravelli and C. Nisoli, “Logical gates embedding in artificial spin ice,” *New Journal of Physics*, 2020. Citado na página 14.
- [9] S. Sahoo, A. May, A. van Den Berg, A. K. Mondal, S. Ladak, and A. Barman, “Observation of coherent spin waves in a three-dimensional artificial spin ice structure,” *Nano Letters*, vol. 21, no. 11, pp. 4629–4635, 2021. Citado na página 14.
- [10] M. T. Kaffash, S. Lendinez, and M. B. Jungfleisch, “Nanomagnonics with artificial spin ice,” *Physics Letters A*, vol. 402, p. 127364, 2021. Citado na página 14.
- [11] S. H. Skjærvø, C. H. Marrows, R. L. Stamps, and L. J. Heyderman, “Advances in artificial spin ice,” *Nature Reviews Physics*, vol. 2, no. 1, pp. 13–28, 2020. Citado na página 14.

- [12] A. N. Bogdanov and C. Panagopoulos, “The emergence of magnetic skyrmions,” *arXiv preprint arXiv:2003.09836*, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 16.
- [13] T. H. R. Skyrme, “A non-linear field theory,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 260, no. 1300, pp. 127–138, 1961. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 16.
- [14] C. Nisoli, V. Kapaklis, and P. Schiffer, “Deliberate exotic magnetism via frustration and topology,” *Nature Physics*, vol. 13, no. 3, pp. 200–203, 2017. Citado na página 15.
- [15] J. Bain, “Emergence in effective field theories,” *European journal for philosophy of science*, vol. 3, pp. 257–273, 2013. Citado na página 15.
- [16] S. Kivelson, “Electron fractionalization,” *Synthetic Metals*, vol. 125, no. 1, pp. 99–106, 2001. Citado na página 15.
- [17] G.-Y. Sun, Y.-C. Wang, C. Fang, Y. Qi, M. Cheng, and Z. Y. Meng, “Dynamical signature of symmetry fractionalization in frustrated magnets,” *Physical Review Letters*, vol. 121, no. 7, p. 077201, 2018. Citado na página 15.
- [18] E. Witten, “Symmetry and emergence,” *Nature Physics*, vol. 14, no. 2, pp. 116–119, 2018. Citado na página 15.
- [19] D. Tong, “The quantum hall effect (2016),” URL <https://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/qhe/qhe.pdf>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 16.
- [20] S. Kivelson and S. A. Kivelson, “Defining emergence in physics,” *npj Quantum Materials*, vol. 1, no. 1, pp. 1–2, 2016. Citado na página 15.
- [21] R. C. Bishop, *The physics of emergence*. Morgan & Claypool Publishers, 2019. Citado na página 15.
- [22] Y. Tokura and N. Kanazawa, “Magnetic skyrmion materials,” *Chemical Reviews*, vol. 121, no. 5, pp. 2857–2897, 2020. Citado na página 16.
- [23] R. Willett, J. P. Eisenstein, H. L. Störmer, D. C. Tsui, A. C. Gossard, and J. English, “Observation of an even-denominator quantum number in the fractional quantum hall effect,” *Physical review letters*, vol. 59, no. 15, p. 1776, 1987. Citado na página 16.
- [24] R. B. Laughlin, “Anomalous quantum hall effect: an incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations,” *Physical Review Letters*, vol. 50, no. 18, p. 1395, 1983. Citado na página 16.

- [25] K. I. Bolotin, F. Ghahari, M. D. Shulman, H. L. Stormer, and P. Kim, “Observation of the fractional quantum hall effect in graphene,” *Nature*, vol. 462, no. 7270, pp. 196–199, 2009. Citado na página 16.
- [26] J. Voit, “Charge-spin separation and the spectral properties of luttinger liquids,” *The Hubbard Model: Its Physics and Mathematical Physics*, pp. 263–272, 1995. Citado na página 16.
- [27] O. Auslaender, H. Steinberg, A. Yacoby, . Y. Tserkovnyak, B. Halperin, K. Baldwin, L. Pfeiffer, and K. West, “Spin-charge separation and localization in one dimension,” *Science*, vol. 308, no. 5718, pp. 88–92, 2005. Citado na página 16.
- [28] Y. Jompol, C. Ford, J. Griffiths, I. Farrer, G. Jones, D. Anderson, D. Ritchie, T. Silk, and A. Schofield, “Probing spin-charge separation in a tomonaga-luttinger liquid,” *Science*, vol. 325, no. 5940, pp. 597–601, 2009. Citado na página 16.
- [29] M. Moreno, C. Ford, Y. Jin, J. Griffiths, I. Farrer, G. Jones, D. A. Ritchie, O. Tsyplatyev, and A. Schofield, “Nonlinear spectra of spinons and holons in short gaas quantum wires,” *Nature Communications*, vol. 7, no. 1, p. 12784, 2016. Citado na página 16.
- [30] R. Moessner and A. P. Ramirez, “Geometrical frustration,” *Physics Today*, vol. 59, pp. 24–29, 2 2006. Citado na página 17.
- [31] I. Gilbert, C. Nisoli, and P. Schiffer, “Frustration by design,” *Physics Today*, vol. 69, pp. 54–59, 7 2016. Citado na página 17.
- [32] M. Udagawa and L. Jaubert, *Spin Ice*. Springer, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 28.
- [33] P. A. M. Dirac, “Quantised singularities in the electromagnetic field,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, vol. 133, no. 821, pp. 60–72, 1931. Citado na página 21.
- [34] G. t Hooft, “Magnetic monopoles in unified theories,” *Nucl. Phys. B*, vol. 79, no. CERN-TH-1876, pp. 276–284, 1974. Citado na página 22.
- [35] A. M. Polyakov, “Particle spectrum in quantum field theory,” in *30 years of the Landau institute—selected papers*, pp. 540–541, World Scientific, 1996. Citado na página 22.
- [36] Y. Nambu, “Strings, monopoles, and gauge fields,” *Physical Review D*, vol. 10, no. 12, p. 4262, 1974. Citado na página 22.
- [37] R. Heras, “Dirac quantisation condition: a comprehensive review,” *Contemporary Physics*, 2018. Citado na página 23.

- [38] R. P. Cowburn, D. Koltsov, A. Adeyeye, M. Welland, and D. Tricker, "Single-domain circular nanomagnets," *Physical Review Letters*, vol. 83, no. 5, p. 1042, 1999. Citado na página [24](#).
- [39] R. P. Cowburn and M. E. Welland, "Phase transitions in planar magnetic nanostructures," *Applied physics letters*, vol. 72, no. 16, pp. 2041–2043, 1998. Citado na página [24](#).
- [40] M. E. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo methods in statistical physics*. Clarendon Press, 1999. Citado na página [24](#).
- [41] D. Landau and K. Binder, *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge university press, 2021. Citado na página [24](#).
- [42] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, "Equation of state calculations by fast computing machines," *The journal of chemical physics*, vol. 21, no. 6, pp. 1087–1092, 1953. Citado na página [25](#).
- [43] W. Giauque and J. Stout, "The entropy of water and the third law of thermodynamics. the heat capacity of ice from 15 to 273° k.," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 58, no. 7, pp. 1144–1150, 1936. Citado na página [27](#).
- [44] W. F. Giauque and M. F. Ashley, "Molecular rotation in ice at 10 k. free energy of formation and entropy of water," *Physical review*, vol. 43, no. 1, p. 81, 1933. Citado na página [27](#).
- [45] J. D. Bernal and R. H. Fowler, "A theory of water and ionic solution, with particular reference to hydrogen and hydroxyl ions," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 1, no. 8, pp. 515–548, 1933. Citado na página [27](#).
- [46] L. Pauling, "The structure and entropy of ice and of other crystals with some randomness of atomic arrangement," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 57, no. 12, pp. 2680–2684, 1935. Citado na página [28](#).
- [47] S. T. Bramwell and M. J. Gingras, "Spin ice state in frustrated magnetic pyrochlore materials," *Science*, vol. 294, no. 5546, pp. 1495–1501, 2001. Citado na página [29](#).
- [48] M. J. Harris, S. Bramwell, D. McMorrow, T. Zeiske, and K. Godfrey, "Geometrical frustration in the ferromagnetic pyrochlore $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$," *Physical Review Letters*, vol. 79, no. 13, p. 2554, 1997. Citado na página [29](#).
- [49] T. Fennell, O. Petrenko, B. Fåk, S. Bramwell, M. Enjalran, T. Yavors'kii, M. Gingras, R. Melko, and G. Balakrishnan, "Neutron scattering investigation of the spin ice state in $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$," *Physical Review B*, vol. 70, no. 13, p. 134408, 2004. Citado na página [29](#).

- [50] T. Fennell, O. Petrenko, B. Fåk, J. Gardner, S. Bramwell, and B. Ouladdiaf, “Neutron scattering studies of the spin ices $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ and $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ in applied magnetic field,” *Physical Review B*, vol. 72, no. 22, p. 224411, 2005. Citado na página 29.
- [51] S. R. Giblin, M. Twengström, L. Bovo, M. Ruminy, M. Bartkowiak, P. Manuel, J. Andresen, D. Prabhakaran, G. Balakrishnan, E. Pomjakushina, *et al.*, “Pauling entropy, metastability, and equilibrium in $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ spin ice,” *Physical review letters*, vol. 121, no. 6, p. 067202, 2018. Citado na página 29.
- [52] L. Balents, “Spin liquids in frustrated magnets,” *nature*, vol. 464, no. 7286, pp. 199–208, 2010. Citado na página 29.
- [53] A. P. Ramirez, A. Hayashi, R. J. Cava, R. Siddharthan, and B. Shastry, “Zero-point entropy in ‘spin ice’,” *Nature*, vol. 399, no. 6734, pp. 333–335, 1999. Citado na página 30.
- [54] . R. Wang, C. Nisoli, R. Freitas, J. Li, W. McConville, B. Cooley, M. Lund, N. Samarth, C. Leighton, V. Crespi, *et al.*, “Artificial ‘spin ice’ in a geometrically frustrated lattice of nanoscale ferromagnetic islands,” *Nature*, vol. 439, no. 7074, pp. 303–306, 2006. Citado na página 32.
- [55] J. P. Morgan, A. Stein, S. Langridge, and C. H. Marrows, “Thermal ground-state ordering and elementary excitations in artificial magnetic square ice,” *Nature Physics*, vol. 7, no. 1, pp. 75–79, 2011. Citado na página 34.
- [56] R. d. C. Silva, “Investigações de excitações magnéticas em gelos de spin bidimensionais,” 2012. Citado na página 35.
- [57] R. J. C. Lopes, “Análise da termodinâmica e da fenomenologia de gelos de spin artificiais em geometrias exóticas,” 2016. Citado na página 36.
- [58] G. Möller and R. Moessner, “Artificial square ice and related dipolar nanoarrays,” *Physical Review Letters*, vol. 96, no. 23, p. 237202, 2006. Citado na página 35.
- [59] L. Mól, W. Moura-Melo, and A. Pereira, “Conditions for free magnetic monopoles in nanoscale square arrays of dipolar spin ice,” *Physical Review B*, vol. 82, no. 5, p. 054434, 2010. Citado na página 35.
- [60] G. Möller and R. Moessner, “Magnetic multipole analysis of kagome and artificial spin-ice dipolar arrays,” *Physical Review B*, vol. 80, no. 14, p. 140409, 2009. Citado na página 35.
- [61] Y. Perrin, B. Canals, and N. Rougemaille, “Extensive degeneracy, coulomb phase and magnetic monopoles in artificial square ice,” *Nature*, vol. 540, no. 7633, pp. 410–413, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 38.

- [62] F. S. Nascimento, “Estudo das propriedades térmicas e magnéticas de gelos de spin retangulares,” 2014. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 38.
- [63] A. May, M. Hunt, A. Van Den Berg, A. Hejazi, and S. Ladak, “Realisation of a frustrated 3d magnetic nanowire lattice,” *Communications Physics*, vol. 2, no. 1, p. 13, 2019. Citado na página 38.
- [64] A. Farhan, M. Saccone, C. F. Petersen, S. Dhuey, K. Hofhuis, R. Mansell, R. V. Chopdekar, A. Scholl, T. Lippert, and S. Van Dijken, “Geometrical frustration and planar triangular antiferromagnetism in quasi-three-dimensional artificial spin architecture,” *Physical review letters*, vol. 125, no. 26, p. 267203, 2020. Citado na página 38.
- [65] F. S. Nascimento, A. R. Pereira, and W. A. Moura-Melo, “Bilayer artificial spin ice: Magnetic force switching and basic thermodynamics,” *Journal of Applied Physics*, vol. 129, no. 5, p. 053901, 2021. Citado 4 vezes nas páginas 38, 40, 45 e 47.
- [66] R. Begum Popy, J. Frank, and R. L. Stamps, “Magnetic field driven dynamics in twisted bilayer artificial spin ice at superlattice angles,” *Journal of Applied Physics*, vol. 132, no. 13, p. 133902, 2022. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 50.
- [67] R. B. Popy, “Investigation of the dynamics of twisted bilayer artificial spin ice,” Master’s thesis, 2022. Citado na página 41.

Apêndices

A Interação de troca

Considere dois elétrons com função de onda $\phi_1(\vec{r}_1)$ e $\phi_2(\vec{r}_2)$ e spin \vec{S}_1 e \vec{S}_2 , cada um em uma posição \vec{r}_1 e \vec{r}_2 . Por serem férmions, esses elétrons devem obedecer o princípio de exclusão de Pauli, o qual afirma que dois férmions não podem ocupar um mesmo estado quântico simultaneamente. Isso, por sua vez, nos diz que a função de onda total do nosso sistema deve ser antissimétrica. Considere que a função de onda completa desse sistema de elétrons seja

$$\Psi_{total} = \vec{S} \otimes \Phi, \quad (\text{A.1})$$

onde \vec{S} é a autofunção de spin para os dois elétrons e Φ é a autofunção de posição dos mesmos. Uma vez que essa função de onda deve ser antissimétrica, temos duas combinações possíveis:

- \vec{S} simétrica e Φ antissimétrica;
- \vec{S} antissimétrica e Φ simétrica.

Vejamos primeiro as possíveis combinações de spin. Temos, no total, quatro combinações possíveis:

$$\begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle, \\ |\uparrow\downarrow\rangle, \\ |\downarrow\uparrow\rangle, \\ |\downarrow\downarrow\rangle. \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

onde \uparrow representa spin up e \downarrow representa spin down. Com isso, podemos obter as seguintes funções de spin:

$$\vec{S}_S = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \\ |\downarrow\downarrow\rangle. \end{cases} \quad \vec{S}_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (\text{A.3})$$

Os casos onde a função de spin é simétrica representam os estados onde os spins estão alinhados e são chamados de estados *tripletos*. Já o caso onde a função de spin é antissimétrica representa o estado em que os spins estão antiparalelos e é chamado de estado *singleto*.

Tendo então visto as funções de spin, podemos agora analisar como devem ser as autofunções espaciais simétricas e antissimétricas:

$$\begin{aligned}\Phi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) + \phi_2(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2)], \\ \Phi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) - \phi_2(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2)].\end{aligned}\quad (\text{A.4})$$

Por fim, portanto a função de onda completa deve ser dada da seguinte forma:

$$\Psi_{total} = \begin{cases} \vec{S}_A \otimes \Phi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \\ \vec{S}_S \otimes \Phi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \end{cases}\quad (\text{A.5})$$

Em posse da função de onda desse sistema, podemos agora analisar como esses elétrons interagem entre si. A interação coulombiana é

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}},\quad (\text{A.6})$$

onde $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$. O valor médio pode então ser calculado fazendo

$$\langle U \rangle = \langle \Psi_{total} | U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \Psi_{total} \rangle.\quad (\text{A.7})$$

Uma vez que a interação independe dos spins, podemos reescrever a equação acima como

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int (\phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2) \pm \phi_2^*(\vec{r}_1)\phi_1^*(\vec{r}_2)) \frac{1}{r_{12}} (\phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2) \pm \phi_2^*(\vec{r}_1)\phi_1^*(\vec{r}_2)),\quad (\text{A.8})$$

onde o \pm se refere à função de onda espacial simétrica ou antissimétrica. Prosseguindo com essa integração, obtemos então

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\int \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2) \pm \int \phi_2^*(\vec{r}_1)\phi_1^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_2^*(\vec{r}_1)\phi_1^*(\vec{r}_2) \right].\quad (\text{A.9})$$

A primeira integral presente na equação (A.9), é exatamente a energia média de origem coulombiana do sistema de elétrons. Já a segunda integral é o que chamamos de *energia de troca*, que provém exatamente da imposição do princípio de exclusão de Pauli. Esse termo é exatamente o que distingue os estados tripleto do estado singleto, aumentando ou diminuindo a energia de interação do sistema, respectivamente. É interessante notar que, apesar da interação coulombiana não depender do arranjo de spins do sistema, a energia final apresenta uma dependência muito clara. Esse efeito só existe em sistemas quânticos, não possuindo nenhum análogo clássico. Portanto, podemos reescrever o valor médio da energia como

$$\langle U \rangle = E \pm J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2,\quad (\text{A.10})$$

onde \vec{S}_1 e \vec{S}_2 são as projeções dos momentos angulares de spin,

$$E = \int \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2),\quad (\text{A.11})$$

e

$$J = \int \phi_2^*(\vec{r}_1)\phi_1^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_2^*(\vec{r}_1)\phi_1^*(\vec{r}_2).\quad (\text{A.12})$$

Dessa forma, quando os spins estiverem alinhados paralelamente $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = 1$ e quando os mesmos estiverem alinhados antiparalelamente, teremos $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = -1$. Assim, encontramos portanto a hamiltoniana de Heisenberg como uma modificação da interação entre elétrons devido ao princípio de exclusão de Pauli.

B Momento magnético de um vértice do tipo T2

Para calcular o momento magnético de um vértice do tipo T2, consideramos um modelo de halter para cada nanoilha, com a mesma configuração do caso apresentado para o tipo T1. Fazendo esse tratamento, podemos notar que cada nanoilha contribui com uma carga do tipo $Q_a = \pm \frac{\mu}{a}$ ou $Q_a = \pm \frac{\mu}{b}$ para o centro do vértice, dependendo se a nanoilha está na horizontal ou na vertical, respectivamente.

Devido à geometria desse objeto, existirá um acúmulo de cargas positivas em um lado do vértice e um acúmulo de cargas negativas no lado diametralmente oposto do mesmo. Isso nos permite, então, considerar um "modelo de halter inverso", onde transformamos as duas cargas separadas por uma distância $d = \sqrt{a^2 + b^2}$ em um momento magnético \vec{m} da forma

$$\vec{m} = (Q_a + Q_b)d\hat{d}, \quad (\text{B.1})$$

onde \vec{d} é o vetor que liga um canto do vértice ao outro. Dessa forma, portanto, o momento magnético é

$$\vec{m} = \left(\frac{\mu}{a} + \frac{\mu}{b} \right) \sqrt{a^2 + b^2} \hat{d} = \mu \frac{a+b}{ab} \sqrt{a^2 + b^2} \hat{d}. \quad (\text{B.2})$$