VAGSON LUIZ DE CARVALHO SANTOS

MINIATURIZAÇÃO DE NANOMAGNETOS COM ESTADO DE VÓRTICE UTILIZANDO-SE FERROMAGNETOS TOROIDAIS

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

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2010

VAGSON LUIZ DE CARVALHO SANTOS

MINIATURIZAÇÃO DE NANOMAGNETOS COM ESTADO DE VÓRTICE UTILIZANDO-SE FERROMAGNETOS TOROIDAIS

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

APROVADA: 9 de setembro de 2010.

Prof. Afrânio Pereira Rodrigues
(Coorientador)

Prof. Flávio Garcia

Prof. Monica Pereira Bahiana

Prof. Pablo Zimmermann Coura

Prof. Winter Alexander de Moura Melo
(Orientador)

Aos meus dois queridos filhos: Giulia Heloísa e Pedro Galileu
e a minha amada esposa Josemeire Dourado Lima de Carvalho.

"Ver num grão de areia um mundo
numa flor um céu profundo
ter na mão a infinidade
num minuto a eternidade...!"
William Blake (1757 - 1827)

AGRADECIMENTOS

- À comissão orientadora, por tudo o que me ensinou e pelo incentivo.

- Aos meus filhos Pedro e Giulia, que me amaram sempre, mesmo com a distância de um pai que estava quase sempre em casa, entretando distante dela.

- A minha esposa Josemeire, que me acompanhou (com amores e desamores) durante um período de grandes dificuldades afetivas e profissionais. Essa conquista é nossa.

- A minha mãe, que me apoiou em todos os momentos de minha vida.

- Aos meus amigos de Senhor do Bonfim, que mesmo estando distantes, sei que estão torcendo por mim.

- Aos professores Sílvio e José Arnaldo, por tudo o que me ensinaram no período de nivelamento, sem o qual não teria segurança de seguir em frente no curso.

- Ao Departamento de Física da Universidade Federal de Viçosa, que me deu oportunidade de ingressar no curso de Pós-Graduação em Física Aplicada, mesmo com minha pouca formação formal na área.

- Aos professores e colegas da Física.

- À direção do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Baiano, Campus: Senhor do Bonfim, pela oportunidade e confiança.

- À Capes, pelo apoio financeiro.

Sumário

Lista de Figuras **vii**

Resumo **viii**

Abstract **ix**

1 Motivação para o desenvolvimento do trabalho **1**

2 Modelo teórico **14**

2.1 Breve introdução à teoria do magnetismo 14

2.2 Modelo para o cálculo da energia 20

2.3 Geometria do toro 22

2.4 Configurações magnéticas estudadas 25

3 Excitações topológicas de spins no toro **27**

4 Configurações de mínima energia em nanomagnetos toroidais **34**

4.1 Resultados analíticos 34

4.1.1 Energia de troca 34

4.1.2 Energia magnetostática 36

4.2 Resultados numéricos e discussões 38

4.3 Estabilidade do vórtice na presença de um campo magnético 43

5 Conclusões e perspectivas **47**

A Obtenção da equação (4.2) **49**

B Equação de Laplace em coordenadas toroidais **50**

C Avaliação da energia magnetostática: equações (4.3), (4.4) e (4.5) 53
C.1 Avaliação da eq. (4.3) 53
C.1.1 Avaliação das eqs. (4.4) e (4.5) 54

Referências Bibliográficas 55

Lista de Figuras

1.1 Imagem de uma suspensão de microdiscos magnéticos. 3
1.2 Conceito de destruição de células de câncer via magnetomecânica. . . . 3
1.3 Principais configurações encontradas em nanomagnetos circulares. . . . 4
1.4 Nanomagnetos produzidos experimentalmente. 7
1.5 Estados de polarização do vórtice em um nanodisco. 9
1.6 Representações de nanoestruturas de carbono (nanotubos e nanotoros). 11

2.1 Representação esquemática de tipos de materiais magnéticos. 17
2.2 Densidade de estados para elétrons com spin up e down. 19
2.3 Aparência de um toro embebido num espaço tridimensional. 23
2.4 Tipo mais comum de toro, o toro do tipo anel. 24
2.5 Algumas configurações magnéticas consideradas neste trabalho. 25

3.1 Gráfico da energia em função de R para o caso de um vórtice no toro. . 32

4.1 Energia de troca como uma função da razão, R/r. 35
4.2 Representação de um toroide oco. 37
4.3 Energia magnetostática dos estados ferromagéticos ao longo de z e xy. . 39
4.4 Ilustrações de configurações tipo cebola. 40
4.5 A energia total correspondente ao vórtice, cebola e DU_{xy} $(q = 1)$. . . . 41
4.6 Diagrama de estados para nanotoros magnéticos. 42
4.7 Diagramas de estado para um toroide oco. 42
4.8 Valores de campo magnético que desestabilizam o estado vórtice. 45
4.9 Energia do vórtice no nanotoro para $r = 1, 2, 5, 10$ e 20 nm. 45

B.1 Comportamento de algumas funções toroidais contra R/r. 51

Resumo

SANTOS, Vagson Luiz de Carvalho, D. Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2010. **Miniaturização de nanomagnetos com estado vórtice utilizando-se ferromagnetos toroidais**. Orientador: Winder Alexander de Moura Melo. Co-Orientadores: Afrânio Rodrigues Pereira e Daniel Heber Theodoro Franco.

O cálculo da energia associada às configurações de magnetização ferromagnética, vórtice e estado cebola são explicitamente computados para a geometria toroidal. A análise dos dados revela que o vórtice aparece como o estado mais provável, minimizando a energia total em todo toroide com raio interno $r \gtrsim 10\,\mathrm{nm}$, ou mesmo para raios internos menores, se garantirmos que $R/\ell_{ex} \gtrsim 1,5$ (R é o raio externo do toroide e ℓ_{ex} é o comprimento de troca). A possibilidade de obtermos nanomagnetos muito pequenos contendo um estado tipo vórtice deve ter importância em aplicações em lógica binária e/ou armazenamento de dados e em novos mecanismos de aplicações em terapias contra câncer.

Abstract

SANTOS, Vagson Luiz de Carvalho, D. Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2010. **Miniaturization of vortex-comprising system using ferromagnetic nanotori**. Adviser: Winder Alexander de Moura Melo. Co-Advisers: Afrânio Rodrigues Pereira and Daniel Heber Theodoro Franco.

The energetics associated to the ferromagnetic, vortex and onion-like magnetization configurations are explicitly computed in the toroidal geometry. The analysis reveals that the vortex appears to be the most prominent of such states, minimizing total energy in every torus with internal radius $r \gtrsim 10\,\mathrm{nm}$, or even in smaller ones provided that $R/\ell_{ex} \gtrsim 1.5$ (R is the torus external radius and ℓ_{ex} is the exchange length). This possibility of having very small nanomagnets comprising a vortex-type state, might have importance in higher density binary logic and/or storage and in novel mechanisms for cancer therapy applications.

Capítulo 1

Motivação para o desenvolvimento do trabalho

Há milhares de anos, a curiosidade humana nos levou à descoberta do magnetismo, e, por muitos séculos, o conhecimento das propriedades magnéticas dos materiais tem estimulado o progresso científico e tecnológico. Por um longo tempo o principal foco de pesquisa estava relacionado ao magnetismo macroscópico, isto é, às propriedades e aplicações em sistemas grandes, como as aplicações de magnetos em bússolas, geradores e motores elétricos, as quais se tornaram possíveis graças ao campo geomagnético e à habilidade de eletromagnetos e magnetos permanentes em realizar trabalho mecânico. O interesse em estudar os fenômenos magnéticos em escala atômica começou a partir do desenvolvimento da Mecânica Quântica, o que nos ajudou a compreender a interação de troca de origem quanto-mecânica, a interação com o campo cristalino e o acoplamento spin órbita relativístico. Tais fenômenos só foram descobertos na primeira metade do século passado, abrindo caminho para que eles fossem utilizados em aplicações práticas e tecnológicas na atualidade. Entretanto, apenas nas últimas décadas, ficou claro que o magnetismo em estado sólido é um fenômeno nanoestrutural. A importância científica e tecnológica de nanoestruturas magnéticas tem três razões principais [1]:

- Há uma grande variedade de estruturas com propriedades físicas interessantes, desde nanomagnetos que aparecem naturalmente na natureza até nanocompósitos relativamente fáceis de produzir para aplicações que demandam nanoestruturas artificiais.

- A utilização de efeitos de nanoescala na explicação das propriedades de materiais

magnéticos.

- O nanomagnetismo tem aberto caminho para tecnologias completamente novas.

Nesse contexto, o nanomagnetismo vem despertando grande interesse científico e tecnológico. Espera-se, dentre outras consequências, inúmeras possibilidades de aplicações utilizando nanoestruturas, bem como, do ponto de vista fundamental, uma melhor compreensão das propriedades elementares de materiais magnéticos estruturados nessa escala de tamanho. De fato, o avanço na tecnologia de fabricação de estruturas em escala micro e nanométrica abriu a possibilidade de estudar estruturas que se comportam como sistemas magnéticos quase unidimensionais, os quais exibem uma variedade de estados magnéticos interessantes, com possíveis aplicações em elementos eletrônicos. Como exemplo, podemos citar aplicações em memória lógica, armazenamento de dados e sensores de alta sensibilidade [2], mais especificamente, a melhoria na performance e capacidade de discos rígidos deverá demandar que sua própria estrutura venha a ser composta por arranjos de nanoelementos magnéticos [3, 4], os quais já têm sido considerados como constituintes de memória de computadores [5]. Tal interesse tem sido renovado e reforçado em virtude da recente proposta de utilizar microdiscos com vórtices magnéticos como estado fundamental (Fig. 1.1) em terapias anti-câncer [6]. Nesta proposta, há a indução de um atrito mecânico devido a oscilação dos microdiscos mediante um campo magnético aplicado com frequência de algumas dezenas de Hertz. Tal procedimento parece ativar certos canais de cálcio intracelular que desencadeia a programação da morte da célula (apoptose) (Fig. 1.2). Frequentemente, aplicações tecnológicas de nanomagnetos são baseadas em novos mecanismos magneto-eletônicos que demandam o controle de estados estáveis de magnetização, como domínios únicos, paredes de domínio, vórtices, etc. Além disso, esses magnetos são um excelente laboratório experimental para se estudar teoremas fundamentais em magnetostática e micromagnetismo [7, 8].

O comportamento dos materiais magnéticos depende não apenas de sua estrutura molecular, mas também da geometria e da competição entre as energias magnetostática, de troca e de anisotropia. Com relação a isso, um dos teoremas mais fundamentais sobre estruturas magnéticas é por conta devido a Brown [9, 10], o qual estabelece que por causa da competição entre a energia magnetostática e a de troca, a formação de multidomínios deveria ser suprimida para partículas muito pequenas, de forma que nanomagnetos se comportariam como uma estrutura com spin gigante.

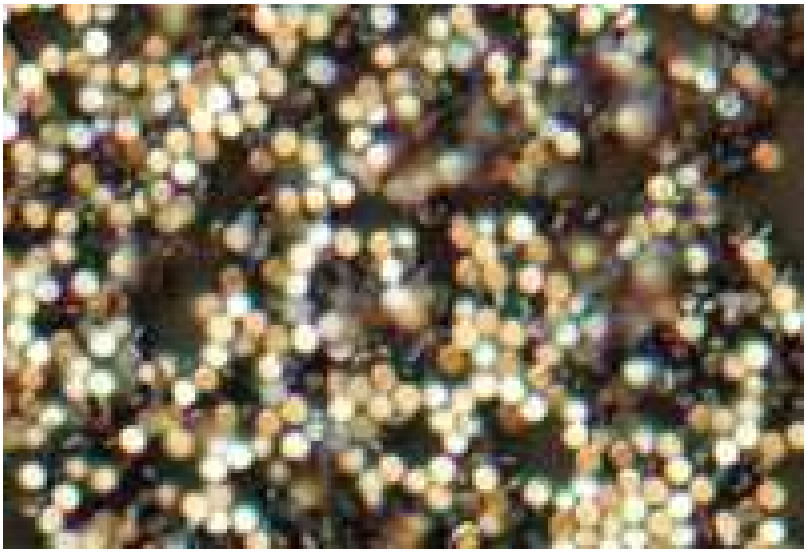

Figura 1.1: Imagem de microscópio óptico eletrônico de uma suspensão de microdiscos magnéticos de Permalloy utilizados em experimentos para tratamento de células cancerígenas. Os discos têm espessura da ordem de 60 nm e diâmetro $\sim 1\mu$m. A amostra foi preparada via magnetron sputtering e litografia ótica (retirado de [6]).

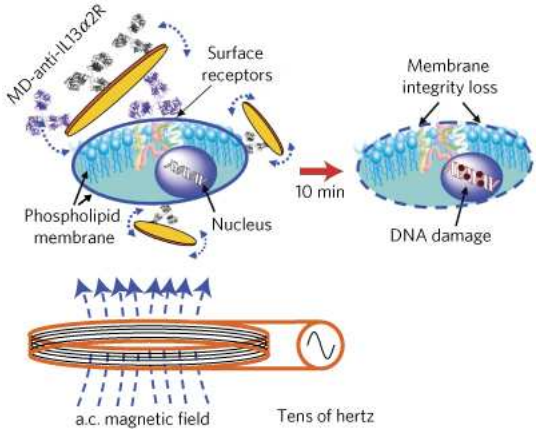

Figura 1.2: Conceito de destruição de células de câncer via processos magnetomecânicos. Os microdiscos são biofuncionalizados com anticorpo anti-humano-$IL13\alpha2R$, especificamente atingindo células de glioblastoma humano (uma forma agressiva de câncer de cérebro). Quando um campo magnético alternado é aplicado, os discos magnéticos oscilam, comprometendo a integridade da membrana e iniciando a morte celular programada.

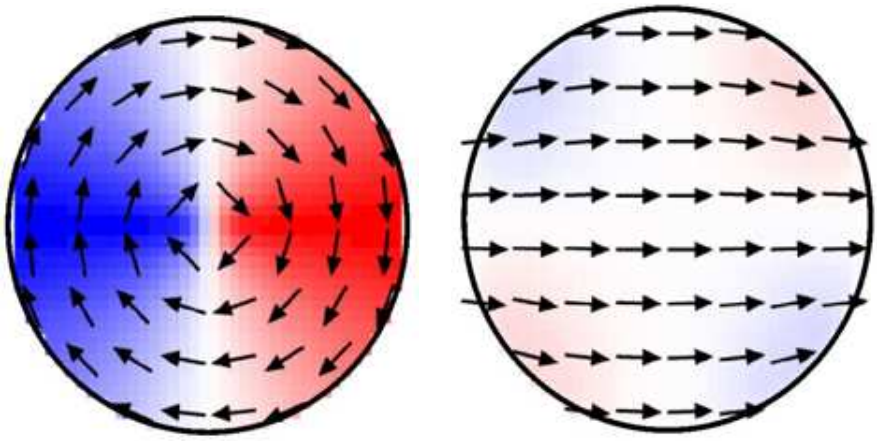

Figura 1.3: Principais configurações de magnetização encontradas em nanomagnetos circulares. A figura da esquerda mostra, esquematicamente, o estado de vórtice no nanodisco, ao passo que à direita, vemos uma representação do estado cebola no plano do disco, o qual consiste em uma configuração de domínio único com um pequeno desvio da direção paralela. O vórtice aparece em nanomagnetos suficientemente grandes (diâmetro da ordem de 90 nm em nanodiscos de Permalloy). Um outro estado possível consiste na configuração de domínio único perpendicular ao plano do disco quando a espessura t do mesmo é suficientemente grande ($t \approx 1,8R$ [18].)

Entre os possíveis estados magnéticos para nanomagnetos circulares, a maioria dos trabalhos dá atenção a três deles: a configuração vórtice, onde a magnetização forma uma estrutura de circulação de spins, sem pólos magnéticos; domínio único, o qual aparece em nanomagnetos alongados ou muito pequenos, sendo que os momentos magnéticos estão completamente alinhados; e o estado cebola, consistindo de um estado de domínio único com uma pequena não-uniformidade (momentos magnéticos não são paralelos entre si) na magnetização próxima às bordas do magneto (Fig. 1.3). O fato dessas três configurações serem as mais estudadas teoricamente se deve a sua aplicação tanto em trabalhos experimentais quanto em microsimulação. Tais trabalhos mostram que essas são as configurações que aparecem e se mantêm estáveis em nanomagnetos.

Inúmeros trabalhos têm se dedicado a determinar a configuração da magnetização que minimiza a energia em nanomagnetos. Dentre as diversas geometrias estudadas, as retangulares e cilíndricas são aquelas que têm recebido mais atenção, uma vez que sua simplicidade geométrica as torna de mais fácil fabricação e, eventualmente, permitem uma melhor comparação entre pesquisas teóricas e experimentais. Como

exemplo, podemos citar os trabalhos dedicados a estudar nanodiscos [11, 12], os quais apontam que a configuração vórtice se torna o estado de menor energia quando o raio do nanomagneto é maior do que um raio crítico R_C (da ordem de 45 nm para o Permalloy). Nos nanodiscos, o vórtice apresenta um núcleo, o qual se forma para evitar um aumento exacerbado da energia de troca. Dessa forma, por causa do alto custo tanto da energia magnetostática devido a cargas magnéticas superficiais quanto da energia de troca associada a tal estrutura, esse vórtice tende a se desestabilizar em nanodiscos com a redução de seu raio ou aumento da espessura [13]. Estudos experimentais mostram que nanodiscos circulares de cobalto (Co) e de Permalloy (Py)[1] (FeNi, na proporção aproximada de 20% de ferro e 80% de níquel), o vórtice é estável para diâmetros > 90 nm e espessura < 15 nm [13, 14].

A instabilidade do vórtice com a redução do raio também é uma característica de nanoanéis, os quais consistem em nanodiscos cilíndricos com um buraco central. Entretanto, a presença desse buraco impede a formação do núcleo, tornando o vórtice uma estrutura mais estável nessa geometria, fazendo com que o diâmetro crítico diminua para valores da ordem de 50 nm, com espessura crítica $\sim 5 - 6$ nm. Nanoanéis ideais devem ter não somente um raio interno e externo bem definidos, mas também uma espessura pequena o suficiente para tornar a configuração vórtice estável [15], uma vez que, com o aumento da espessura, a configuração ferromagnética na direção do eixo z, apontando perpendicularmente ao plano do anel, torna-se energeticamente favorável. Kravchuk *et al* [16] mostraram, em um estudo teórico detalhado que, quando o raio interno do nanoanel é suficientemente grande, não há o aparecimento de nenhuma componente fora do plano para o vórtice. No entanto, quando o valor desse raio interno decresce, atingindo um valor crítico, há o aparecimento de uma componente fora do plano, a qual não é perpendicular ao plano do anel. Quando o raio interno é zero, esta componente desenvolve seu valor máximo, sendo perpendicular ao plano do nanomagneto (ou seja, temos novamente um nanodisco sem buraco). Zhu *et al.* [15] produziram nanoanéis ferromagnéticos assimétricos (em que o buraco interno não é central, mas deslocado em direção à borda) e mostraram que assim como nanoanel simétricos, quando esses são muito grandes, o vórtice é o estado que minimiza a energia

[1] O Permalloy, Fe_xNi_{1-x}; com $x \sim 15 - 25\%$ é um dos materiais mais utilizados na indústria magnética. As propriedades magnéticas do Permalloy vêm da sua constituição química, uma vez que o Fe e o Ni são dois dos materiais que satisfazem ao critério de Stoner para o magnetismo, o qual será discutido mais adiante. Além disso, o Co, que também satisfaz ao critério de Stoner, é um material largamente utilizado devido a suas propriedades isotrópicas.

magnética [17]. Os autores mostraram ainda que na presença de um campo magnético externo, as propriedades de inversão da polaridade do núcleo do vórtice dependem da direção do campo magnético aplicado.

Beleggia *et al.* [18] obtiveram, a partir de um tratamento puramente teórico, o diagrama de fases para a configuração que minimiza a energia em função da razão entre os raios externo e interno e a espessura do nanoanel. O estado cebola foi considerado num trabalho posterior por Landeros *et al.* [19], no qual os autores propuseram um modelo teórico para essa configuração. Eles concluiram que, quando a configuração cebola é estável, o desvio da magnetização do estado de domínio único é muito pequeno, com uma modificação irrelevante no diagrama de fases obtido por Beleggia *et al.* [19, 20]. Ainda para o caso de nanoanéis, Zhang *et al.* [21] usaram o modelo de análise de escala para construir um diagrama de fases para nanoanéis e nanopartículas elípticas, obtendo diagramas de fases que concordam bem com aqueles obtidos experimentalmente, bem como, por outras técnicas numéricas.

Recentemente, a geometria esférica também tem sido considerada e seu diagrama de fases fora obtido por meio de cálculos analíticos e simulações micromagnéticas [22]. Assim como no caso de nanoanéis e nanodiscos, o vórtice torna-se um estado instável quando o raio da esfera é muito pequeno (da ordem de 35 nm para o Permalloy), tendo neste caso, o estado cebola como a configuração que minimiza energia. Além de nanomagnetos circulares receberem atenção, ela também tem sido dada a nanoestruturas retangulares, nas quais, em geral, o estado de Landau se faz presente como configuração fundamental [5, 23]. Na Fig. 1.4 vemos alguns exemplos de geometrias de nanomagnetos produzidos experimentalmente.

Sabe-se que a energia total de um magneto com magnetização arbitrária não é fácil de ser calculada, mesmo assumindo-se uma geometria simples e anisotropias muito pequenas. Com essas simplificações, restam apenas as contribuições da energia de troca e magnetostática a serem avaliadas [8, 24]. Em geral, a energia magnetostática é muito difícil de ser computada devido às interações entre dipolos, as quais são de longo alcance. Para configurações especiais, como vórtices ou estados alinhados, e/ou geometrias simples, como aquelas sem curvatura, por exemplo, planar ou cilíndrica, sua avaliação é simplificada e, algumas vezes, pode ser computada exatamente. Para situações mais gerais, as ferramentas disponíveis nos permitem apenas realizar aproximações, como por exemplo, tomar o magneto como um contínuo (tratamento analítico) e/ou avaliar numericamente para a energia [8]. Para os casos específicos de geometrias cilíndrica e quadrada, uma considerável quantidade de informação está

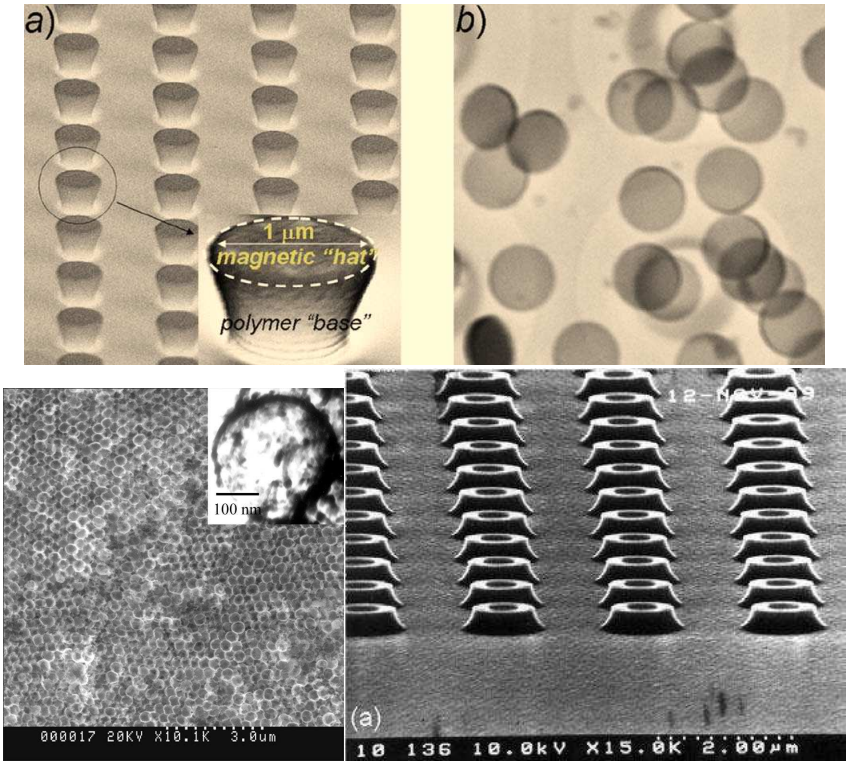

Figura 1.4: Nanomagnetos produzidos experimentalmente. Nas figuras acima, (a) e (b), pode-se ver nanodiscos magnéticos com diâmetro da ordem de 1 μm. Abaixo, a esquerda vemos nanoesferas com raio da ordem de 150 nm. À direita, um arranjo de nanoanéis com diâmetro da ordem de 2 μm, cada.

disponível e, os dados teóricos têm um bom acordo com aqueles obtidos experimentalmente [4]. No caso de outras geometrias, um conhecimento mais detalhado ainda está em desenvolvimento, embora alguns trabalhos explorando outras geometrias já venham sendo realizados com nanoesferas magnéticas [22], nanofios [25], nanotubos [26] e nanoanéis [27].

Quando pensamos em mecanismos magneto-eletrônicos baseados em estados tipo vórtice, como por exemplo aqueles para memória lógica ou armazenamento de dados, um assunto de grande importância está relacionado à miniaturização de cada nanomagneto e, consequentemente, de um arranjo contendo um grande número deles. Já que elementos de memória baseados em transistores têm atingido comprimentos abaixo da escala de 100 nm por elemento, mecanismos nanomagnéticos baseados em vórtices deveriam oferecer real potencialidade de suportar tais estados estáveis em escalas muito menores, isto é, em escalas no máximo em torno de $20 - 30$ nm. Dessa forma, existe um problema envolvendo nanodiscos produzidos com materiais de pequena anisotropia, onde a estabilidade do vórtice é perdida se o raio do disco atinge um valor menor que ~ 45 nm (valor para o disco de Permalloy com espessura de 10 nm) devido ao alto custo da energia de troca requerido pelo núcleo do vórtice [13]. Como foi dito anteriormente, para remediar essa situação parcialmente, introduz-se um buraco no centro do disco, obtendo assim um nanoanel, onde um estado vórtice deve ser estabilizado a tamanhos menores (raio externo ~ 20 nm, com raio interno e espessura em torno de 10 nm) [18]. Fisicamente, a presença do buraco torna desnecessária a formação do núcleo, diminuindo assim o custo da energia de troca consideravelmente e dando uma estabilidade extra, mesmo a escalas menores. Entretanto, com o desaparecimento do núcleo, perde-se imediatamente a polarização do vórtice, restando apenas a quiralidade (sentido de rotação de dipolos, horário ou anti-horário). Além disso, a dinâmica de dipolos na borda pode comprometer a estabilidade do vórtice devido a grandes flutuações de cargas magnéticas superficiais, $\sigma_{mag} = \vec{M} \cdot \hat{n}$, uma vez que nesses pontos o vetor normal $\hat{n}$ não é bem definido (em outras palavras, a curvatura diverge nas bordas do disco e do buraco). Tais flutuações devem ser evitadas de alguma forma, assim como seus efeitos minimizados. Por exemplo, se o buraco for muito grande, tal que a largura do nanoanel seja suficientemente pequena, isto é, menor que o tamanho de uma parede de domínio, em torno do comprimento de troca ($\ell_{\text{ex}} \sim 5 - 6$ nm, para Permalloy), garantimos que nenhum núcleo do vórtice pode ser formado no nanoanel [15].

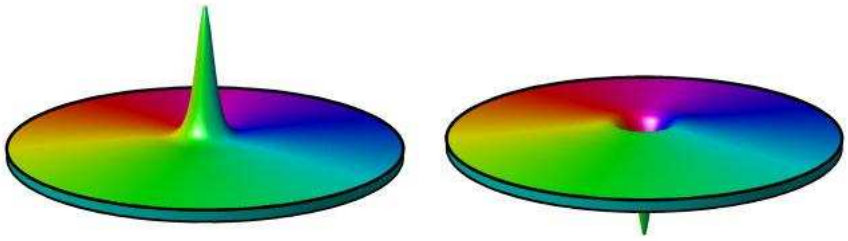

Figura 1.5: Estados de polarização do vórtice em um nanodisco, *up* e *down*. Podemos associar a cada um desses estados um "bit" de informação, por exemplo, 0 ou 1 conforme o dipolo no núcleo do vórtice esteja apontando para cima ou para baixo, respectivamente. Além da polarização, em nanodiscos há a possibilidade de controle da quiralidade do vórtice, deixando-nos assim, com um elemento magneto-eletrônico que poderia armazenar dois "bits" de informação. Em nanoanéis, a presença do buraco central impede a formação do núcleo, restando apenas a quiralidade para, por exemplo, ser usada como mecanismo de armazenamento de dados.

O problema teórico da minimização da energia magnética é conhecido como micromagnetismo [8, 10], o qual consiste numa aproximação teórica em que o material é descrito como um meio contínuo, o que implica que essa aproximação é válida apenas se as dimensões do magneto são muito grandes quando comparadas ao parâmetro de rede [8]. O estado magnético do sistema é definido pelo vetor magnetização, que é uma função da posição e seu valor é assumido como sendo aquele da magnetização de saturação $M_S(T)$ em todos os pontos. A fundamentação teórica do micromagnetismo se deve a Landau e Lifshitz [28] e poucas soluções analíticas são conhecidas a partir desse formalismo teórico devido a complexidade das equações envolvidas. Por causa dessa dificuldade, simulações micromagnéticas se tornaram uma importante ferramenta para investigar problemas relacionados com o estado que minimiza a energia total em nanomagnetos. Entre os programas públicos utilizados para realizar microsimulações resolvendo a equação de Landau-Lifshits-Gilbert, o código OOMMF [29] tem sido utilizado em uma grande quantidade de trabalhos. Outros exemplos de microssimuladores são Amumag [30], Simulmag [31], Magpar [32] e LLG [33] os quais têm sido utilizados para realizar simulações e determinar, por exemplo, o estado fundamental magnético para uma dada geometria. No entanto, tais microssimuladores não são úteis apenas em situações estáticas e também podem ser utilizados para estudar a dinâmica da magnetização em nanomagnetos.

Outra forma de descrever as propriedades magnéticas de nanoestruturas é a aproximação de escala, a qual consiste em um modelo de rede discreta de momentos magnéticos. Com o objetivo de avaliar a energia total do nanomagneto, é feita a proposição de uma mudança de escala para a energia de troca por um fator $x \leq 1$, ou seja, trocar J por xJ na expressão para a energia total. Nesse caso, a dimensão da espessura do magneto simulado para o qual o ponto triplo[2] ocorre passa a ser $t' = Ax^{\eta}$, onde $\eta \approx 0,55$ e $A = 91,1$ nm, enquanto o número de átomos no ponto triplo escala com x de acordo com a relação $N = N_0 x^{3\eta}$, com $N_0 \approx 6,5 \times 10^7$ [34, 35]. Em alguns trabalhos que utilizam essa técnica, pôde-se obter o diagrama de fases para sistemas com dimensões comparáveis àqueles estudados experimentalmente, cujo número de momentos atômicos é muito grande, fazendo com que simulações computacionais com a tecnologia atual se tornem proibitivas [34]. De fato, em nanomagnetos com dimensões comparáveis àquelas obtidas experimentalmente (por exemplo, nanodiscos cilíndricos com espessura $L \sim 15\,\text{nm}$ e raio $r \sim 100$ nm), teríamos um número N de moléculas da ordem de 10^8, e o tempo necessário para simulações computacionais aumenta consideravelmente com esse número.

Apesar da grande quantidade de trabalhos dedicados a estudar a estabilidade de diferentes configurações magnéticas, a geometria toroidal ainda permanece praticamente inexplorada, o que, parcialmente, deve estar associado ao fato de nanotoros magnéticos ainda não terem sido produzidos experimentalmente. Outro motivo pode ser o fato da geometria toroidal ser inerentemente curva, com curvatura variável ponto a ponto. No entanto, essa geometria tem recebido considerável atenção em outras áreas. Por exemplo, em armadilhas para condensados de Bose-Einstein, dentro dos quais os átomos desenvolvem comportamento quase unidimensional sujeitos a condições de contorno periódicas [36, 37]. Além disso, estruturas que se assemelham a nanotoros já foram produzidas através de um processo que envolve a redução de íons de prata conhecido como "electroless" [38]. Do ponto de vista da produção de nanomagnetos toroidais, a fabricação de nanotoros de carbono [39] trouxe a possibilidade da obtenção dessas estruturas, abrindo uma nova perspectiva nessa área, uma vez que pode haver a possibilidade de obter tais nanomagnetos via encapsulação de um material magnético dentro dos nanotoros de carbono, o que já fora obtido para nanotubos de carbono na Ref. [40]. Teoricamente, nanotoros de carbono podem ser formados pela junção de duas pontas de nanotubos de carbono convencionais [41]. Então, as-

[2]Ponto triplo é o ponto no qual as três configurações em estudo (vórtice, domínio único na direção z e cebola no plano) têm mesma energia.

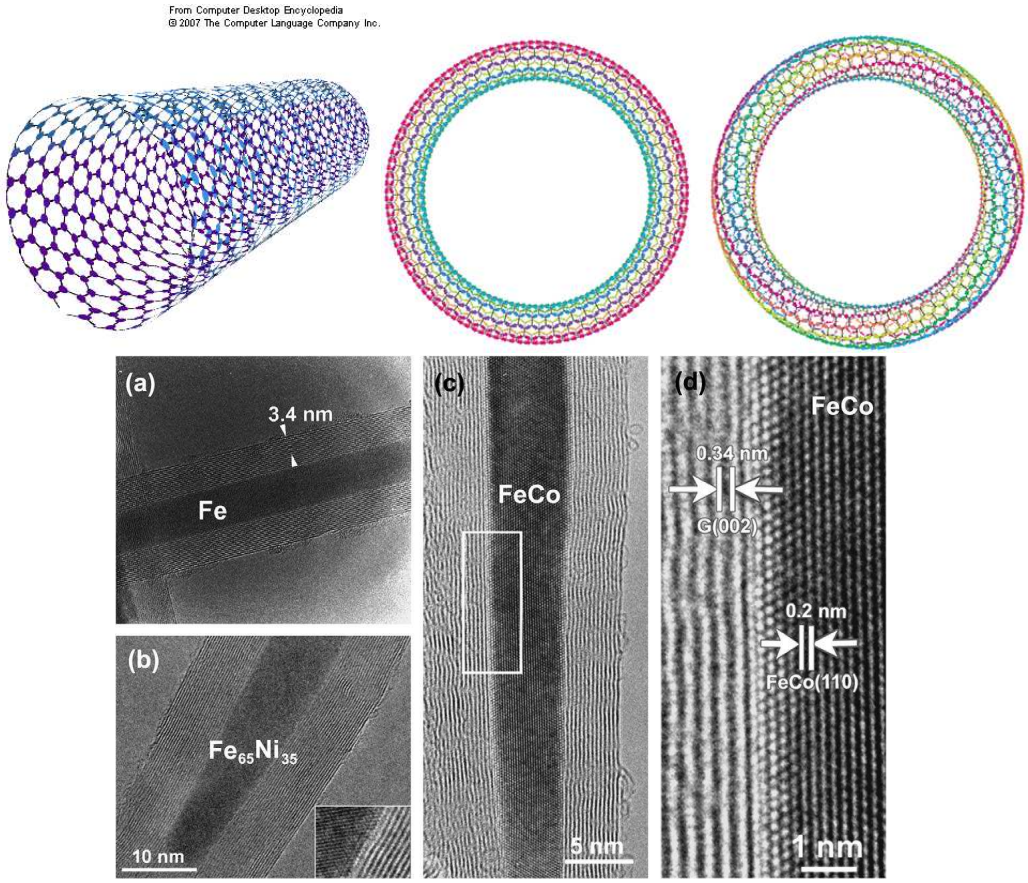

Figura 1.6: Acima, à esquerda, vemos uma representação de um nanotubo de carbono. No centro e à direita, observamos a representação de nanotoros construídos a partir de nanotubos condutores e semicondutores, respectivamente. Abaixo, observamos imagens de microscópio de tunelamento eletrônico de nanotubos de carbono com multicamadas (NCMC) preenchidos com diferentes tipos de nanofios ferromagnéticos, exibindo um alto grau de cristalinidade nas paredes do nanotubo. (a) Nanofio de Fe dentro de NCMC; (b) Imagem de um nanotubo de carbono preenchido co Permalloy; (c) e (d) Imagens de um nanofio de FeCo encapsulado por um nanotubo de carbono altamente cristalino; (d) Imagem mostrando uma amplificação de (c), onde o plano (110) FeCo pode ser visto ao longo da direção (111), e aparece paralelo à G (002), sugerindo uma direção preferencial de crescimento do nanofio dentro do tubo (retirado de [40]).

sim como uma estrutura nanotoroidal de carbono poderia ser utilizada como um vaso de contenção para aplicações em nanobiônica e nanobiométrica [42], a encapsulação de materiais magnéticos em nanotoros de carbono poderia ser realizada para aplicações em magneto-eletrônica, dentre outras possibilidades. É sabido que para nanotoros de carbono formados a partir de nanotubos metálicos pode ocorrer um fenômeno conhecido como paramagnetismo gigante a temperaturas próximo de 0 K, enquanto nanotoros formados a partir de nanotubos semicondutores exibem um diamagnetismo fraco [43]. No entanto, paramagnetismo gigante é um fenômeno que ocorre apenas a temperaturas muito baixas, o que implica que tanto os nanotoros metálicos quanto os semicondutores poderiam ser candidatos a encapsular materiais magnéticos sem uma grande mudança nas propriedades magnéticas do nanomagneto a temperaturas significativamente altas (temperatura ambiente). É importante notar que, além das propriedades condutoras do nanotoro de carbono, efeitos de curvatura e desordem influenciam no comportamento magnético dessas estruturas, no entanto, tais efeitos não são muito grandes e também só aparecem para baixas temperaturas [41, 44]. Outras possibilidades para a produção de nanotoros magnéticos poderia ser a encapsulação de um material magnético dentro de membranas biológicas que se assemelham a toros, as quais têm sido observadas, por exemplo, em um grande número de proteínas envolvidas no metabolismo de DNA [45]. Finalmente, nanotoros magnéticos poderiam ser obtidos encurvando-se nanofios magnéticos, cuja produção tem sido reportada em diversos trabalhos [46].

Além dos diversos trabalhos experimentais que são reportados, sistemas com a geometria toroidal têm sido, por sua vez, estudados teoricamente com o objetivo de entender algumas propriedades físicas nessa geometria. Por exemplo, a aproximação contínua do modelo de Heisenberg foi usada para obter a energia de excitações topológicas de spins (sólitons e vórtices) na superfície do toro [47, 48], bem como determinar a configuração de mínima energia para a magnetização no nanotoro [53, 54]. Além disso, o potencial eletrostático foi calculado para um condutor toroidal carregando uma corrente azimutal [49]. Tal potencial fora determinado também para se estudar fenômenos de absorção óptica em nanopartículas metálicas toroidais [50, 51]. Retornando a discussão dos nanotoros de carbono, cálculos teóricos baseados na minimização da energia livre podem determinar qual o diâmetro ótimo de toros construídos a partir de nanotubos de carbono de parede simples [52].

Dessa forma, propomos uma análise teórica para determinar a configuração dos estados estáveis em nanotoros ferromagnéticos. São consideradas três configurações para a magnetização: vórtice, domínio único na direção do eixo z e o estado cebola no

plano xy. A energia de cada um desses estados é determinada analiticamente em função dos raios externo R e interno r do toro. O estado fundamental é dado por aquele que minimiza a soma das contribuições da energia de troca e magnetostática para um dado par (r, R). Particularmente, verificamos que a configuração ferromagnética na direção do eixo z não tem estabilidade em nanomagnetos toroidais. Construimos um diagrama de fases mostrando o estado esperado em função de (R, r). Tal diagrama indica que o vórtice é uma configuração altamente estável nessa geometria para $r \gtrsim 10$ nm, implicando que, provavelmente, o estado cebola no plano não deverá aparecer em nanotoros produzidos experimentalmente com a tecnologia disponível atualmente. Uma vez que há dois estados equivalentes de vórtice associados com a quiralidade (sentido horário ou sentido anti-horário), temos a possibilidade de armazenar "bits" de informação associando-se 0 e 1 a tais estados, tornando essa estrutura muito interessante, inclusive do ponto de vista aplicado. De fato, como foi dito anteriormente, essa configuração tem sido proposta como candidata a armazenamento de dados em núcleos de memória e há trabalhos teóricos e experimentais investigando o mecanismo de inversão da quiralidade e polaridade de vórtices tanto em nanoanéis [55], quanto em nanodiscos cilíndricos [56]. Desse modo, o estudo das propriedades magnéticas de nanotoros ferromagnéticos pode vir a ser de grande relevância, uma vez que nanotoros apresentando o vórtice como estado fundamental podem ser produzidos, e o estudo do mecanismo de inversão da quiralidade do vórtice poderia trazer a possibilidade de um novo elemento magneto-eletrônico para armazenamento de dados. Além disso, a miniaturização de nanoelementos magnéticos com a configuração vórtice como estado fundamental cria a possibilidade de aplicações a nanobiologia, em especial, em terapias anti-câncer.

Capítulo 2

Modelo teórico

2.1 Breve introdução à teoria do magnetismo

A palavra magnetismo tem sua origem ligada ao nome de uma cidade da região da Turquia que era rica em minério de ferro, a Magnésia. A palavra surgiu durante a Antiguidade e está associada à capacidade que fragmentos de ferro têm de serem atraídos pela magnetita, um material encontrado na Natureza, de composição química Fe_3O_4. Os fenômenos magnéticos foram os primeiros a despertar a curiosidade do homem sobre o interior da matéria [57]. Os primeiros relatos de experiências com a magnetita são atribuídos aos gregos e datam de 800 a.C.

Apesar de ter sido descoberto muito cedo, o estudo do magnetismo só se tornou mais sistemático no século XVII, a partir de estudos realizados pelo médico inglês William Gilbert. O interesse inicial de Gilbert pelos fenômenos magnéticos deveu-se, em parte, às crenças de sua época, pois acreditava-se que como um ímã poderia interagir com alguns materiais, produziria também certos efeitos curativos no corpo humano [58]. No entanto, em seu livro *De Magnete Magneticisque Corporibus et de Magno Magnete Tellure (Sobre o ímã, os Corpos Magnéticos e o Grande ímã, a Terra)*, Gilbert só descreveu as propriedades magnéticas dos ímãs e apresentou sua teoria de que a Terra se apresenta como um grande ímã.

Durante mais de dois séculos a tentativa do homem em entender a natureza do magnetismo foi frustrada devido à complexidade desse fenômeno. Só com o advento da Mecânica Quântica pôde-se compreender e explicar a origem do magnetismo, bem como diversas propriedades e características do comportamento magnético dos materiais.

Atualmente, magnetismo é um tema de pesquisa extremamente fértil, atraindo

interesse de boa parte da comunidade científica, dentre estes, físicos, engenheiros, etc. Os principais objetivos da pesquisa que os cientistas têm nesse campo são a compreensão das origens microscópicas das propriedades magnéticas dos materiais, descoberta de novos materiais e fenômenos, o estudo das propriedades termodinâmicas e das excitações elementares dos materiais magnéticos, bem como o desenvolvimento de novas aplicações tecnológicas [59].

Existem três quantidades importantes para a descrição do magnetismo na matéria: o campo $\mathbf{H}$, o campo magnético $\mathbf{B}$ e a magnetização $\mathbf{M}$. No vácuo, o campo magnético é diretamente proporcional ao campo $\mathbf{H}$, ou seja,

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}, \tag{2.1}$$

onde a constante de proporcionalidade μ_0 é a permeabilidade magnética. As quantidades $\mathbf{B}$ e $\mathbf{H}$ estão relacionados somente com a densidade de corrente elétrica $\vec{J}$, e suas intensidades podem ser determinadas a partir da expressão de Biot-Savart (no regime não-relativístico: $v/c \ll 1$):

$$\mathbf{B}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{x}') \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} d^3x', \tag{2.2}$$

onde a integração é feita sobre toda a região da corrente.

Na presença de um meio magnético, o campo magnético não terá mais a forma simples da equação (2.2), pois o meio responde à presença do campo magnético com uma magnetização $\mathbf{M}$ que contribui tanto para $\mathbf{B}$ quanto para $\mathbf{H}$. Dessa forma, dentro de um meio material, $\mathbf{B}$ e $\mathbf{H}$ devem diferir em magnitude e direção devido a magnetização $\mathbf{M}$:

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}). \tag{2.3}$$

Se a magnetização é linearmente relacionada ao campo $\mathbf{H}$, o sólido é dito linear, isto é, $\mathbf{M} = \chi \mathbf{H}$, com χ sendo a suscetibilidade magnética. Nessa situação, existe uma relação linear entre $\mathbf{B}$ e $\mathbf{H}$:

$$\mathbf{B} = \mu_0(1 + \chi)\mathbf{H} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H}, \tag{2.4}$$

com $\mu_r = 1 + \chi$ sendo a permeabilidade relativa do material.

Microscopicamente, a explicação das propriedades magnéticas adquiridas por um corpo está associada à existência de elétrons que se movem em torno dos núcleos dos átomos, bem como ao momento angular intrínseco dos elétrons (*spin*). A magnetização surge do ordenamento dos momentos magnéticos atômicos, que aparecem em

átomos possuindo camadas eletrônicas incompletas. Ela é definida como a quantidade de momentos de dipolo magnéticos por unidade do volume do material:

$$\mathbf{M} = \lim_{\Delta V \to 0} \frac{1}{\Delta V} \sum_i \mu_i. \tag{2.5}$$

Podemos notar, a partir de uma análise da equação (2.5), que para haver magnetização é necessário que existam momentos de dipolo magnéticos μ_i e que estes, na média, apontem na mesma direção, o que ocorre se um campo magnético atuar no sistema e/ou a temperatura for suficientemente baixa. Experimentalmente, as curvas de $|\mathbf{M}|$ vs. $|\mathbf{H}|$ ou $|\mathbf{B}|$ vs. $|\mathbf{H}|$ trazem informações sobre a *dureza magnética* do material, sua anisotropia cristalina, o campo de coercisividade, a magnetização remanente, etc. [8, 24, 60]. Por outro lado, deve-se mencionar que qualquer material magneticamente ordenado deixa de sê-lo a uma temperatura suficientemente elevada, denominada temperatura crítica ou temperatura de Curie (T_c).

O momento de dipolo magnético de um átomo livre tem três fontes principais: o spin, com o qual os elétrons são dotados, seus momentos angulares orbitais, e a mudança no momento induzido por um campo magnético aplicado [8, 24, 61]. A relação entre o momento de dipolo magnético e o momento angular orbital $\mathbf{L}$ é dada por

$$\mu_\mathbf{l} = -g_l \frac{e\hbar}{2m}\mathbf{L}, \tag{2.6}$$

e, similarmente, entre o momento magnético intrínseco e o spin $\mathbf{S}$:

$$\mu_\mathbf{s} = -g_s \frac{e\hbar}{2m}\mathbf{S}. \tag{2.7}$$

Na equação (2.6), tem-se a relação com o momento angular, onde $g_l = 1$ é o fator g orbital. Ao passo que na equação (2.7), tem-se a relação com o momento angular intrínseco, e $g_s \approx 2$ é o fator g de spin. Momentos magnéticos interagem entre si e, como já foi dito, com campos magnéticos externos.

Em Mecânica Quântica o momento magnético $\vec{\mu}$ de um átomo está diretamente relacionado ao seu momento angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, seguindo a relação:

$$\mu = g\mu_B \left(\frac{\mathbf{J}}{\hbar}\right), \tag{2.8}$$

onde $\mu_B = e\hbar/2m$ é uma unidade usual de momento magnético, chamada *magneton de Bohr*, m é a massa do elétron e g é o *fator de Landé*, dado por:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \tag{2.9}$$

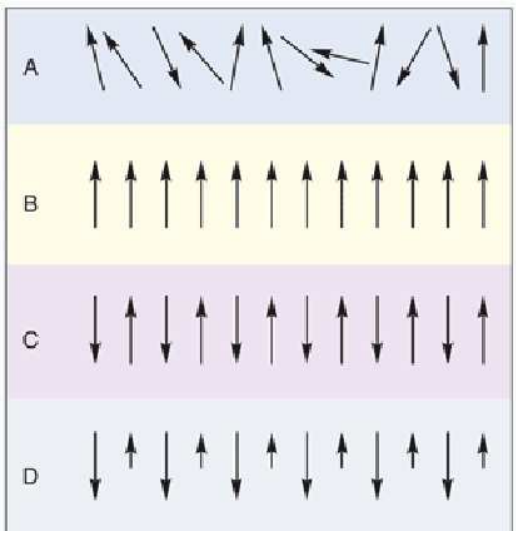

Figura 2.1: Representação esquemática de alguns tipos de materiais magnéticos existentes na natureza. A) Paramagnético; B) Ferromagnético; C) Antiferromagnético; D) Ferrimagnético.

Os materiais magnéticos podem ser classificados de acordo com sua resposta à aplicação de campos magnéticos, e tal resposta pode ser quantificada através da suscetibilidade magnética χ. Os tipos de materiais mais conhecidos são (Fig. 2.1):

- Diamagnéticos, cuja suscetibilidade tem valor pequeno e é negativa.
- Paramagnéticos, que são caracterizados por uma suscetibilidade positiva que varia linearmente com o inverso da temperatura.
- Ferromagnéticos, que têm uma ordem magnética espontânea abaixo de uma determinada temperatura crítica e também têm uma dependência linear de χ com $1/T$ acima dessa temperatura. Além disso, microscopicamente, o arranjo dos momentos magnéticos é paralelo e, macroscopicamente, obtemos $\vec{M} \neq 0$ para $T < T_C$.
- Ferrimagnéticos, que embora apresentem uma magnetização espontânea não são classificados como ferromagnetos, pois, ao contrário do ferromagnetismo, o arranjo dos momentos magnéticos em sítios vizinhos é antiparalelo. A magnetização espontânea decorre do fato da magnitude dos momentos antiparalelos serem diferentes, ou seja, a magnetização numa direção é maior do que na outra. De

qualquer modo, a temperaturas suficientemente altas eles perdem a "imantação", tornando-se paramagnéticos.

- Antiferromagnéticos, que se caracterizam pela ausência de magnetização espontânea, não devendo ser confundido, no entanto, com o caso paramagnético. A temperatura abaixo da qual um material paramagnético se torna atiferromagnético denomina-se temperatura de Néel (T_N).

Quando um campo magnético externo é aplicado sobre um material paramagnético, há o crescimento do número de elétrons que apontam na direção do campo, dando origem a uma magnetização diferente de zero para o material. Em nível atômico, o ferromagnetismo pode ser explicado pela presença de elétrons desemparelhados em uma das sub-bandas atômicas, que ocorre mesmo na ausência de um campo externo. Tal desemparelhamento pode ser explicado, aproximadamente, por uma teoria de campo médio, na qual os momentos atômicos são influenciados por um campo λM, o qual é causado por todos os outros elétrons. Por outro lado, o elétron é magnetizado por esse campo médio, aumentando assim, a resultante da magnetização, que, por sua vez, aumenta o campo médio, o qual influencia outros momentos magnéticos e assim sucessivamente. Tomando base no fato de que a natureza tenta minimizar a energia de um sistema, temos que olhar se é possível decrescer a energia de um sistema caso ele se torne ferromagnético sem a aplicação de um campo externo.

Essa situação pode ser idealizada se nós passarmos alguns elétrons com spin down para a sub-banda da superfície de Fermi na qual ficam os elétrons de spin up. Dessa forma, os elétrons com spin down com energias entre $E_F - \delta E$ e E_F devem integrar a banda de spin up com energias entre $E_F + \delta E$ e E_F (Ver Fig. 2.2). Nesse caso, o número de elétrons movidos é $\frac{1}{2}g(E_F)\delta E$ e o crescimento na energia cinética será então [24]:

$$\Delta E_{\text{cin}} = \frac{1}{2}g(E_F)(\delta E)^2. \tag{2.10}$$

Dessa forma, vemos que essa situação não parece favorável uma vez que há um crescimento de energia cinética. Entretanto, esse aumento pode ser compensado por um decréscimo na energia de troca da magnetização com o campo molecular. Ou seja, com a polarização espontânea, os números de elétrons up e down são dados, respectivamente, por:

$$n_\uparrow = \frac{1}{2}n + \frac{1}{2}g(E_F)\delta E \tag{2.11}$$

$$n_\downarrow = \frac{1}{2}n - \frac{1}{2}g(E_F)\delta E, \tag{2.12}$$

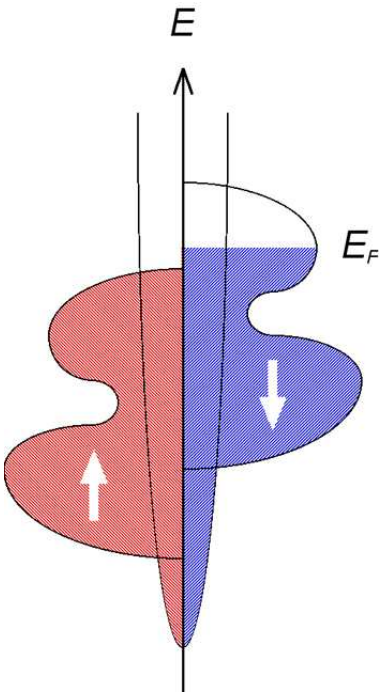

Figura 2.2: Densidade de estados para elétrons com spin up e down exibindo um deslocamento espontâneo de spin sem a aplicação de um campo magnético externo.

sendo n o número de elétrons no nível de Fermi no caso paramagnético. Como cada elétron carrega momento igual a 1 magneton de Bohr (μ_B), a magnetização pode ser escrita como:

$$M = \mu_B(n_\uparrow - n_\downarrow) \tag{2.13}$$

e a energia potencial ou energia de campo molecular é dada por:

$$\Delta E_{\text{pot}} = -\frac{1}{2}\mu_0 M \cdot \lambda M = -\frac{1}{2}\mu_0 \lambda M^2 = -\frac{1}{2}\mu_0 \mu_B^2 \lambda (n_\uparrow - n_\downarrow)^2. \tag{2.14}$$

Definindo $U = \mu_0 \mu_B^2 \lambda$, temos:

$$\Delta E_{\text{pot}} = -\frac{1}{2} U \cdot [g(E_F)\delta E]^2 \tag{2.15}$$

e a variação na energia total será de:

$$\Delta E = \Delta E_{\text{cin}} + \Delta E_{\text{pot}} = \frac{1}{2} g(E_F)(\delta E)^2 [1 - U \cdot g(E_F)]. \tag{2.16}$$

Dessa forma, a magnetização espontânea é dada para $\Delta E < 0$, ou seja:

$$U \cdot g(E_F) \geq 1, \tag{2.17}$$

o qual é chamado critério de Stoner para o ferromagnetismo. Entre os elementos químicos conhecidos, apenas o Fe, Co e Ni satisfazem a esse critério, sendo, dessa forma, ferromagnéticos.

2.2 Modelo para o cálculo da energia

Tendo sido dada uma breve explicação para o fenômeno ferromagnético nos materiais, discutiremos um pouco a respeito das contribuições de energia para sistemas magnéticos. Adotaremos aqui uma aproximação contínua, na qual a granulosidade atômica não é levada em conta e as dimensões consideradas são muito maiores do que o parâmetro de rede (distância intermolecular, $\sim 3\,\mathrm{A}^{\mathrm{o}}$, tipicamente). Nesse tipo de aproximação, o magneto é descrito em termos de uma função da posição no interior do objeto, o vetor magnetização, definido na Eq. (2.5). A função que define a magnetização é considerada como tendo o mesmo módulo em todos os pontos dentro do magneto (M_S), variando apenas sua direção. Nesse caso, a energia do magneto, na ausência de campo externo, é dada pela soma de três termos correspondentes às contribuições da energia magnetostática (E_{mag}), da energia de troca (E_{ex}) e de anisotropias (E_{ani}). A competição desses termos pode levar ao aparecimento de estruturas bem conhecidas em magnetismo, tais como paredes de domínio, configurações tipo vórtice, paredes de Neél, etc. Nesse tipo de aproximação, o estado fundamental da magnetização é determinado pela minimização da energia total. Neste trabalho, consideraremos que a anisotropia é muito pequena, podendo ser negligenciada no cômputo da energia total. Tal aproximação é razoável para nanomagnetos que apresentam uma orientação aleatória de sua estrutura cristalina, como o Permalloy (neste caso, dizemos que, macroscopicamente, o magneto é isotrópico). Dessa forma, a energia total de cada configuração magnética é dada por:

$$E_{\mathrm{tot}} = E_{\mathrm{ex}} + E_{\mathrm{mag}}. \tag{2.18}$$

A contribuição magnetostática para a energia é a interação da distribuição da magnetização com o campo criado pela própria distribuição, isto é, vem da interação dipolo-dipolo. O campo gerado por $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ pode ser definido diretamente a partir das equações de Maxwell. Quando não há densidade de corrente livre, $\mathbf{j} = 0$, temos $\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0$, o que implica que o campo magnetostático gerado por cargas volumétricas, $\rho = \nabla \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r})$, e superficiais, oriundas da componente de $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ normal à superfície, $\sigma = \mathbf{n} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r})$, pode ser escrito como o gradiente de uma função escalar arbitrária $\Phi(\mathbf{r})$

conhecida como potencial magnetostático, ou seja, $\mathbf{H}(\mathbf{r}) = -\nabla\Phi(\mathbf{r})$. Já da relação de Gauss, $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, onde $\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H} + \mathbf{M}$, concluimos que:

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = -\frac{1}{\mu_0}\nabla \cdot \mathbf{M} \Rightarrow \nabla^2\Phi = \frac{1}{\mu_0}\nabla \cdot \mathbf{M}. \tag{2.19}$$

Uma vez que estamos lidando com um magneto toroidal finito, temos que $\mathbf{M} = \mathbf{0}$ no espaço livre fora do objeto, então a Eq. (2.19) pode ser aí escrita como:

$$\nabla^2\Phi_{\text{out}} = 0, \tag{2.20}$$

que é a equação de Laplace. As condições de contorno são obtidas do fato de que no contorno do material a componente de $\mathbf{H}$ paralelo à superfície e a componente de $\mathbf{B}$ perpendicular à superfície são contínuas:

$$\begin{cases} \Phi_{\text{in}} = \Phi_{\text{out}} \\ \frac{\partial\Phi_{\text{in}}}{\partial n} - \frac{\partial\Phi_{\text{out}}}{\partial n} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{n} \end{cases} \tag{2.21}$$

onde $\mathbf{n}$ é o vetor normal à superfície. A solução formal para o conjunto de equações acima pode ser escrita na forma:

$$\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{M_S}{4\pi}\int_{V'}\frac{\nabla' \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}dv' + \frac{M_S}{4\pi}\int_{S'}\frac{\mathbf{n}' \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}da', \tag{2.22}$$

com $\mathbf{m} \equiv \mathbf{M}(\mathbf{r})/M_S$ e S (V) sendo a área (volume) do magneto. Uma vez que o potencial magnetostático foi determinado, a energia magnetostática é dada por:

$$E_{\text{mag}} = \frac{\mu_0 M_S}{2}\int_V \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \nabla\Phi(\mathbf{r})dv \geqslant 0. \tag{2.23}$$

A energia magnetostática é de natureza clássica e não local, de onde vemos que essa grandeza é obtida através da integração dupla sobre o mesmo volume, tornando esse termo para a energia diferente daquele referente à energia de troca os quais são locais, envolvendo uma integração no volume de uma densidade de energia. Esta propriedade está associada ao aspecto de longo alcance das forças de interação entre dipolos. Dessa forma, é muito difícil calcular a energia magnetostática para uma geometria arbitrária. Para uma discussão mais completa acerca da energia magnetostática, reportamos o leitor às Refs. [8, 24].

O outro termo que será levado em conta para determinar a energia total do nanotoro magnético é a energia de troca, que é de curto alcance e de natureza local. Sua origem não tem análogo clássico e vem da sobreposição de funções de onda em Mecânica Quântica. Numa aproximação contínua, onde o vetor magnetização varia

lentamente na escala do parâmetro de rede, ela pode ser escrita em termos dos ângulos entre momentos magnéticos vizinhos e espera-se que estes sejam sempre pequenos, uma vez que a curtas distâncias, as forças de troca são muito intensas. Dessa forma, temos que, para pequenos ângulos, a energia de troca pode ser escrita, a partir do modelo de Heisenberg, como:

$$E_{\mathrm{ex_{disc}}} = -J \sum_{\mathrm{ij}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -JS^2 \sum_{\mathrm{ij}} \cos\phi_{i,j} \approx JS^2 \sum_{\mathrm{ij}} \phi_{i,j}^2, \tag{2.24}$$

onde J é a constante de troca do material e $\mathbf{S}$ é o vetor (no espaço interno) de spin. Na Equação acima, foi feita a subtração do termo que conta para a energia na qual todos os spins estão alinhados, o qual é o estado fundamental (de troca) ou estado ferromagnético. Para ângulos muito pequenos, e após alguma manipulação algébrica [8], temos que o modelo de Heisenberg acima descrito nos leva a aproximação contínua, o qual, tanto no volume do magneto quanto nas variáveis de magnetização/spin toma a forma do modelo σ-não linear:

$$E_{\mathrm{ex}} = A \int_v \left[\left(\vec{\nabla} m_x\right)^2 + \left(\vec{\nabla} m_y\right)^2 + \left(\vec{\nabla} m_z\right)^2 \right] dv. \tag{2.25}$$

onde $A = \frac{2JS^2}{a}c$, com a sendo o parâmetro de rede do material e $c = 1, 2$ ou 4 para uma rede cúbica simples, cúbica de corpo centrado ou cúbica de face centrada, respectivamente. Conforme $A < 0$ ou $A > 0$, a equação acima descreve um sistema ferro ou antiferromagnético, respectivamente. Aqui, $\vec{m} = (m_x, m_y, m_z)$ é o vetor de spin clássico (supostamente descrevendo a magnetização unitária, $\vec{m} = \vec{M}/M_S$) valorado numa esfera unitária (espaço interno). Para a maioria dos casos de interesse prático, a Eq. (2.25) pode ser tomada como uma boa aproximação. A constante A é tomada então como um dos parâmetros físicos do material, cujo valor é obtido para ajustar os resultados da teoria àqueles obtidos experimentalmente.

2.3 Geometria do toro

Nosso objetivo é estudar o modelo descrito acima na geometria do toro, a qual consiste numa superfície curva com uma variação suave em sua curvatura. O toro mais simples é aquele possuindo um buraco e, no espaço tridimensional, se assemelha a uma rosquinha (veja Fig.2.3). Dependendo dos tamanhos relativos de R (raio externo) e r (raio interno), existem três tipos de toro conhecidos como padrões. O caso $R > r$

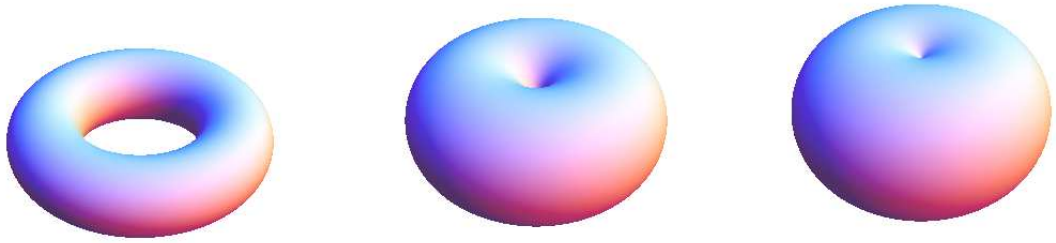

Figura 2.3: Aparência de um toro embebido num espaço tridimensional. Olhando da esquerda para a direita, vemos o toro do tipo anel, o *horn torus* e o toro com auto interseção no eixo z.

corresponde ao toro do tipo anel, $R = r$ corresponde a um *horn torus*[1] o qual é tangente a si mesmo no ponto $(0, 0, 0)$, e $R < r$ corresponde a um toro com auto-interseção no eixo z (ilustrações são apresentadas na Fig. 2.3). Aqui consideraremos apenas o caso do toro do tipo anel, uma vez que este é o mais factível do ponto de vista físico (Ver Fig. 2.4).

Dentre os inúmeros sistemas de coordenadas possíveis, dois deles são mais convenientes para descrever o toro no espaço: coordenadas tipo-esféricas, nas quais as equações paramétricas para um ponto $\vec{r}$ localizado no toro são:

$$x = (R + r\text{sen}\theta)\cos\phi, \quad y = (R + r\text{sen}\theta)\text{sen}\phi \quad \text{e} \qquad z = r\cos\theta \tag{2.26}$$

onde $r \in [0, a]$, $\theta \in [0, 2\pi]$ e $\phi \in [0, 2\pi]$. O operador gradiente e o elemento de volume nesse sistema de coordenadas são facilmente calculados. Esse sistema de coordenadas é representado na Fig. 2.4.

O outro sistema conveniente é conhecido como sistema de coordenadas toroidal, (α, β, φ). Tal sistema de coordenadas é obtido pela rotação do sistema de coordenadas bipolar bidimensional sobre um eixo separando seus focos e é definido por:

$$x = b\frac{\text{senh}\alpha\cos\varphi}{\cosh\alpha - \cos\beta}, \quad y = b\frac{\text{senh}\alpha\text{sen}\varphi}{\cosh\alpha - \cos\beta}, \quad z = b\frac{\text{sen}\beta}{\cosh\alpha - \cos\beta}, \tag{2.27}$$

onde b é uma constante que dá o raio de um círculo no plano $z = 0$, descrito por $\alpha \to \infty$ (isto é, quando $\alpha \to \infty$ nós obtemos $x = b\cos\varphi$, $y = b\text{sen}\varphi$ e $z = 0$). Os

[1] A tradução para o português da palavra *horn* é chifre, dessa forma, manteremos a nomenclatura em inglês para o *horn torus*.

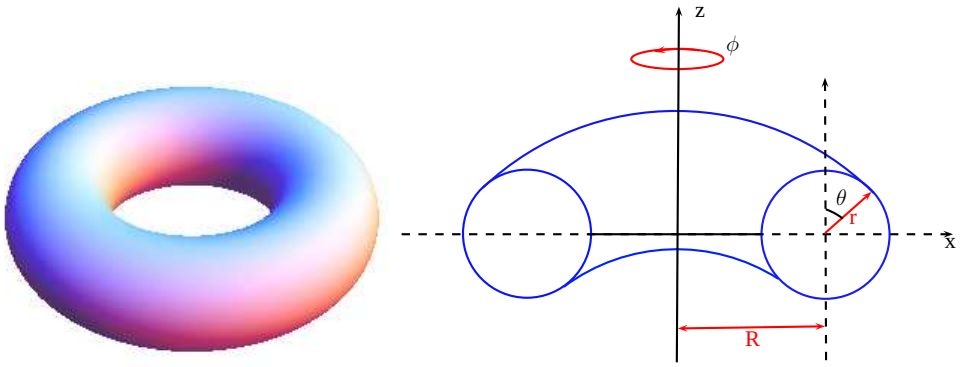

Figura 2.4: Tipo mais comum de toro, o toro do tipo anel, e um possível sistema de coordenadas sobre ele, $(\theta, \phi) \in [0, 2\pi]$. Os parâmetros r e R são os raios interno e externo do toro, respectivamente.

valores assumidos pelas variáveis no sistema de coordenadas toroidal são $0 \leqslant \alpha < \infty$, $0 \leqslant \beta \leqslant 2\pi$ e $0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi$. em termos de R e r, temos que, na superfície do toro:

$$b = \sqrt{(R+r)(R-r)}, \quad \cosh\alpha_0 = \frac{R}{r}, \tag{2.28}$$

o que permite a interpretação de b e α_0 como *raio geométrico* e o *ângulo excêntrico*, respectivamente (veja [48, 54] e referências citadas neles). Em contrapartida, temos que $R = b\tanh\alpha$ e $r = b\text{senh}\alpha$, bem como $\phi = \varphi$.

Algumas relações nesse sistema de coordenadas que serão importantes na discussão desse trabalho são aquelas entre vetores unitários Cartesianos $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ e vetores unitários toroidais $(\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\varphi})$:

$$\hat{\alpha} = \frac{1 - \cosh\alpha\cos\beta}{\cosh\alpha - \cos\beta}\mathbf{R} - \frac{\text{senh}\alpha\text{sen}\beta}{\cosh\alpha - \cos\beta}\mathbf{z}, \tag{2.29}$$

$$\hat{\beta} = -\frac{\text{senh}\alpha\text{sen}\beta}{\cosh\alpha - \cos\beta}\mathbf{R} - \frac{1 - \cosh\alpha\cos\beta}{\cosh\alpha - \cos\beta}\mathbf{z}, \tag{2.30}$$

$$\hat{\varphi} = (-\mathbf{x}\text{sen}\varphi + \mathbf{y}\cos\varphi), \tag{2.31}$$

onde $\mathbf{R} = \mathbf{x}\cos\varphi + \mathbf{y}\text{sen}\varphi$. Uma simples substituição de valores de φ e β mostra que $\hat{\alpha}$ é um vetor unitário perpendicular à superfície e apontando para o interior do toro. Dessa forma, assumiremos que $\mathbf{n} = -\hat{\alpha}$ é o vetor normal à superfície. Ao contrário do primeiro sistema de coordenadas, o operador gradiente aqui não é tão facilmente obtido, e lê-se:

$$\nabla = \frac{\cosh\alpha - \cos\beta}{b}\left(\hat{\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha} + \hat{\beta}\frac{\partial}{\partial\beta} + \frac{\hat{\varphi}}{\text{senh}\alpha}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \tag{2.32}$$

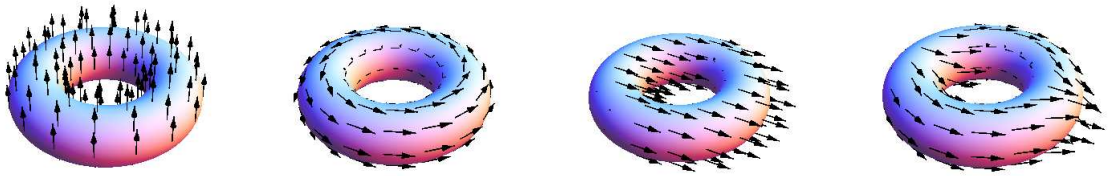

Figura 2.5: Algumas configurações consideradas neste trabalho. Da esquerda para a direita, podem-se ver as configurações de domínio único (ao longo da direção z), o vórtice, ferromagnético e cebola (com $q = 7$; ver o texto para maiores detalhes), respectivamente (as últimas três, com os dipolos ao longo do plano xy).

Finalmente, o do elemento de volume é dado por:

$$dv = \frac{b^3 \text{senh}\alpha}{(\cosh\alpha - \cos\beta)^3} d\alpha d\beta d\varphi. \tag{2.33}$$

2.4 Configurações magnéticas estudadas

Aqui, queremos determinar e comparar a energia de três diferentes configurações para o vetor de magnetização: o estado vórtice ($\mathcal{V}$), o estado ferromagnético (domínio único) na direção do eixo z ($\mathcal{F}_z$) e o estado cebola ($\mathcal{O}$) no plano xy (ver Fig. 2.5). No intuito de continuar nossos cálculos, é necessário especificar a função $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ referente a cada uma dessas configurações. Para o caso ferromagnético na direção do eixo z, temos $\mathbf{m}_{\mathcal{F}_z} = \mathbf{z}$, enquanto a configuração de domínio único na direção do plano xy é um caso especial do estado cebola e pode ser dado por $\mathbf{m}_{\mathcal{F}_{xy}} = \mathbf{x}$. O estado vórtice é representado por $\mathbf{m}_{\mathcal{V}} = \hat{\varphi}$, onde $\hat{\varphi}$ é o vetor azimutal unitário no plano xy. Finalmente, a configuração cebola será dada pelo modelo proposto por Landeros *et al* [19], onde o vetor de magnetização é descrito por:

$$\mathbf{m}_{\mathcal{O}} = m_r(\varphi)\mathbf{R} + m_\varphi(\varphi)\hat{\varphi}, \tag{2.34}$$

onde as expressões para as componentes reduzidas m_r e m_φ da magnetização são:

$$m_r(\varphi) = \begin{cases} f(\varphi), & 0 < \varphi < \pi/2 \\ -f(\pi - \varphi), & \pi/2 < \varphi < \pi \\ -f(\varphi - \pi), & \pi < \varphi < 3\pi/2 \\ f(2\pi - \varphi), & 3\pi/2 < \varphi < 2\pi \end{cases} \tag{2.35}$$

e

$$m_\varphi(\varphi) = \begin{cases} -\sqrt{1-f^2(\varphi)}, & 0 < \varphi < \pi/2 \\ -\sqrt{1-f^2(\pi-\varphi)}, & \pi/2 < \varphi < \pi \\ \sqrt{1-f^2(\varphi-\pi)}, & \pi < \varphi < 3\pi/2 \\ \sqrt{1-f^2(2\pi-\varphi)}, & 3\pi/2 < \varphi < 2\pi, \end{cases} \tag{2.36}$$

onde f é uma função limitada tal que $-1 \leq f(\varphi) \leq 1$. Na Ref. ([19]) foi sugerido que a função f pode ser da forma:

$$f(q, \varphi) = \cos^q \varphi, \tag{2.37}$$

onde $q \geq 1 \in \mathcal{R}$. O valor de q deve ser escolhido de forma que a energia da configuração para cada par (r, R) é minimizado, o que acontece quando $\partial E/\partial q = 0$. O modelo acima permite uma transição contínua da configuração de domínio único na direção do plano xy $(q = 1)$ para o estado cebola $(q > 1)$. O desvio do caso ferromagnético se torna mais pronunciado à medida que o valor de q aumenta. Este modelo foi utilizado previamente para determinar a energia do estado fundamental no nanoanel [19] e na nanoesfera [22]. Apesar da configuração cebola ser o estado real de magnetização, já foi demonstrado, para o caso de nanoanéis [18, 19] e nanoesferas [22], que o desvio da direção paralela (configuração de domínio único) é muito pequeno, isto é, $q \approx 1$ dentro dos limites nos quais a configuração cebola é estável, de forma que, nesses casos, pode-se tomar o estado ferromagnético no plano para realizar a análise do problema de minimização de energia nessas geometrias, tornando essa tarefa mais fácil de ser realizada.

Capítulo 3

Excitações topológicas de spins no toro

Nesta seção, estudaremos excitações de caráter topológico da energia de troca na superfície do toro, isto é, estaremos analisando o modelo de Heisenberg em duas dimensões. Na seção anterior, mostramos que, numa aproximação contínua, a energia de troca de um magneto pode ser determinada a partir do limite contínuo do modelo de Heisenberg, Eq. (2.25). No entanto, partindo do ponto de vista de teoria de campos aplicada a um espaço curvo, tal termo de energia pode ser escrito de uma forma ligeiramente diferente, no intuito de mostrarmos que o vórtice aparece como uma das excitações sobre o estado fundamental da energia de troca, isto é, o estado ferromagnético. Dessa forma, podemos tomar a Eq. (2.25) e reescrevê-la, em duas dimensões, no formalismo de teoria de campos, como a Hamiltoniana:

$$\mathcal{H}_1 = J \int\int \sum_{i,j=1}^{2} \sum_{a,b=1}^{3} g^{ij} h_{ab} \left(\frac{\partial S^a}{\partial \eta_i}\right)\left(\frac{\partial S^b}{\partial \eta_j}\right) \sqrt{|g|} d\eta_1 d\eta_2, \tag{3.1}$$

onde η_1 e η_2 são as coordenadas curvilíneas da superfície, além disso,

$$\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z) \equiv (\text{sen}\Theta\cos\Phi, \text{sen}\Theta\text{sen}\Phi, \cos\Theta)$$

é o campo vetorial de spin clássico avaliado numa esfera unitária (espaço interno), logo $\Theta = \Theta(\eta_1, \eta_2)$ e $\Phi = \Phi(\eta_1, \eta_2)$, g^{ij} e h_{ab} são elementos da métrica do espaço físico e do espaço interno (esfera de spins), respectivamente e $\sqrt{|g|} = \sqrt{|det[g_{ij}]|}$. Quando aplicamos o modelo acima ao sistema de coordenadas dado pela equação (2.26), usando os elementos da métrica referentes a tal sistema e parametrizando o espaço interno em

coordenadas cartesianas, de forma que $h_{ab} = \delta_{ab}$, a Hamiltoniana (3.1) toma a forma:

$$\mathcal{H} = J\int_{-\pi}^{\pi}\int_{0}^{2\pi}\Bigg\{\frac{r}{R+r\text{sen}\theta}\Bigg[\left(\frac{\partial S^x}{\partial\phi}\right)^2+\left(\frac{\partial S^y}{\partial\phi}\right)^2+\left(\frac{\partial S^z}{\partial\phi}\right)^2\Bigg]+$$

$$+\frac{R+r\text{sen}\theta}{r}\Bigg[\left(\frac{\partial S^x}{\partial\theta}\right)^2+\left(\frac{\partial S^y}{\partial\theta}\right)^2+\left(\frac{\partial S^z}{\partial\theta}\right)^2\Bigg]\Bigg\}d\phi d\theta. \tag{3.2}$$

Tomando agora a representação de $\mathbf{S}$ em termos de Θ e Φ (coordenadas esféricas), obtemos:

$$\mathcal{H} = J\int_{-\pi}^{\pi}\int_{0}^{2\pi}\Bigg\{\frac{r}{R+r\text{sen}\theta}\left[(\partial_\phi\Theta)^2+\text{sen}^2\Theta\,(\partial_\phi\Phi)^2\right]+$$

$$+\frac{R+r\text{sen}\theta}{r}\left[(\partial_\theta\Theta)^2+\text{sen}^2\Theta\,(\partial_\theta\Phi)^2\right]\Bigg\}d\phi d\theta, \tag{3.3}$$

onde adotamos $\partial_\theta \equiv \frac{\partial}{\partial\theta}$ e $\partial_\phi \equiv \frac{\partial}{\partial\phi}$.

Agora, podemos determinar as equações de movimento referentes a (3.3). Essas expressões são obtidas a partir do desenvolvimento da equação de *Euler-Lagrange* para campos. Adotaremos aqui a forma como ela é definida na referência [62], ou seja,

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi}-\frac{\partial}{\partial x^\mu}\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\varphi)}\right]=0, \tag{3.4}$$

Aqui, $x^\mu = (x^1, x^2) = (\phi, \theta)$ e adotamos a convenção de Einstein na qual índices repetidos (um covariante e outro contravariante) representam somas.

Como estamos procurando por soluções estáticas, o papel desempenhado por $\mathcal{L}$ em (3.4) é assumido pela densidade da Hamiltoniana, h, porém com sinal negativo, ou seja:

$$\mathcal{H} = \sum \pi(\mathbf{q},\dot{\mathbf{q}})\dot{\mathbf{q}} - \mathcal{L} \Rightarrow \mathcal{H} = -\mathcal{L},$$

onde $\mathbf{q}$, $\pi(\mathbf{q},\dot{\mathbf{q}})$, $\mathcal{H}$ e $\mathcal{L}$ são, respectivamente, a coordenada canônica, o momento conjugado, a Hamiltoniana e a Lagrangiana do sistema. A densidade da Hamiltoniana para o nosso caso é dada por:

$$h = \Bigg\{\frac{r}{R+r\text{sen}\theta}\left[(\partial_\phi\Theta)^2+\text{sen}^2\Theta\,(\partial_\phi\Phi)^2\right]+$$

$$+\frac{R+r\text{sen}\theta}{r}\left[(\partial_\theta\Theta)^2+\text{sen}^2\Theta\,(\partial_\theta\Phi)^2\right]\Bigg\}. \tag{3.5}$$

Então, tomando as equações (3.4) e (3.5), temos que:

$$\frac{\partial h}{\partial \Theta} - \frac{\partial}{\partial \phi}\left[\frac{\partial h}{\partial(\partial_\phi \Theta)}\right] - \frac{\partial}{\partial \theta}\left[\frac{\partial h}{\partial(\partial_\theta \Theta)}\right] = 0. \tag{3.6}$$

Logo, realizando as devidas operações, chegamos à seguinte relação:

$$\mathrm{sen}\Theta\cos\Theta\left\{\frac{r}{R+r\mathrm{sen}\theta}\left[(\partial_\phi\Phi)^2\right] + \frac{R+r\mathrm{sen}\theta}{r}\left[\lambda\left(\partial_\theta\Theta\right)^2 + (\partial_\theta\Phi)^2\right]\right\} =$$

$$\cos\theta\left(\partial_\theta\Theta\right) + \frac{R+r\mathrm{sen}\theta}{r}\partial_\theta^2\Theta + \frac{r}{R+r\mathrm{sen}\theta}\partial_\phi^2\Theta. \tag{3.7}$$

Analogamente, obtem-se a equação:

$$\cos\theta\mathrm{sen}^2\Theta\partial_\theta\Phi + \frac{R+r\mathrm{sen}\theta}{r}\partial_\theta\left(\mathrm{sen}^2\Theta\partial_\theta\Phi\right) + \frac{r}{R+r\mathrm{sen}\theta}\partial_\phi\left(\mathrm{sen}^2\Theta\partial_\phi\Phi\right) = 0. \tag{3.8}$$

Apesar do sistema de coordenadas dado por (2.27) possuir soluções mais simples para o modelo adotado, iremos trabalhar com o sistema (2.26). A razão dessa escolha se deve ao fato de que essas expressões se assemelham a suas componentes para os casos planar, esférico ou pseudo-esférico. Ou seja, se $R+r\mathrm{sen}\theta$ for identificado com $\mathfrak{r}$, $\mathfrak{R}\mathrm{sen}\theta$ ou $\varrho\tau$, enquanto ϕ mantém seu papel de ângulo azimultal, aquela expressão recupera os seus análogos planar, esférico ou pseudo-esférico [63, 64] (aqui, $\mathfrak{r} = |\vec{\mathfrak{r}}|$ responde pela distância radial em coordenadas polares, $\mathfrak{R}$ é o raio em coordenadas esféricas enquanto $\varrho\tau$ responde pela distância medida ao longo de uma geodésica na pseudo-esfera, isto é, uma hipérbole).

Para alcançar nossos objetivos, ou seja, encontrar excitações de caráter topológico na superfície do toro, consideraremos as soluções confinadas ao plano XY. Como estaremos lidando com soluções estáticas, apenas a variável de spin Φ terá dinâmica (espacial) enquanto Θ permanecerá constante, de forma que tomaremos $\Theta = \pi/2$. Então, a Hamiltoniana (3.3) para este sistema passa a ser escrita como:

$$H_{RP} = J\int_{-\pi}^{\pi}\int_{0}^{2\pi}\left[\frac{r}{R+r\mathrm{sen}\theta}\left(\partial_\phi\Phi\right)^2 + \frac{R+r\mathrm{sen}\theta}{r}\left(\partial_\theta\Phi\right)^2\right]d\phi d\theta. \tag{3.9}$$

Assumindo que existam soluções não-triviais (caso ferromagnético) com simetria cilíndrica em Φ, isto é, $\Phi = \Phi(\phi)$, temos, da equação (3.9), que:

$$H_{RP} = J\int\int\frac{r}{R+r\mathrm{sen}\theta}\left(\partial_\phi\Phi\right)^2 d\phi d\theta. \tag{3.10}$$

então:

$$\partial_\phi^2\Phi = 0, \tag{3.11}$$

cujas soluções são da forma:

$$\Phi(\phi) = \kappa\phi + \phi_0, \qquad \kappa \in \mathbb{Z}, \tag{3.12}$$

a qual, quando tomamos $\phi_0 = \pi/2$ e $\kappa = 1$, obtemos a expressão definida anteriormente para a configuração vórtice, isto é, $\mathbf{m}_{\mathcal{V}} = \hat{\varphi}$. Aqui, κ é a carga do vórtice (vorticidade), enquanto ϕ_0 é uma constante de integração, que não contribui para a energia, apenas para seu aspecto global. A carga é formalmente definida, no limite contínuo, como:

$$\kappa = \frac{1}{2\pi} \oint_C (\nabla\Phi) \cdot d\mathbf{l}. \tag{3.13}$$

Podemos agora calcular a energia de troca associada à excitação tipo vórtice na superfície do toro, tomando a solução dada em (3.12) e substituindo na Hamiltoniana (3.10), encontrando, no caso do toro do tipo anel ($R > r$):

$$E_{v\phi} = 4\pi^2 J\kappa^2 \frac{r}{\sqrt{R^2 - r^2}}, \tag{3.14}$$

donde se nota que, diferentemente dos casos, esférico, planar ou pseudo-esférico, a energia do vórtice no toro do tipo anel não apresenta divergências espúrias, geralmente associadas ao centro do vórtice, onde a aproximação contínua não é, muitas vezes, apropriada. Em outras palavras, o genus (buraco interno do toro) é um regularizador natural para a configuração vórtice no toro do tipo anel, não permitindo que essa excitação possa apresentar um caroço singular. Nos outros casos ($R = r$ ou $R < r$), é necessário introduzir um corte para impedir as divergências no núcleo do vórtice. Para maiores detalhes sobre tal procedimento, o leitor é remetido às referências [63, 64].

Analisando o limite onde $R \to \infty$, tem-se que a energia do vórtice se anula. Esse resultado é esperado, uma vez que neste limite, efetivamente, estamos lidando com um vórtice num anel infinito (não um plano infinito) com raios interno e externo dados, respectivamente, por $R - \pi r$ e $R + \pi r$. Alternativamente, também podemos pensar que nesse limite o vórtice é levado à superfície de um cilindro infinito, ao longo do eixo de simetria. Nesse caso, os spins aparecem praticamente paralelos (no caso ferromagnético) uns aos outros, de tal forma que ao invés de um vórtice, temos o estado fundamental de troca, cuja energia normalizada se anula. Isto poderia sugerir, a princípio, que a configuração em questão seria o estado fundamental do ferromagneto para a superfície do toro. Entretanto vemos que existe uma carga topológica mesmo neste limite, o que não ocorre para o estado fundamental de um ferromagneto cilíndrico, de onde se conclui que esta configuração não pode ser aquela do estado fundamental de troca para

um ferromagneto toroidal. Uma discussão melhor acerca do estado fundamental para um toro ferromagnético poderá ser feita quando a energia magnetostática for levada em conta, o que será feito no próximo capítulo.

Da análise da Fig. 3.1 e da expressão (3.14), nota-se que a energia diminui com o aumento de R/r, entretanto, se r aumentar proporcionalmente a R, isto é, se mantivermos a relação r/R constante, temos que a energia do vórtice permanece constante. No limite em que $r \ll R$, a Eq. 3.14 pode ser expandida em torno desse ponto, de onde obtemos:

$$E_{v\phi} \approx \left(\frac{4\pi^2 J\kappa^2}{R}\right) r + \mathcal{O}\left[\left(\frac{r}{R}\right)^3\right], \tag{3.15}$$

donde concluimos que no limite $r/R \ll 1$, a energia cresce linearmente com r, o que pode ser notado a partir da análise da Fig.3.1.

A divergência da energia do vórtice no toro, no limite $R = r$ pode ser explicada pelo fato de que quando $R \to r$, o limite contínuo falha, de forma que estaríamos adentrando o núcleo do vórtice, o que agora é possível já que o tamanho do buraco vai a zero, ou seja, o genus do toro se reduz a um ponto. No entanto, cuidado deve ser tomado a curtíssimas distâncias, pois o tratamento contínuo não resolve o problema do cálculo da energia do núcleo (de fato, pode sim desde que os spins neste caroço desenvolvam S_z diferente de zero, que é possível no modelo XY). Já que o genus do toro é reduzido a um ponto, torna-se necessário induzir um corte na superfície para regularizar a energia. Este corte pode ser conseguido, para o caso do *horn torus*, introduzindo um buraco de tamanho l_0 no núcleo do vórtice. Fazendo isso, a energia pode ser facilmente calculada:

$$E_{v-horn} = 2\pi J\left[\int_0^{\frac{3\pi}{2}-\frac{l_0}{r}} \frac{1}{1+\text{sen}\theta}\left(\partial_\phi \Phi\right)^2 d\theta + \int_{\frac{3\pi}{2}+\frac{l_0}{r}}^{2\pi} \frac{1}{1+\text{sen}\theta}\left(\partial_\phi \Phi\right)^2 d\theta\right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E_{v-horn} = 4\pi J\kappa^2 \cot\left(\frac{l_0}{2r}\right), \tag{3.16}$$

a qual depende apenas da relação entre os tamanhos do buraco e do raio do vórtice, l_0/r.

No caso do toro com auto-interseção no eixo z ($R < r$), a densidade da Hamiltoniana (3.10) não é bem definida nos dois pontos onde a superfície do toro se auto-intercepta, isto é, nos pontos onde $R + r\text{sen}\theta = 0$. Nesse caso, mantendo θ

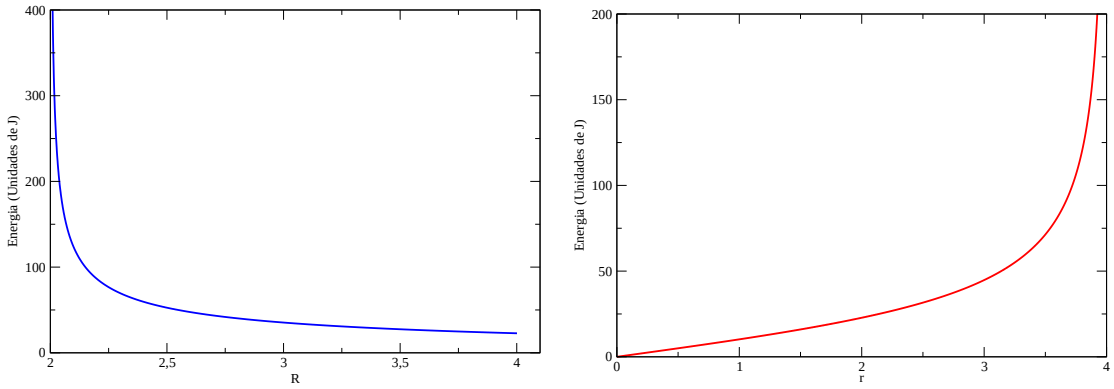

Figura 3.1: Gráfico da energia em função de R para o caso de um vórtice no toro. À esquerda, temos R variando de 2 até 4. Nesta figura, foi feito $r = 2$, $J = 1$, $\kappa = 1$. À direita, o gráfico da energia do vórtice em função de r, com r variando de 0 até R. Nesta figura, foi feito $R = 4$, $J = 1$, $\kappa = 1$.

arbitrário, a energia do vórtice será dada por [66]:

$$E = 2\pi J\kappa^2 r \frac{\ln\left[\frac{r+R\tan\left(\frac{\theta}{2}\right)-\sqrt{r^2-R^2}}{r+R\tan\left(\frac{\theta}{2}\right)+\sqrt{r^2-R^2}}\right]}{\sqrt{r^2-R^2}}. \tag{3.17}$$

O resultado acima deve ser avaliado num intervalo próprio, e, para tal, devemos introduzir dois cortes ao redor dos pontos onde a densidade de energia é mal definida (com o objetivo de evitar as singularidades), ou seja, em $\theta_{sing_1} = \arcsin(-R/r)$ e $\theta_{sing_2} = \pi - \theta_{sing_1}$, e só após isso podemos calcular a energia do toro com auto interseção no eixo z. Entretanto, este trabalho é muito tedioso e as expressões resultantes têm comprimento muito grande, de forma que não serão apresentadas aqui. A característica principal é que a energia de vórtice definida nessa superfície mostra claramente o aparecimento de dois caroços singulares localizados em θ_{sing}, dado acima. Um outro caso interessante é aquele no qual $R = 0$, onde a integração da Hamiltoniana (3.10) para a solução (3.12) nos dá exatamente o resultado obtido no caso esférico [63], isto é, exibindo um par de caroços singulares nos pontos antipodais.

Em resumo, se começarmos a analisar o toro do tipo anel ($R > r$), onde o vórtice é anucleado (sem caroço singular) e formos diminuindo o valor de R, eventualmente obteremos o *horn torus*, onde um ponto de singularidade é formado. Diminuindo ainda mais o valor de R, um toro com auto interseção no eixo z é obtido e o vórtice apresenta agora um par de singularidades nos pontos de auto-interceptação. No limite $R = 0$, esses pontos se localizam em posições diametricamente opostas e, efetivamente, temos

um vórtice numa esfera de raio r.

Além de excitações tipo vórtice, sólitons fracionários aparecem numa superfície toroidal como excitações sobre o estado fundamental, se considerarmos o modelo isotrópico [48]. Ainda estudando excitações de caráter topológico, num trabalho preliminar [65], obtivemos diversas soluções para diferentes simetrias referentes aos sistemas de coordenadas (2.26) e (2.27). Os resultados obtidos neste capítulo, juntamente com uma análise acerca de excitações de caráter topológico sobre uma superfície toroidal foram publicados no Physical Review **B** [48].

Capítulo 4

Configurações de mínima energia em nanomagnetos toroidais

4.1 Resultados analíticos

A partir de agora, começaremos a discutir o caso de um toroide volumétrico e aumentaremos o alcance de nossa análise para incluir o termo magnetostático no cálculo da energia de diferentes estados magnéticos no nanotoro. Começaremos por determinar a energia de troca para as configurações consideradas, isto é, vórtice ($\mathcal{V}$), cebola no plano ($\mathcal{O}$) e domínio único na direção z (DU_z). Logo depois, determinaremos as expressões para a energia magnetostática e realizaremos cálculos numéricos no intuito de determinar qual o estado fundamental da magnetização em um nanomagneto toroidal.

4.1.1 Energia de troca

Como foi dito anteriormente, os momentos magnéticos são paralelos entre si na configuração ferromagnética, dessa forma, este é o estado fundamental do termo de troca para a energia do magneto. De fato, a configuração de domínio único não tem custo de troca, uma vez que $\nabla\vec{m} \equiv 0$.

Entretanto, para a configuração tipo vórtice, a energia de troca deve ser computada analiticamente dentro de nossa aproximação baseada no modelo contínuo de Heisenberg, Eq. (2.25), levando a:

$$E_{ex}^{\mathcal{V}} = 2\pi^2 A \left[\sqrt{b^2+t^2} - |b|\right], \tag{4.1}$$

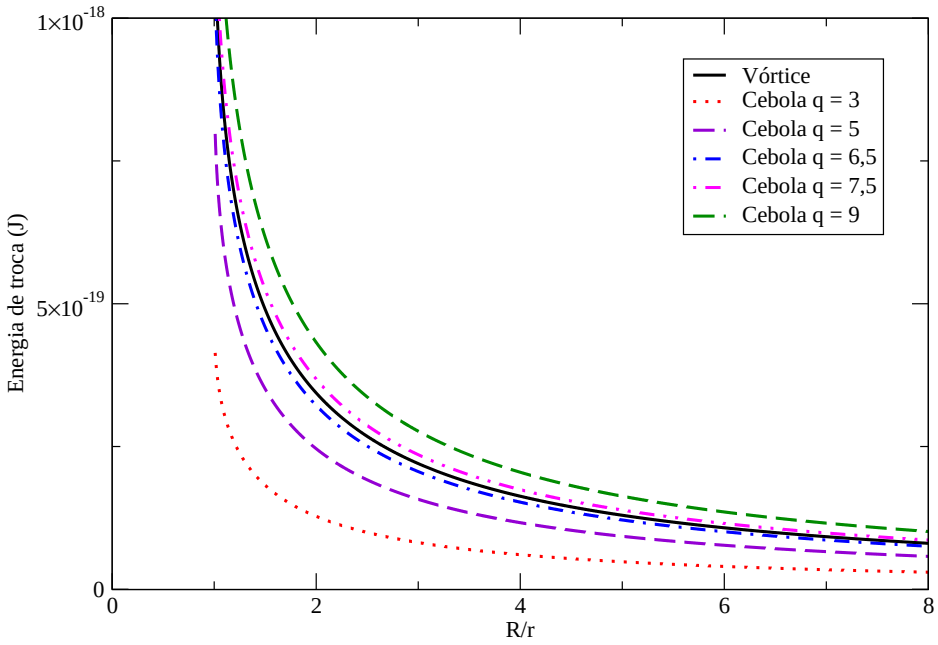

Figura 4.1: Energia de troca como uma função da razão, R/r, para um número de possíveis configurações tipo cebola (com diferentes valores de q). Por exemplo, note que quando $q > 7$ o cebola é mais energético que o estado vórtice.

onde $b^2 = R^2 - r^2 > 0$, $|t| = \sqrt{r^2 - c^2} \in (0, r]$ e c é o raio do buraco do toro oco ($c = 0$ representa o toroide completamente preenchido em seu volume). A expressão acima também pode ser obtida de seu correspondente bidimensional representada na Eq. (3.14), pela integração sobre r (ver capítulo 3 e Ref. [48]). Analogamente, a energia de troca do estado cebola deve ser avaliada, obtendo-se:

$$E_{ex}^{\mathcal{O}} = E_{ex}^{\mathcal{V}}\Big(\mathcal{I}(q) - 1\Big), \tag{4.2}$$

onde

$$\mathcal{I}(q) = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi/2} \frac{1}{1 - f^2(q,\phi)}\left[\frac{\partial f(q,\phi)}{\partial \phi}\right]^2 d\phi,$$

com $\mathcal{I}(q) \geq 1$ (para mais detalhes acerca da obtenção da Eq. (4.2), ver Apêndice A). De fato, $\mathcal{I}(q) = 1$ para $q = 1$, tal que a configuração tipo cebola recupera a energia do estado ferromagnético ao longo do plano xy (isto é, $E_{ex(q=1)}^{\mathcal{O}} = 0$). Em adição, $\mathcal{I}(q) \gtrsim 2$ sempre que $q \gtrsim 7$, de forma que tais configurações (com $q \geq 7$) não podem ocorrer como estado fundamental, uma vez que sua energia total é maior que aquela equivalente à energia do vórtice (ver Fig. 4.1).

4.1.2 Energia magnetostática

Para o caso do estado vórtice, temos que $\vec{\nabla} \cdot \vec{m}_{\mathcal{V}} = 0$ e $\vec{m}_{\mathcal{V}} \cdot \hat{n} = 0$, de forma que não há o aparecimento de cargas magnéticas efetivas, então, sua energia total se deve apenas a contribuições da energia de troca, computada acima. As demais configurações consideradas neste trabalho possuem cargas magnéticas efetivas tanto em sua superfície, quanto em seu volume, tornando o cálculo de sua energia mais complicada. A partir de agora, apresentaremos os principais resultados e suas interpretações, deixando maiores detalhes para os respectivos apêndices. Em todos os casos, começaremos determinando o potencial magnetostático Φ, do qual o campo magnético emerge através da relação $H = -\nabla\Phi_m$, como usual. Nosso procedimento é baseado em cima da avaliação da função de Green 3D em termos dos harmônicos toroidais, envolvendo as funções de Legendre de ordem semi-inteira , $P^k_{n\pm1/2}$ e $Q^k_{n\pm1/2}$, de primeiro e segundo tipos, respectivamente (remetemos o leitor ao Apêndice B para maiores detalhes).

Iniciaremos nossa análise pelo caso mais simples, a configuração ferromagnética (ou domínio único, DU) ao longo do eixo z, ou seja, $\vec{m}_{\mathcal{F}_z} = \hat{z}$. Nesse caso, apenas cargas superficiais σ_m aparecem. Obtemos então, formalmente (ver apêndice C.1 para detalhes):

$$E^{\mathcal{F}_z}_{\text{mag}} = \frac{128\mu_0 M_S^2 b^3}{9}\text{senh}^2\alpha_0 \sum_{n=1}^{\infty} n^2 P_{n-1/2}Q_{n-1/2}\left(Q^1_{n-1/2}\right)^2, \tag{4.3}$$

onde omitimos os superescritos $k = 0$ nas funções de Legendre e também definimos $P^\mu_\nu(\cosh\alpha_0) = P^\mu_\nu$ e $Q^\mu_\nu(\cosh\alpha_0) = Q^\mu_\nu$, onde $\cosh\alpha_0 = R/r$. Embora tenhamos explicitamente assumido um toroide volumétrico, o resultado acima nos dá, prontamente, seu corresponde oca (devemos retornar a esse ponto com mais detalhes depois).

Abaixo, apresentamos a contribuição magnetostática associada à configuração tipo cebola, cujo caso especial no qual $q = 1$ representa o domínio único ao longo do plano, DU_{xy}. Agora, no estado cebola, tanto cargas superficiais quanto volumétricas tomam lugar, tornando a determinação de Φ_m muito complicada. Mesmo para esse caso, obtemos uma expressão formal para todo q, como a seguir:

$$\begin{aligned} E^{\mathcal{O}}_{\text{mag}} = \; & \frac{16\mu_0 M_S^2 b^3}{9\pi^2}\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^k\epsilon_n\epsilon_k\frac{\Gamma\left(n-k+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(n+k+\frac{1}{2}\right)}P^k_{n-1/2}\times \\ & \times\left[Q^k_{n-1/2}\mathcal{A}_n\left(\mathcal{A}_n\mathcal{J}'_k - \mathcal{B}^k_n\mathcal{J}''_k\right) - \mathcal{B}^{k'}_n\left(\mathcal{A}_n\mathcal{J}''_k - \mathcal{B}^k_n\mathcal{G}^{k'}_n\right)\right], \end{aligned} \tag{4.4}$$

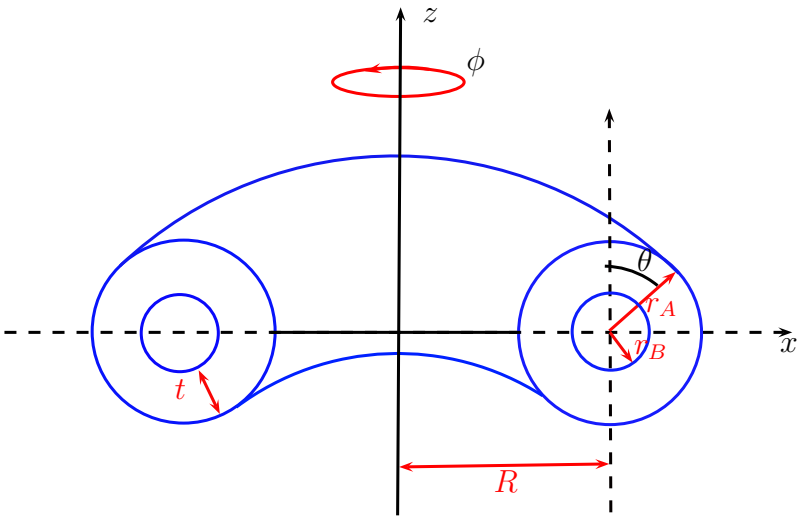

Figura 4.2: Representação do sistema de coordenadas de um toro oco, com raios internos $r_A > r_B$ a espessura é $t = r_A - r_B$.

com as definições:

$$\mathcal{J}'_k = \int_0^{2\pi} \mathcal{J}_k(\varphi') m_r(\varphi') d\varphi', \qquad \mathcal{J}''_k = \int_0^{2\pi} \mathcal{J}_k(\varphi') \frac{\partial[m_\varphi(\varphi')]}{\partial\varphi'} d\varphi'$$

$$\mathcal{B}_n^{k'} = -\frac{3}{2}\int_{\alpha_0}^{\infty} \frac{Q^1_{n-1/2}(\cosh\alpha)}{\mathrm{senh}\alpha} d\alpha, \qquad \mathcal{G}_n^{k'} = \int_0^{2\pi} \mathcal{G}_n^k(\varphi') \frac{\partial[m_\varphi(\varphi')]}{\partial\varphi'} d\varphi'.$$

Acima, usamos as coordenadas (α, β, φ), apresentadas na Eq. (2.27) (por exemplo, temos que $R = b\tanh\alpha$, $r = b\mathrm{senh}\alpha$, e $\phi = \varphi$), onde $\mathcal{A}_n$, $\mathcal{J}_k(\varphi')$, $\mathcal{B}_n^k$ e, $\mathcal{G}_n^k(\varphi')$ são dados no apêndice C.1.1. Devido à forma das expressões obtidas, uma avaliação mais aprofundada da energia (4.4) demanda integração numérica, com (R, r) como dados de entrada.

Tomando $q = 1$ na Eq. (4.4) obtemos a energia magnetostática associada à configuração DU_{xy}, como abaixo:

$$E_{\mathrm{mag}}^{\mathcal{F}_{xy}} = -\frac{32\mu_0 M_S^2 b^3}{9} \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n \mathcal{A}_n^2 P^1_{n-1/2} Q^{-1}_{n-1/2}, \tag{4.5}$$

onde usamos a propriedade $\frac{\Gamma\left(n-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(n+\frac{3}{2}\right)} Q^1_{n-1/2} = Q^{-1}_{n-1/2}$ (ver Ref. [66], p. 959).

Retornaremos agora a discutir o caso do toro oco, com espessura t. O potencial Φ_m deve ser prontamente computado através da superposição linear dos potenciais associados a dois toros concêntricos, possuindo magnetizações opostas em suas superfícies. Fazendo uso dos resultados preliminares, tomamos as coordenadas (α, β, φ), tal

que dois toros arbitrários, A e B, são parametrizados por $(\alpha_A, \beta, \varphi)$ e $(\alpha_B, \beta', \varphi')$, respectivamente. Então, temos $\cosh(\alpha_A) = R/r_A$, $\cosh(\alpha_B) = R/r_B$ e $t = r_A - r_B$ (ver Fig. 4.1.2), e assumindo $r_A > r_B$, obtemos, para o estado ferromagnético ao longo de z:

$$E_{\rm mag}^{\mathcal{F}_z}\Big|_{\rm hollow} = \frac{128\mu_0 M_S^2}{9}\sum_{n=1}^{\infty} n^2\left[b_A^3 {\rm senh}^2\alpha_A P^A_{n-1/2}Q^A_{n-1/2}\left(Q^{1A}_{n-1/2}\right)^2 - b_B^3{\rm senh}^2\alpha_B P^B_{n-1/2}Q^B_{n-1/2}\left(Q^{1B}_{n-1/2}\right)^2\right] \quad (4.6)$$

e para o estado ferromagnético ao longo do plano, temos:

$$E_{\rm mag}^{\mathcal{F}_{xy}}\Big|_{\rm hollow} = -\frac{32\mu_0 M_S^2}{9}\sum_{n=0}^{\infty}\epsilon_n\left\{b_A^3 P^{1A}_{n-1/2}Q^{-1A}_{n-1/2}\left[\cosh\alpha_A\left(\frac{Q^{2A}_{n+1/2}}{{\rm senh}\alpha_A} - nQ^{1A}_{n-1/2}\right)^2 - \frac{Q^{2A}_{n-1/2}}{{\rm senh}\alpha_A}\right] - b_B^3 P^{1B}_{n-1/2}Q^{-1B}_{n-1/2}\left[\cosh\alpha_B\left(\frac{Q^{2B}_{n+1/2}}{{\rm senh}\alpha_B} - nQ^{1B}_{n-1/2}\right) - \frac{Q^{2B}_{n-1/2}}{{\rm senh}\alpha_B}\right]^2\right\}. \quad (4.7)$$

Acima, definimos $b_{A,B} = \sqrt{R^2 - r^2_{A,B}}$, enquanto $P(Q)^{\mu}_{\nu}(\cosh\alpha_{A(B)}) = P(Q)^{\mu A(B)}_{\nu}$. O segundo termo nessas expressões, proporcional a b_B, se anula quando $r_B \to 0$, de forma que, como esperado, quando $r_A \equiv r$, obtemos a expressão 4.5. O mesmo procedimento pode ser usado para determinar a energia do estado cebola, mas devido ao comprimento da expressão, devemos omiti-la aqui.

4.2 Resultados numéricos e discussões

Embora tenhamos obtido expressões analíticas para a energia magnetostática dos estados de magnetização estudados (Eqs. (4.3)-(4.5)), uma análise imediata de suas implicações físicas não é clara devido a suas formas complicadas. Dessa forma, para extrair resultados relevantes, devemos avaliar essas expressões numericamente. Para realizar os cálculos numéricos, utilizamos a subrotina do Fortran, então denominada DTORH1 [67], a qual nos dá os valores de $P^k_{n-1/2}(\cosh\alpha)$ e $Q^k_{n-1/2}(\cosh\alpha)$ para quaisquer valores de R e r. Também adotamos os parâmetros experimentais associados ao Permalloy, isto é, $A = 1,3\times10^{-11}$ J/m e $M_s = 8,6\times10^5$ A/m, tal que o comprimento de troca é $\ell_{\rm ex} = \sqrt{2A/\mu_0 M_s^2} = 5,3$ nm. Tal comprimento conta a importância relativa de cada contribuição, de forma que a energia de troca domina a curtas distâncias, $d \lesssim \ell_{\rm ex}$, dando lugar, em importância relativa, à energia magnetostática para $d \gtrsim \ell_{\rm ex}$.

Em primeiro lugar, comparamos as energias associadas aos estados ferromagnéticos (domínio único) ao longo do eixo z e do plano xy, cujas energias são, com

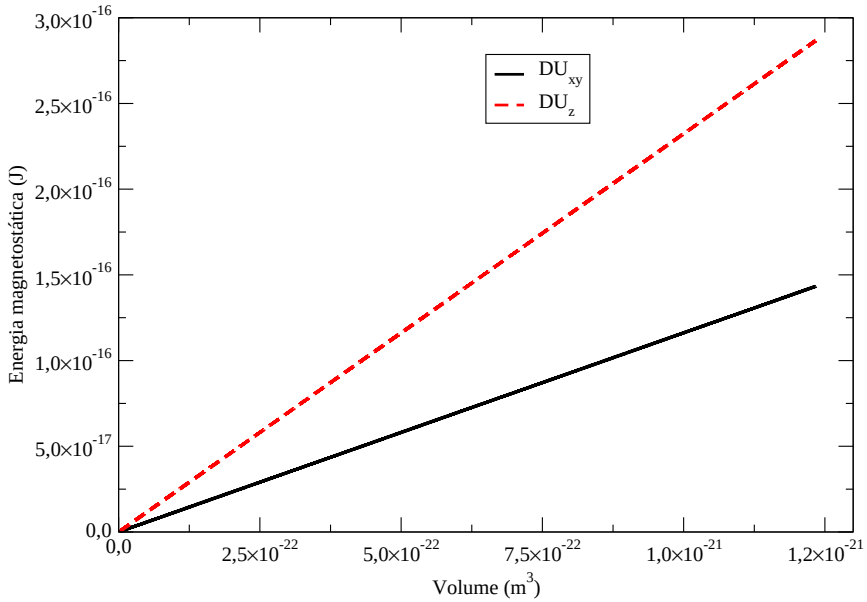

Figura 4.3: Energia magnetostática dos estados ferromagéticos ao longo de z e xy em função do volume do toro ($V = 2\pi^2 r^2 R$). Acima, fixamos $r = 5\,\text{nm}$ enquanto R varia de $5,05$ nm para 2500 nm. Claramente, DU_{xy} é energeticamente favorável quando comparado a seu correspondente ao longo do eixo z.

excelente precisão, representadas pelas expressões simples ($V = 2\pi^2 r^2 R$ é o volume do toro) dadas abaixo:

$$\frac{E_{\text{mag}}^{\mathcal{F}_{xy}}}{\mu_0 M_S^2} \approx \frac{1}{8} V, \qquad \frac{E_{\text{mag}}^{\mathcal{F}_z}}{\mu_0 M_S^2} \approx \frac{1}{4} V, \tag{4.8}$$

mostrando que DU_{xy} custa, aproximadamente, metade da energia de seu correspondente ao longo de z (Fig. 4.3). Dessa forma, de agora em diante, apenas esse estado ferromagnético na direção do plano será considerado.

Continuando nossa análise e considerando o fato de que esse estado é um caso particular da configuração tipo cebola, com $q = 1$, é importante determinar os valores desse parâmetro que minimizam a energia total para um dado toro. Tal resultado pode ser formalmente encontrado resolvendo-se $\partial E/\partial q \equiv 0$. Nossos resultados numéricos podem ser resumidos na Fig. 4.5, onde apresentamos a energia total dos estados de vórtice, cebola e DU_{xy} em função de R/r. Para cada gráfico, o estado cebola perde sua estabilidade no ponto O, uma vez que ele se torna mais energético que o estado vórtice para maiores valores de R/r. Neste ponto, resultados numéricos mostram que $q \approx 1,7$ minimiza a energia total em um toro com $R \approx 8\,\text{nm}$ e $r = 1\,\text{nm}$ (para maiores valores de R, o estado fundamental consiste da configuração vórtice). Podemos notar,

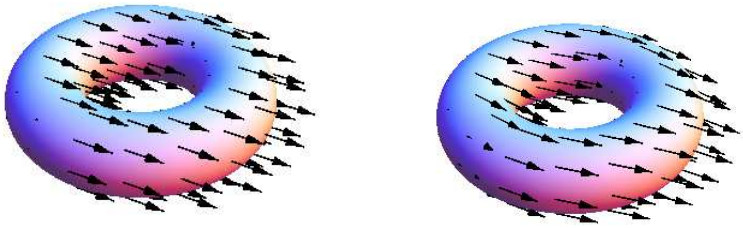

Figura 4.4: Ilustrações de configurações tipo cebola com $q = 1$ (configuração ferromagnética; esquerda) e $q = 1,7$ (direita). Como indicado pelos valores de suas energias, o desvio dos momentos magnéticos da direção paralela é muito pequeno, de forma que esses estados são semelhantes, inclusive energeticamente, um com o outro (veja texto para maiores esclarecimentos).

também, que a energia total do estado cebola, no ponto O, é apenas $\approx 3,2\%$ menor que seu correspondente ferromagnético (DU_{xy}, indicada pelo ponto F na Fig. 4.3). Este fato está associado ao pequeno desvio da direção paralela dos dipolos magnéticos para $q = 1,7$, como podemos ver na Fig. 4.4. À medida que aumentamos o valor de r, tal diferença de energia entre essas duas configurações, nos pontos de transição, diminui, como ilustrado na Fig. 4.3 (à esquerda) onde foi tomado $r = 2\,\mathrm{nm}$. Dessa forma, para economizar tempo e esforço computacional, adotaremos $q = 1$ como uma boa aproximação para avaliar a energia total do magneto, ou seja, para nossos propósitos, é suficiente compararmos as energias associadas aos estados de vórtice e DU_{xy}.

No intuito de completar nossa análise, devemos comparar a energia associada aos estados vórtice e DU_{xy} para decidir qual deve ser o estado fundamental de magnetização para um dado toroide. A Figura 4.6 resume nossos resultados, onde indicamos o estado favorável energeticamente para uma dada relação R/r no toro. Considerando apenas a região da figura que nos dá um toro fisicamente possível, com $R > r$, devemos notar que o vórtice aparece como estado fundamental em todo toro com $r \gtrsim 10\,\mathrm{nm}$ ($\rho = r/\ell_{ex} \gtrsim 2$). Naqueles toros onde $r \lesssim 10\,\mathrm{nm}$ o vórtice ainda minimiza a energia total sempre que $R \gtrsim 10\,\mathrm{nm}$ ($\xi = R/\ell_{ex} \gtrsim 2$) enquanto DU_{xy} é energeticamente favorável para valores menores de R. Devemos salientar que na região $\rho \lesssim 1$ e $\xi \lesssim 1,5$ o verdadeiro estado fundamental não é DU_{xy} ($q = 1$) exatamente, mas uma configuração tipo cebola suavemente diferente, com $1 < q \lesssim 1,7$, cujas energias são, no máximo, 3,2% menores do que o estado com $q = 1$. Dessa forma, a curva de transição apresenta

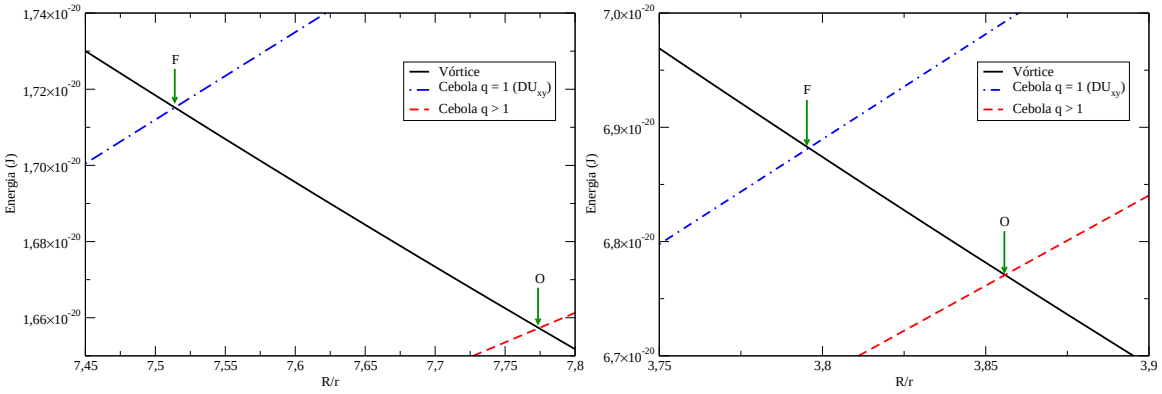

Figura 4.5: A energia total correspondente aos estados vórtice, cebola e DU_{xy} ($q = 1$) para $r = 1\,\mathrm{nm}$ (esquerda) e $r = 2\,\mathrm{nm}$ (direita). Em cada caso, o ponto O marca o valor crítico, R/r, acima do qual o estado cebola não é mais estável, ou seja, sua energia é maior do que a energia do estado vórtice (F, o ponto no qual o vórtice e DU_{xy} têm a mesma energia). A maior diferença entre as energias dos estados tipo cebola (com $q \approx 1,7$) e DU_{xy}, para os valores de (R, r) nos quais elas são estáveis, ocorre para um toro com $r = 1\,\mathrm{nm}$ e $R \approx 8\,\mathrm{nm}$, e nos dá $\approx 3\%$ (veja discussão no texto).

uma confidência em torno desse percentual na região de transição.

Torna-se interessante agora comparar nosso diagrama de estados com o diagrama de estados obtido para o nanoanel, por exemplo, aquele apresentado na Ref. [18] (infelizmente, nesse trabalho, os autores não mostram os valores da energia para que possamos fazer uma melhor comparação entre os seus resultados e os nossos). Entretanto, um contraste notável concerne a pequenez dessas estruturas suportando estado fundamental tipo vórtice no caso toroidal, mesmo em nanomagnetos bastante diminutos[1], ou seja, com $r \approx 1\,\mathrm{nm}$ e $R \gtrsim 8\,\mathrm{nm}$, enquanto, num nanoanel necessita-se de um raio externo de, no mínimo, $\gtrsim 10\,\mathrm{nm}$, com um buraco central e espessura $\sim 8\,\mathrm{nm}$ e $2\,\mathrm{nm}$. Mais especificamente, se $r = 1\,\mathrm{nm}$ (espessura 2 nm), o estado vórtice é estável para nanotoros com volume $V \approx 150\,\mathrm{nm}^3$, enquanto para nanoanéis com mesma espessura, essa estabilidade demanda um volume $V \approx 225\,\mathrm{nm}^3$ (em torno de 50% maior que

[1]Assumimos aqui que nossa aproximação ainda é válida em tais escalas de comprimento, de alguns átomos ao longo do diâmetro interno, onde certamente efeitos quânticos deveriam ser importantes. Se nós considerarmos $r \gtrsim \ell_{\mathrm{ex}} \approx 5 - 6\,\mathrm{nm}$, nossa afirmação acerca da estabilidade do vórtice é mais razoável dentro de nossa aproximação.

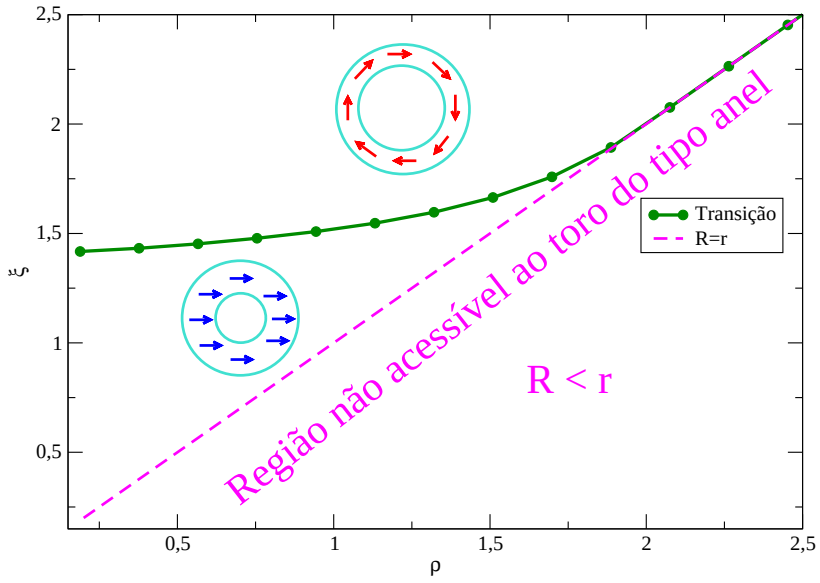

Figura 4.6: Diagrama de estados para nanotoros magnéticos ($\xi = R/\ell_{ex}$ e $\rho = r/\ell_{ex}$). Para todo toro com $r \gtrsim 10\,\text{nm}$ ($\rho \gtrsim 2$) a configuração tipo vórtice aparece como estado fundamental. Para raios menores, $r \lesssim 10\,\text{nm}$, o vórtice permanece como o estado fundamental, desde que $R \gtrsim 8\,\text{nm}$ ($\xi \gtrsim 1,5$), sendo substituído pelo estado DU_{xy} para valores menores de R. A curva de transição tem uma imprecisão da ordem de $\approx 3\%$ (para $\rho \lesssim 1$ e $\xi \lesssim 1,5$).

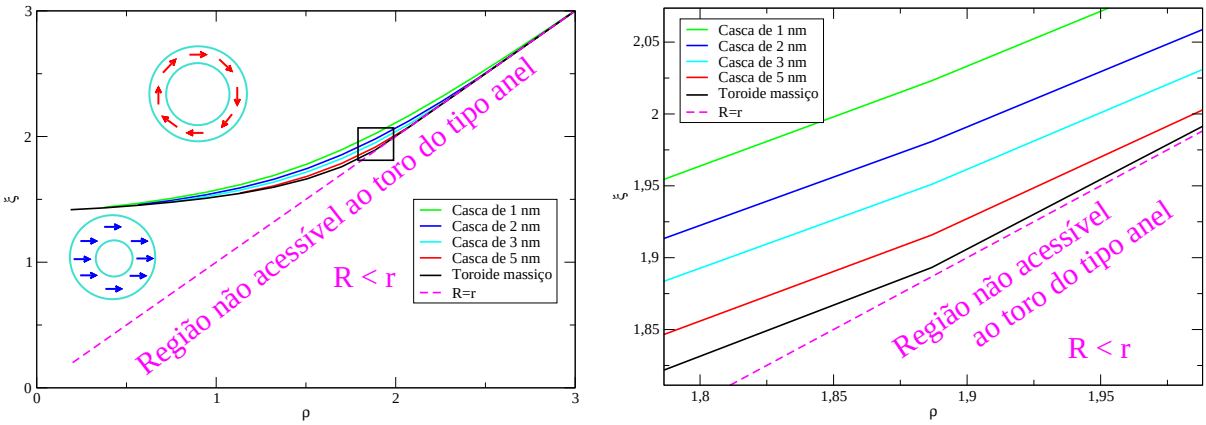

Figura 4.7: Diagramas de estado para um toro oco. Aqui, consideramos algumas espessuras fixas de $t = \{1, 2, 3, 5\}\,\text{nm}$. Note que a estabilidade do vórtice tende a ser levemente dininuída quando a espessura se torna menor, isto é, uma fina camada toroidal favorece o estado de domínio único como estado fundamental. A figura da direita mostra um aumento da região destacada pelo quadrado na figura da esquerda.

seu correspondente no nanotoro). Dessa forma, em virtude de sua curvatura suave, a geometria toroidal oferece um suporte físico interessante para sustentar a miniaturização quando há a necessidade de um estado fundamental de magnetização tipo vórtice. Além disso, quando pensamos em um arranjo de tais nanotoros, podemos conceber um sistema de elementos praticamente não interagentes, se for garantida uma separação $\gtrsim \ell_{ex}$ entre nanotoros vizinhos. Embora tais elementos não interagentes possam ser obtidos com nanoanéis, os nanotoros têm a vantagem de minimizar consideravelmente flutuações magnetostáticas, particularmente aqueles advindos de cargas superficiais nas bordas do buraco e externa do anel.

Agora, discutiremos um pouco a respeito do caso do toro oco, cujas energias do vórtice e do domínio único são dadas pelas Eqs. (4.1) e (4.7), respectivamente; dois diagramas de estados relevantes são mostrados na Fig. 4.7. Por exemplo, note que um maior valor de R é demandado para garantir o estado fundamental tipo vórtice quando comparamos com o valor obtido para o toro maciço com mesmo valor de r. Então, em um toro oco, a estabilidade da configuração DU_{xy} aumenta levemente quando diminuimos a espessura do toro. Entretanto, em todos os casos considerados, os diagramas de estado são qualitativamente similares àqueles obtidos para um toroide maciço, com pequenas diferenças quantitativas.

4.3 Estabilidade do vórtice na presença de um campo magnético

Tendo sido obtido o diagrama de estados para configuração de magnetização num nanomagneto toroidal, desejamos determinar agora quão estável é o vórtice frente a aplicação de agentes externos, como um campo magnético. Quando aplicamos um campo magnético externo na direção do plano xy, os momentos magnéticos interagem com esse campo, tendendo a apontar na mesma direção e sentido, tornando a configuração de DU_{xy} estável para maiores valores da relação R/r em comparação aos dados apresentados na Fig. 4.6.

Para determinar a nova configuração de estado fundamental, devemos acrescentar mais um termo de energia ao nosso modelo, a interação com o campo magnético ou interação Zeeman, dada por:

$$E_{\mathrm{Zeeman}} = -\mu_0 \int_V \mathbf{M} \cdot \mathbf{B} dv, \tag{4.9}$$

onde $\mathbf{B}$ é o campo magnético externo. Uma vez que a diferença entre os pontos de transição do estado de domínio único para vórtice e do estado cebola para vórtice é muito pequena (ver Fig. 4.5), bem como a configuração de domínio único na direção z não é estável, estudaremos apenas a interação de um campo magnético uniforme com os estados vórtice e domínio único no plano.

Para analisar a interação de um campo apontando na direção do plano xy com um vórtice no nanotoro, precisamos fazer uma análise local. Uma vez que a configuração de magnetização para o vórtice é dada por $\mathbf{m}_{\mathcal{V}} = \hat{\varphi} = -\hat{x}\mathrm{sen}\varphi + \hat{y}\cos\varphi$, e, tomando $\mathbf{B} = B\hat{x}$, vemos que, localmente, existe uma infinidade de pontos onde $\mathbf{B}\cdot\mathbf{M} \neq 0$, entretanto, ao realizarmos a integral (4.9), obtemos que globalmente, a energia de interação do campo externo com a configuração vórtice é nula. Já no caso do estado SD_{xy}, tomando $\mathbf{M} = M_S\hat{\mathbf{x}}$, a energia de interação com o campo é facilmente avaliada, e obtemos:

$$E_{\mathrm{Zeeman}} = -\mu_0 M_S B V, \tag{4.10}$$

onde V é o volume do toro.

A partir dessa expressão, podemos determinar o valor do campo para o qual o vórtice se torna mais energético do que a configuração de domínio único na presença do campo. Nesse intuito, realizamos cálculos numéricos para $r = 1, 2, 5, 10\,\mathrm{e}\,20$ nm, variando o valor de R. Nossos resultados podem ser melhor compreendidos pela análise da Fig. 4.8. Como esperado, para $r = 1$ nm, a configuração de domínio único é estável, mesmo para $B = 0$, no intervalo $R \in [2, 7.5]$ nm. Entretanto, à medida que aumentamos o valor de R, com $R/r \lesssim 10$, notamos que a intensidade de $\mathbf{B}$ requerido para estabilizar o estado DU_{xy} aumenta rapidamente, contudo, quando $R/r > 10$, $\mathbf{B}$ aumenta lentamente. Tal comportamento se deve ao fato de que, nesses limites, a energia do vórtice diminui muito lentamente com o aumento de R, o que pode ser notado na Fig. 4.9.

Dessa forma, podemos notar, a partir de uma análise sobre configurações estáticas, que os valores de campo capazes de suprimir a estabilidade do vórtice são relativamente altos quando comparados a valores obtidos experimentalmente para nanodiscos ($\sim$ 190 Oe para discos com diâmetro $\sim$ 130 nm [56] ou nanoanéis[2] [27]). Isso poderia, a princípio, tornar a inversão da quiralidade do vórtice nessa geometria dificilmente realizável. Nesse contexto, nanotoros magnéticos apareceriam como forte

[2] os experimentos conhecidos não estudam aplicação de nanoanéis com dimensões comparáveis às estudadas para o nanotoro neste trabalho, entretanto para nanoanéis com diâmetros da ordem de μm, o campo necessáriio para saturar o nanomagneto é $\sim$ 500 Oe.

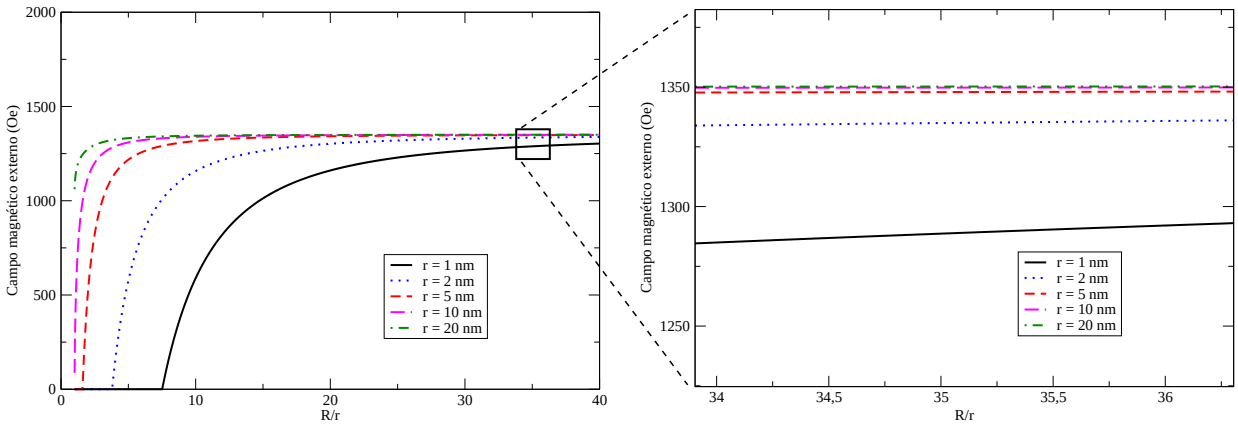

Figura 4.8: Valores de campo magnético que desestabilizam a configuração tipo vórtice em função da relação R/r. Observamos que os valores desse campo são da ordem de centenas de Oersteds. Além disso, para pequenos valores de R/r, B aumenta rapidamente com o aumento de R, mas, para $R/r \gg 1$, o aumento de B é praticamente nulo, o que está associado a pequena variação da energia do vórtice para altos valores da relação R/r

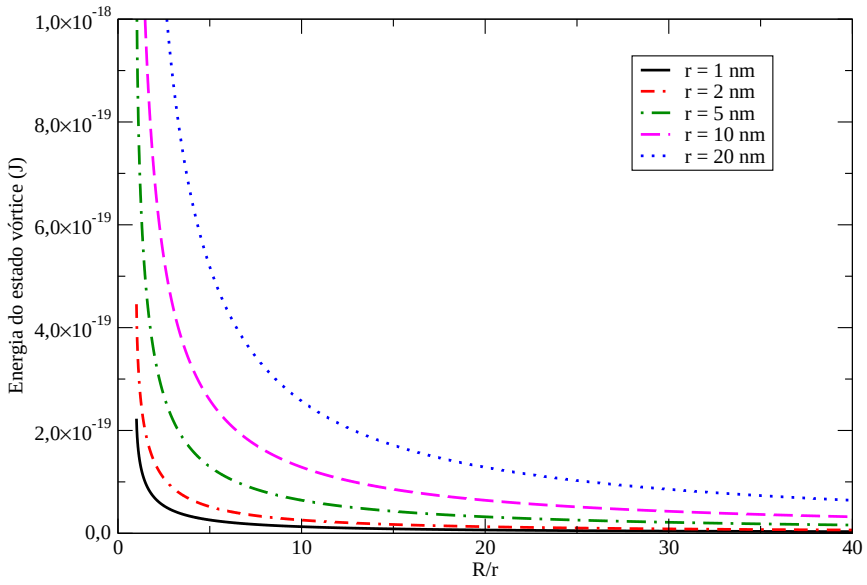

Figura 4.9: Energia do vórtice no nanotoro para $r = 1, 2, 5, 10$ e 20 nm. Para pequenos valores da relação R/r a energia diminui rapidamente com o aumento no valor de R. À medida que aumentamos o valor de R, podemos notar que a energia diminui lentamente, tendendo assintoticamente a zero quando $R \to \infty$.

candidatos a compor elementos para gravação magnética com grande estabilidade mediante flutuações térmicas, associando bits de informação aos estados de quiralidade do vórtice.

Assim como no caso dos nanoanéis [27], devem existir diversos caminhos possíveis para a mudança na magnetização como função do campo externo aplicado, de forma que um simples cálculo de mínima energia só nos dá os estados inicial e final do sistema. Assim, não temos acesso a estados intermediários da magnetização para podermos entender a dinâmica da desestabilização do vórtice e traçar uma curva de histerese para nanomagnetos com geometria toroidal, o que pode ser feito, a princípio, com simulações computacionais.

Apesar de ser um estudo relacionado a configurações estáticas de mínima energia da magnetização, o presente trabalho carrega a importância de ser o primeiro estudo analítico detalhado sobre a viabilidade de produção de nanotoros magnéticos. Os resultados apresentados neste capítulo serão publicados no Journal of Applied Physics [54]. Além disso, novos resultados estão sendo obtidos e estamos trabalhando na análise dos dados.

O próximo passo em nossa pesquisa consiste em estudar a dinâmica da magnetização em nanotoros. Nesse intuito, precisamos resolver a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert nessa geometria mediante a realização de simulações computacionais.

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

A geometria dos nanomagnetos tem grande relevância na configuração de estado fundamental da magnetização. Em particular, enquanto sistemas grandes apresentam um grande número de estados, para tamanhos reduzidos, a barreira de energia que separa estados magnéticos diferentes torna-se progressivamente maior, reduzindo significativamente o número de estados magnéticos acessíveis ao sistema, levando, em geral, a formação de simples configurações de equilíbrio, as quais refletem a simetria geométrica do elemento.

Neste trabalho, estudamos a energia associada a três configurações de magnetização sobre a geometria de um ferromagneto toroidal em escalas nanométricas. Nossa análise mostra que o estado vórtice emerge como uma excitação de caráter topológico sobre o estado fundamental da energia de troca. Além disso, essa excitação aparece como a mais proeminente das configurações em estudo, permanecendo estável mesmo em toros muito pequenos, com $r \approx 1\,\mathrm{nm}$ e $R \gtrsim 8\,\mathrm{nm}$. Realmente, configurações tipo cebola, com $1 < q \lesssim 1,7$, as quais são praticamente equivalentes a DU_{xy}, tornam-se estáveis quando $\rho = r/\ell_{ex} \lesssim 1$ e $\xi = R/\ell_{ex} \lesssim 1,6$. Este é um resultado importante, em especial quando se trata da miniaturização de elementos magnéticos nos quais o estado vórtice é desejado, uma vez que esta configuração é estável em nanotoros muito menores que seus correspondentes de geometria circular, isto é, nanoanéis e nanodiscos.

Atualmente, estamos estudando a dinâmica da magnetização num nanotoro na presença de um campo magnético via solução da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert no intuito de determinar possíveis mecanismos de inversão entre os dois estados de quiralidade possíveis para o vórtice nessa geometria. Além disso, pretendemos calcular configurações de mínima energia em um arranjo de nanotoros colocados lado a lado e sobrepostos em camadas. Nesta situação, se os toros estão espaçados por uma distância

maior que o comprimento de troca, temos então um sistema de elementos praticamente não interagentes se a configuração tipo vórtice é favorável. De fato, mesmo possíveis interações induzidas por agentes externos (campo aplicado, etc.), o qual deve deformar o vórtice, tal configuração é esperada como aquela de mínima energia devido à suavidade da geometria toroidal. Adicionalmente, tal suavidade evita grandes flutuações magnetostáticas vindas de flutuações de cargas superficiais magnetostáticas, como deve ocorrer nas bordas de nanodiscos e nanoanéis.

Dessa forma, nanotoros magnéticos tornam-se importantes estruturas em aplicações relacionadas à miniaturização, caso o estado vórtice seja desejado. Por um lado, a fraca interação característica entre elementos básicos pode tornar um conjunto de nanotoros magnéticos com a configuração vórtice num sistema interessante em pesquisas futuras envolvendo terapia de células cancerígenas, o que já é feito em nanodiscos [6]. Por outro lado, uma vez que nanotoros muito pequenos sustentam vórtices estáveis, outra potencial aplicação seria a utilização de nanomagnetos com configuração tipo vórtice como elementos de gravação magnética, associando "bits" de informação à quiralidade do vórtice, aumentando assim a capacidade de armazenamento de dados disponível atualmente.

Apêndice A

Obtenção da equação (4.2)

Para determinar a expressão para a energia de troca da configuração cebola, começaremos por escrever as componentes da magnetização em coordenadas retangulares, obtendo então:

$$m_x = m_r(\varphi)\cos\varphi - m_\varphi(\varphi)\text{sen}\varphi \tag{A.1}$$

$$m_y = m_r(\varphi)\text{sen}\varphi + m_\varphi(\varphi)\cos\varphi. \tag{A.2}$$

Sabendo que, no sistema de coordenadas (2.26), a componente azimutal do operador gradiente é dado por:

$$\nabla_\varphi = \frac{1}{R + r\text{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{A.3}$$

temos que:

$$(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 = \frac{1}{(R + r\text{sen}\theta)^2}\left[\left(\frac{\partial m_r}{\partial\varphi} - m_\varphi\right)^2 + \left(\frac{\partial m_\varphi}{\partial\varphi} + m_r\right)^2\right]. \tag{A.4}$$

Dessa forma, a substituição da expressão acima em (2.25) nos leva a:

$$E_{ex}^{\mathcal{O}} = \pi A\left[\sqrt{b^2 + t^2} - |b|\right]\int_0^{2\pi}\left[\left(\frac{\partial m_r}{\partial\varphi} - m_\varphi\right)^2 + \left(\frac{\partial m_\varphi}{\partial\varphi} + m_r\right)^2\right]d\varphi. \tag{A.5}$$

Substituindo as expressões (2.35) e (2.36) em (A.5), somos levados à expressão (4.2) para a energia de troca da configuração tipo cebola.

Apêndice B

Equação de Laplace em coordenadas toroidais

O sistema de coordenadas (2.27) é muito útil porque ele tem uma solução bem conhecida para a equação de Laplace, no qual o método de separação de variáveis é válido (veja Ref. [68] p. 1302):

$$\Phi(\alpha,\beta,\varphi)=\sqrt{\cosh\alpha-\cos\beta}A(\alpha)B(\beta)C(\varphi). \tag{B.1}$$

onde as funções A, B e C satisfazem ($\zeta=\cosh\alpha$, e n, k constantes):

$$(\zeta^2-1)\frac{d^2A}{d\alpha^2}+2\zeta\frac{dA}{d\alpha}-\left[\left(n^2-\frac{1}{4}\right)+\frac{k^2}{\zeta^2-1}\right]A=0, \tag{B.2}$$

$$\frac{d^2B}{d\beta^2}+n^2B=0 \tag{B.3}$$

$$\frac{d^2C}{d\varphi^2}+k^2C=0. \tag{B.4}$$

As funções $B(\beta)$ e $C(\varphi)$ são combinações lineares de funções trigonométricas, como abaixo:

$$B_n(\beta)=f_n\cos n\beta+g_n\mathrm{sen}n\beta, \tag{B.5}$$

$$C_k(\varphi)=u_k\cos k\varphi+w_k\mathrm{sen}k\varphi, \tag{B.6}$$

onde f_n, g_n, u_k e w_k são coeficientes constantes a serem determinados a partir das condições de contorno estabelecidas para o problema. Desde que β e φ são variáveis compreendidas entre 0 e 2π, as soluções devem ser periódicas. Esta condição implica

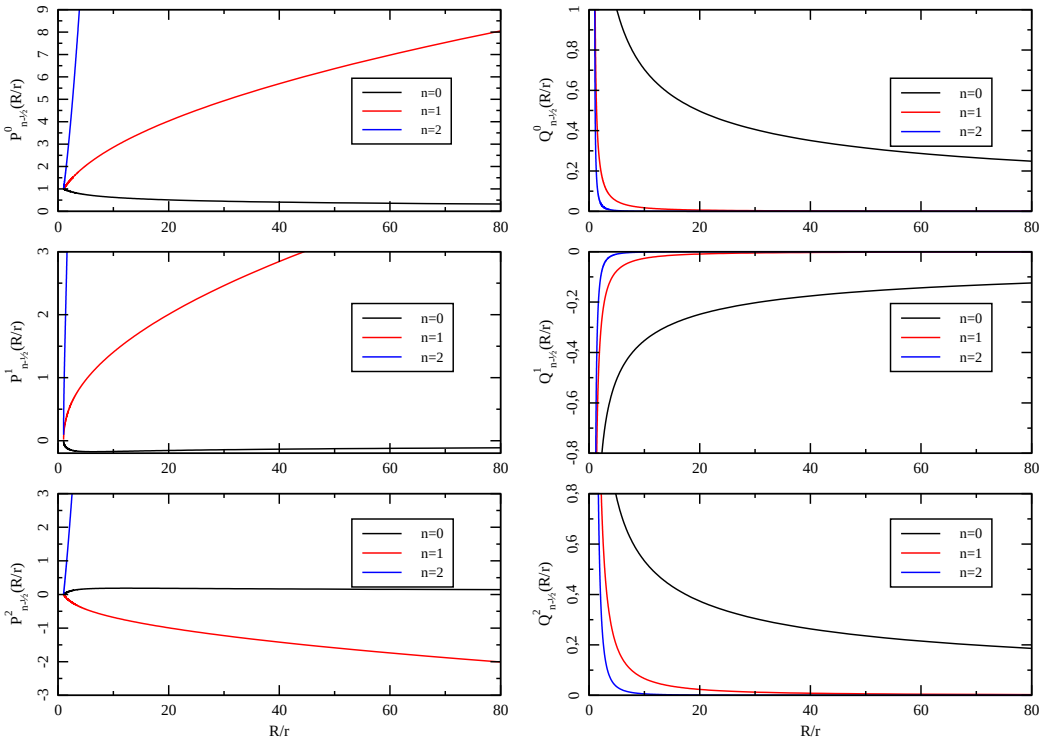

Figura B.1: Comportamento de algumas funções toroidais contra R/r.

que $k = 0, 1, 2, 3, ...$ e $n = 0, 1, 2, 3, ...$, isto é, invariância sob rotações impõem que k e n devem ser inteiros.

As funções $A(\alpha)$ consistem das funções de Legendre de ordem semi-inteira de primeiro $P^k_{n-1/2}(\cosh\alpha)$ e segundo tipo $Q^k_{n-1/2}(\cosh\alpha)$, também chamadas funções toroidais ou harmônicos toroidais, cujo comportamento assintótico é dado por (veja Fig. B.1):

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha\to\infty} P^k_{n-1/2}(\cosh\alpha) &= \infty \\ \lim_{\alpha\to 0} Q^k_{n-1/2}(\cosh\alpha) &= \infty. \end{aligned} \tag{B.7}$$

A expansão de $1/|\vec{r} - \vec{r}'|$ em termos das funções de Green, para o sistema de coordenadas (2.27), é dado por (ver Ref. [68], p. 1304):

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{\sqrt{(\cosh\alpha - \cos\beta)(\cosh\alpha' - \cosh\beta')}}{\pi b} \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^k \epsilon_n \epsilon_k \cos n(\beta - \beta') \cos k(\varphi - \varphi')$$

$$\times \frac{\Gamma\left(n - k + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(n + k + \frac{1}{2}\right)} P^k_{n-1/2}(\cosh\alpha_<) Q^k_{n-1/2}(\cosh\alpha_>), \tag{B.8}$$

onde $\epsilon_n = (2 - \delta_{n,0})$, $\epsilon_k = (2 - \delta_{m,0})$ e $\vec{r}'$ é parametrizado em termos de $(\alpha', \beta', \varphi')$. O

fato de $P^k_{n-1/2}(\cosh\alpha)$ e $Q^k_{n-1/2}(\cosh\alpha)$ estarem relacionados aos sinais $<$ e $>$, respectivamente, reflete o comportamento assintótico dessas funções (ver Fig. B.1).

Apêndice C

Avaliação da energia magnetostática: equações (4.3), (4.4) e (4.5)

C.1 Avaliação da eq. (4.3)

No caso do estado DU_z, temos que $\vec{M} = M_S\hat{z}$, o que nos dá:

$$\vec{M}\cdot\hat{n} = M_S\frac{\mathrm{senh}\alpha\mathrm{sen}\beta}{\cosh\alpha-\cos\beta}, \tag{C.1}$$

tal que apenas as componentes $k=0$ contribuem para a soma, e a integração em φ é facilmente avaliada para dar 2π. Então, a substituição de (B.8) na Eq. (2.22) leva (superescritos $k=0$ foram omitidos):

$$\Phi_{\mathcal{F}_z} = \frac{bM_S\mathrm{senh}^2\alpha}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{\mathrm{sen}\beta d\beta}{(\cosh\alpha-\cos\beta)^{5/2}}\sqrt{\cosh\alpha'-\cos\beta'}\sum_{n=0}^{\infty}\epsilon_n\cos n(\beta-\beta') \times P_{n-1/2}(\cosh\alpha_<)Q_{n-1/2}(\cosh\alpha_>). \tag{C.2}$$

Agora, usando $\cos n(\beta-\beta') = \cos n\beta\cos n\beta' + \mathrm{sen}n\beta\mathrm{sen}n\beta'$, obtemos

$$\Phi_{\mathcal{F}_z} = \frac{bM_S\mathrm{senh}^2\alpha}{2\pi}\sqrt{\cosh\alpha'-\cos\beta'}\sum_{n=0}^{\infty}\epsilon_0 P_{n-1/2}(\cosh\alpha_<)Q_{n-1/2}(\cosh\alpha_>) \times\left[\cos n\beta'\int_0^{2\pi}\frac{\mathrm{sen}\beta\cos n\beta d\beta}{(\cosh\alpha-\cos\beta)^{5/2}} + \mathrm{sen}n\beta'\int_0^{2\pi}\frac{\mathrm{sen}\beta\mathrm{sen}n\beta d\beta}{(\cosh\alpha-\cos\beta)^{5/2}}\right] \tag{C.3}$$

A primeira integral se anula (o integrando é ímpar sob $\beta\to-\beta$), enquanto a segunda nos dá (Ref. [66], p. 961):

$$\int_0^{2\pi}\frac{\mathrm{sen}\beta\mathrm{sen}n\beta}{(\cosh\alpha_0-\cos\beta)^{5/2}}d\beta = \frac{2n}{3}\int_0^{2\pi}\frac{\cos n\beta}{(\cosh\alpha_0-\cos\beta)^{3/2}}d\beta = -\frac{8n\sqrt{2}}{3\mathrm{senh}\alpha_0}Q^1_{n-1/2} \tag{C.4}$$

Agora, uma vez que estamos lidando com uma casca toroidal, tal que $\alpha' = \alpha = \alpha_< = \alpha_> \equiv \alpha_0$, nós finalmente obtemos:

$$\Phi_{\mathcal{F}_z} = -\frac{4\sqrt{2}bM_S \text{senh}\alpha_0}{3\pi}(\cosh\alpha_0 - \cos\beta)^{1/2}\sum_{n=0}^{\infty} n\epsilon_n \text{sen}n\beta$$

$$\times P_{n-1/2}(\cosh\alpha_0)Q_{n-1/2}(\cosh\alpha_0)Q^1_{n-1/2}(\cosh\alpha_0). \tag{C.5}$$

A substituição de (C.5) em (2.23) dá:

$$E^{\mathcal{F}_z}_{\text{mag}} = -\frac{4\sqrt{2}\mu_0 M_S^2 b^3}{3}\text{senh}^3\alpha_0 \sum_{n=0}^{\infty} n\epsilon_n P_{n-1/2}Q_{n-1/2}$$

$$\times Q^1_{n-1/2}\int_0^{2\pi}\frac{\text{sen}\beta\text{sen}n\beta d\beta}{(\cosh\alpha_0 - \cos\beta)^{5/2}}, \tag{C.6}$$

a qual, após uma integração por partes leva imediatamente à Eq. (4.3), como desejado.

C.1.1 Avaliação das eqs. (4.4) e (4.5)

Para a configuração tipo cebola, temos que:

$$\vec{M}\cdot\hat{n} = M_S\frac{\cosh\alpha\cos\beta - 1}{\cosh\alpha - \cos\beta}m_r(\varphi), \tag{C.7}$$

e

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{M} = M_S\left(\frac{\cosh\alpha - \cos\beta}{b\text{senh}\alpha}\right)\frac{\partial m_\varphi(\varphi)}{\partial\varphi}. \tag{C.8}$$

Agora, com a substituição de (C.7)-(C.8) em (2.22), obtém-se:

$$\Phi_{\mathcal{O}} = \frac{bM_S}{4\pi^2}(\cosh\alpha' - \cos\beta')^{1/2}\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^k\epsilon_k\epsilon_n\frac{\Gamma\left(n-k+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(n+k+\frac{1}{2}\right)}P^k_{n-1/2}$$

$$\times\Bigg\{\text{senh}\alpha_0 Q^k_{n-1/2}\int_0^{2\pi}d\beta\frac{(\cosh\alpha_0\cos\beta - 1)\cos n(\beta-\beta')}{(\cosh\alpha_0 - \cos\beta)^{5/2}}\int_0^{2\pi}m_r(\varphi)\cos k(\varphi-\varphi')d\varphi$$

$$-\int_{\alpha_0}^{\infty}\frac{Q^k_{n-1/2}(\cosh\alpha)}{\text{senh}\alpha}d\alpha\int_0^{2\pi}\frac{\cos n(\beta-\beta')}{(\cosh\alpha - \cos\beta)^{3/2}}\int_0^{2\pi}\frac{\partial m_\varphi(\varphi)}{\partial\varphi}\cos k(\varphi-\varphi')d\varphi\Bigg\}, \tag{C.9}$$

com $P^\mu_\nu(\cosh\alpha_0) = P^\mu_\nu$, e similarmente para Q. Usando a identidade usual $\cos n(\beta - \beta') = \cos n\beta\cos n\beta' + \text{sen}n\beta\text{sen}n\beta'$, e integração por partes, temos que:

$$\Phi_{\mathcal{O}} = \frac{2\sqrt{2}bM_s}{3\pi^2}\left(\cosh\alpha' - \cos\beta'\right)^{1/2}\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^k\epsilon_n\epsilon_k\cos n\beta'\frac{\Gamma\left(n-k+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(n+k+\frac{1}{2}\right)}P^k_{n-1/2}$$

$$\times\left[Q^k_{n-1/2}\mathcal{A}_n\mathcal{J}_k(\varphi') - \mathcal{B}^k_n\mathcal{G}^k_n(\varphi')\right], \qquad \text{(C.10)}$$

onde

$$\mathcal{A}_n = \left[\cosh\alpha_0\left(\frac{Q^2_{n+1/2}}{\text{senh}\alpha_0} - nQ^1_{n-1/2}\right) - \frac{Q^2_{n-1/2}}{\text{senh}\alpha_0}\right], \qquad \mathcal{J}_k(\varphi') = \int_0^{2\pi} m_r(\varphi)\cos k(\varphi-\varphi')d\varphi$$

$$\mathcal{B}^k_n = -\frac{3}{2}\int_{\alpha_0}^{\infty}\frac{Q^k_{n-1/2}(\cosh\alpha)Q^1_{n-1/2}(\cosh\alpha)}{\text{senh}\alpha}d\alpha, \qquad \mathcal{G}^k_n(\varphi') = \int_0^{2\pi}\frac{\partial[m_\varphi(\varphi)]}{\partial\varphi}\cos k(\varphi-\varphi')d\varphi.$$

Após uma longa e tediosa manipulação algébrica, a substituição da expressão (C.10) na Eq.(2.22) leva a Eq. (4.4), da qual Eq. (4.5) é prontamente obtida tomando-se $q = 1$.

Referências Bibliográficas

[1] R. Skomski, J. Phys.: Condens. Matter **15**, R841 (2003).

[2] J.-G. Dai, Y. Zheng, G. A. Prinz, J. Appl. Phys. **87**, 6668 (2000);
G. A. Prinz, J. Magn. Mag. Mat. **200**, 57 (1999);
S. H. Sun, C. B. Murray, D. Weller, L. Folks, A. Moser, Science **287**, 1989 (2000);
G. A. Prinz, Science **282**, 1660 (1998).

[3] R. L. White, R. M. H. New, R. F. W. Pease, IEEE Trans. Magn. **33**, 990 (1997).

[4] R. P. Cowburn, J. Phys. D: Appl. Phys. **33**, R1 (2000).

[5] R. P. Cowburn, J. Magn. Mag. Mat. **242-245**, 505 (2002).

[6] D.-H. Kim, E. Rozhkova, I. Ulasov, S. Bader, T. Rajh, M. Lesniak, and V. Novosad, Nature Matter., DOI: 10.1038/NMAT2591 (2009);
E.A. Rozhkova, V. Novosad, D.-H. Kim, J. Pearson, R. Divan, T. Rajh, S. D. Bader, J. App. Phys. **105**, 07B306 (2009);
E.A. Rozhkova, I. Ulasov, B. Lai, N. M. Dimitrijevic, M. S. Lesniac, T. Rajh, Nano Lett. **9**, 3337 (2009).

[7] A. Aharoni, IEEE Transactions on Magnetics, **27** 3539 (1991).

[8] A. Aharoni, "*Introduction to the theory of ferromagnetism*", Oxford Univ. Press, (1996);
A. Hubet, R. Schäffer "*Magnetic Domains: The Analisys of Magnetic Microstructures*", Springer Berlin Heidelberg, (1998).

[9] W. F. Brown, Jr., J. Appl. Phys. **39**, 993 (1968).

[10] G. Bertotti, J. Magn. Mag. Mat. **320**, 2436 (2008).

[11] K. Y. Guslienko, B. A. Ivanov, V. Novosad, Y. Otani, H. Shima, K. Fukamichi, J. Appl. Phys. **91**, 8037 (2002);
K. Y. Guslienko, B. A. Ivanov, V. Novosad, Y. Otani, H. Shima, K. Fukamichi, J. Appl. Phys. **96**, 4451 (2004);
K. Y. Guslienko, X. F. Han, D. J. Keavney, R. Divan, S. D. Bader, Phys. Rev. Lett **96**, 067205 (2006);
H. Höllinger, A. Killinger, U. Krey, J. Magn. Mag. Mat. **261** 178 (2003);
A. Killinger, H. Höllinger, U. Krey, J. Magn. Mag. Mat. **272-276** 724 (2003);
R. P. Boardman, H. Fangohr, S. J. Cox, A. V. Goncharov, A. A. Zhukov, A. J. de Groot, J. Appl. Phys. **95**, 7037 (2004);
A. Barman, S. Wang, J. Maas, A. R. Hawkins, S. Kwon, J. Bokor, A. Liddle, H. Schmidt, Appl. Phys. Lett **90**, 202504 (2007);
R. M. Abolfath, P. Hawrylak, Phys. Rev. **B 77** 165430 (2008).

[12] A.R. Pereira, Phys. Rev. B **71** (2005) 224404; J. App. Phys. **97** (2005) 094303;
A.R. Pereira, A.R. Moura, W.A. Moura-Melo, D.F. Carneiro, S.A. Leonel, P.Z. Coura, J. App. Phys. **101** (2007) 034310;
W.A. Moura-Melo, A.R. Pereira, R.L. Silva, N.M. Oliveira-Neto, J. App. Phys. **103** (2008) 124306;
R.L. Silva, R.C. Silva, A.R. Pereira, W.A. Moura-Melo, N.M. Oliveira-Neto, S.A. Leonel, P.Z. Coura, Phys. Rev. B **78**, 054423 (2008).

[13] R. P. Cowburn, D. K. Koltsov, A. O. Adeyeye, M. E. Welland, D. M. Tricker, Phys. Rev. Lett. **83**, 1042 (1999).

[14] H. Hoffmann, F. Steinbauer, J. Appl. Phys. **92**, 5463 (2002); K. Y. Guslienko, V. Novosad, J. Appl. Phys. **96**, 4451 (2004).

[15] F. Q. Zhu, G.W. Chern, O. Tchernyshyov, X.C. Zhu, J.G. Zhu, and C.L. Chien, Phys. Rev. Lett. **96**, 027205 (2006).

[16] V. P. Kravchuk, D. D. Sheka, Y. B. Gaididei, J. Appl. Phys. **310** 116 (2007).

[17] F. Q. Zhu, Adv. Mater. **16**, 2155 (2004).

[18] M. Bellegia, J. W. Lau, M. A. Schofield, Y. Zhu, S. Tandon, M. De Grael, J. Magn. Mag. Mat **301**, 131 (2006)

[19] P. Landeros, J. Escrig, D. Altbir, M. Bahiana, J. d'Albuquerque e Castro, J. Appl. Phys. **100**, 044311 (2006).

[20] J. Escrig, P. Landeros, D. Altbir, M. Bahiana, J. d'Albuquerque e Castro, Appl. Phys. Lett. **89**, 132501 (2006).

[21] W. Zhang, R. Singh, N. B-Ali, S. Haas, Phys. Rev. **B 77**, 14428 (2008).

[22] D. Goll, A. E. Berkowitz, h. N. Bertram, Phys. Rev. **B 70**, 184832 (2004);
D. Goll, S. Macke, A. E. Berkowitz, H. N. Bertram, Physica **B 372**, 282 (2006);
V. Russier, J. Appl. Phys. **105**, 073915 (2009);
D. Kong, S. Wang, C. Chen, J. Appl. Phys. **104**, 013923 (2008).

[23] R. P. Cowburn, M. E. Welland, Appl. Phys. Lett. **72**, 2041 (1998).

[24] M. Getzlaff, "*Fundamentals of Magnetism*", Springer Berlin Heidelberg, (2008);
R. Skomski, "*Simple Models of Magnetism*", Oxford Univ. Press, (2008).

[25] V. Raposo, J. M. Garcia, J. M. González, M. Vázquez, J. Magn. Mag. Mat. **222**, 227 (2000);
M. Bahiana, F. S. Amaral, S. Allende, D. Altbir, Phys. Rev. **B 74**, 174412 (2006);
D. Larose, J. Escrig, P. Landeros, D. Altbir, M. Vázquez, P. Vargas, Nanotechnology **18**, 415708 (2007).

[26] P. Landeros, S. Allende, J. Escrig, E. Salcedo, D. Altbir, E. E. Volgel, Appl. Phys. Lett. **90**, 102501 (2007);
J. Escrig, S. Allende, D. Altbir, M. Bahiana, Appl. Phys. Lett. **93**, 023101 (2008).

[27] M. Kläui, C. A. F. Vaz, L. Lopez-Diaz, J. A. C. Bland, J. Phys.: Condens. Matter **15**, R985 (2003);
C. A. F. Vaz, T. J. Hayward, J. Llandro, F. Schackert, D. Morecroft, J. A. C. Bland, M. Kläui, M. Laufenberg, D. Backes, U. Rüdiger, F. J. Castaño, C. A. Ross, L. J. Heyderman, F. Nolting, A. Locatelli, G. Faini, S. Cherifi, W. Wensdorfer, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 255207 (2007);
M. Rahm, J. Stahl, and D. Weiss, App. Phys. Lett. **87** (2005) 182107;
M. Rahm, J. Stahl, W. Wegscheider, D. Weiss, App. Phys. Lett. **85** (2004) 1553;
K. Kuepper, L. Bischoff, Ch. Akhmadaliev, J. Fassbender, H. Stoll, K.W. Chou, A. Puzic, K. Fauth, D. Dolgos, G. Schütz, B. Van Waeyenberge, T. Tyliszczak, I. Neudecker, G. Woltersdorf, C.H. Back, App. Phys. Lett. **90**, 062506 (2007).

[28] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Physik. Zeits. Sowjetunion **8**, 153 (1935); L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Ukr. J. Phys. **53**, 14 (2008).

[29] http://math.nist.gov/oommf

[30] http://code.google.com/p/amumag/

[31] http://math.nist.gov/oommf/contrib/simulmag/software/software.html

[32] http://www.cwscholz.net/Main/MagparDownload

[33] http://llgmicro.home.mindspring.com/

[34] J. d'Albuquerque e Castro, D. Altbir, J. C. Retamal, P. Vargas, Phys. Rev. Lett. **88**, 237202 (2002).

[35] P. Landeros, J. Escrig, D. Altbir, D. Laroze, J. d'Albuquerque e Castro, P. Vargas, Phys, Rev. **B 71**, 094435 (2005).

[36] S. Gupta, K. W. Murch, K. L. Moore, T. P. Purdy, D. M. Stamper-Kurn, Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 143201.

[37] A. D. Jackson, G. M. Kavoulakis, Phys. Rev. **A 74** (2006) 065601.

[38] F.-M. Liu, M. Green, J. Mat. Chem. **14**, 1526 (2004).

[39] J. Liu, H. Dai, J. H. Hafner, D. T. Colbert, R. E Smalley, S. J. Tans, C. Dekker, Nature **385**, 780 (1997).

[40] R. Lv, A. Cao, F. Kang, W. Wang, J. Wei, J. Gu, K. Wang, D. Wu, J. Phys. Chem. **C 111**, 11475 (2007);
H. Terronez, F. López-Urías, E. Muñoz-Sandoval, J. A. Rodíguez-Manzo, A. Zamudio, A. L. Elías, M. Terrones, Solid State Sciences **8**, 303 (2006);
R. Lv, F. Kang, W. Wang, J. Wei, J. Gu, K. Wang, D. Wu, Carbon **45**, 1433 (2007).

[41] C. P. Liu, H. B. Chen, J. W. Ding, Jour. Phys. Cond Matt. **20**, 015206 (2008).

[42] E. Yazgan, Emre Taşci, O. B. Malcioğlu, Ş. Erkoç., J. Mol. Struc. **681**, 231 (2004).

[43] L. Liu, G. Y. Guo, C. S. Jayanthi, S. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **88**, 217206 (2002).

[44] C. P. Liu, N. Xu, Phys. **B 403**, 2884 (2008).

[45] M. M. Hingorani, M. O'Donnell, Nature Rev. Mol. Cell. Biology **1**, 22 (2000).

[46] G. Ji, S. Tang, B. Xu, B. Gu, Y. Du, Chem. Phys. Lett. **379**, 484 (2003);
J. I. Martín, J. Nogués, K. Liu, J. L. Vicent and I. K. Schuller, J. Magn. Magn. Mater. **256**, 449 (2003);
S. Thongmee, H.L. Pang, J. Ding, J.Y. Lin, J. Magn. Mag. Mat **321**, 2712 (2009).

[47] J. Benoit, R. Dandoloff, Phys. Lett. **A 248** 439 (1998).

[48] V. L. Carvalho-Santos, A. R. Moura, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, Phys. Rev. **B 77**, 134450 (2008).

[49] J. A. Hernandez, A. K. T. Assis, Phys. Rev. **E 68** 046611 (2003).

[50] A. Mary, A. Dereux, T. L. Ferrell, Phys. Rev. **B 72** 155426 (2005).

[51] A. Mary, D. M. Koller, A. Hohenau, J. D. Krenn, A. Bouhelier, A. Dereux, Phys. Rev. **B 76** 245422 (2007).

[52] S. Zhao, S. Zhang, M. Xia, E. Zhang, X. Zuo, Phys. Lett. **A 331**, 238 (2004).

[53] V. L. Carvalho-Santos, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, "*Vortex-like Magnetization in Toroidal Nanomagnets*", XXXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada (2008);
V. L. Carvalho-Santos, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, "*Vortex-like Configurations in Toroidal Shell Nanomagnets*", Workshop on The Heisenberg Model: Past, Present and Future (2009);
V. L. Carvalho-Santos, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, "*On Ground-States in Toroidal Nanomagnets*", VII Escola Brasileira de Magnetismo (2009);
V. L. Carvalho-Santos, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, "*Configurações de Estado Fundamental em Nanomagnetos Toroidais*", Workshop UFV/UFJF: Teoria de Campos, Gravitação e Cosmologia (2009);
V. L. Carvalho-Santos, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, "*On Magnetization Gorund-Satates in Toroidal Nanomagnets*", XXXIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada (2010);
V. L. Carvalho-Santos, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, "*Stability of Magnetic Configurations in Hollow Toroidal Nanomagnets*", XXXIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada (2010).

[54] V. L. Carvalho-Santos, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, "*Miniaturization of Vortex-Comprising System Using Ferromagnetic Nanotori*", J. Appl. Phys. (2010) [aceito para publicação (doi: 10.1063/1.3487924)].

[55] C. A. Ross, F. J. Castaño, D. Morecroft, W. Jung, H. I. Smith, T. A. Moore, T. J. Hayward, J. A. C. Bland, T. J. Bromwich, A. K. P.-Long, J. Appl. Phys. **99**, 08S501, (2006);
M. Kläui, C. A. F. Vaz, J. A. C. Bland, E. H. C. P. Sinnecker, A. P. Guimarães, W. Wernsdorfer, G. Faini, E. Cambril, L. J. Heyderman, C. David, Appl. Phys. Lett. **84**, 951 (2004);
N. Dao, S. L. Whittenburg, IEEE Transactions on Magnetics **39**, 2525 (2003);
J. Guo, M. B. A. Jalil, IEEE Transactions on Magnetics **40**, 2122 (2004);
M. Kläui, C. A. F. Vaz, J. A. C. Bland, L. J. Heyderman, C. David, E. H. C. P. Sinnecker, A. P. Guimarães, J. Appl. Phys. **95**, 6639 (2004);
T. Yang, M. Hara, A. Hirohara, T. Kimura, Y. Otani, Appl. Phys. Lett. **90**, 022504 (2007);
E. Saitoh, M. Kawabata, K. Harii, H. Miyajima, T. Yamaoka, J. Appl. Phys. **95**, 1986 (2004).

[56] M. Schneider, H. Hoffman, J. Zweck, Appl. Phys. Lett. **77**, 2909 (2000);
K. Y. Guslienko, V. Novosad, Y. Otani, H. shima, K. Fukamichi, Appl. Phys. Lett. **78**, 3848 (2001);
M. Schneider, H. Hoffman, J. Zweck, Appl. Phys. Lett. **79**, 3113 (2001);
Z. Zhong, H. Zhang, X. Tang, Y. Jing, L. Jia, S. Liu, J. Magn. Mag. Mat. **321**, 2345 (2009).

[57] S. M. Rezende, "*Materiais e Dispositivos Eletrônicos*", Ed. Livraria da Física, 2ª ed., São Paulo, (2004).

[58] G. Leon, *"The Story of Eletricity"*, Dover, New York, (1988).

[59] G. J. B. Rodriguez, Revista Brasileira de Ensino de Física **20** (1998) 315.

[60] I. S. Oliveira e V. L. B. Jesus, *"Introdução à Física do Estado Sólido"*, Livraria da Física Editora, São Paulo, (2005).

[61] C. Kittel, *"Introduction to Solid State Physics"*, 7th ed., John Wiley and Sons, Inc., New York, (1996)

[62] L. H. Ryder, *"Quantum Field Theory"*, 2nd. ed., Cambridge University Press, (1996).

[63] G.S. Milagre, W. A. Moura-Melo, Phys. Lett. **A 368** (2007) 155.

[64] L.R.A. Belo et al, Phys. Lett. **A 365** (2007) 463.

[65] V. L. Carvalho-Santos, *"Soluções Topológicas de Spins no Toro*, Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa (2008).

[66] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *"Table of Integral, Series and Products"*, Academic Press, 7^{th} ed., (2007).

[67] J. Segura, A. Gil, Comp. Phys. Comm. **124** 104 (2000);
J. Segura, A. Gil, Comp. Phys. Comm. **139**, 186 (2001). The Fortran subroutine itself is available at **http://www.cpc.cs.qub.ac.uk/cpc/summaries/ADKV**.

[68] P. Morse, H. Feshbach, "*Methods of Theoretical Physics*", Mc Graw-Hill, 1^{st} ed., New York, (1953).