

ERIKA APARECIDA DA SILVA OLIVEIRA

**A INFLUÊNCIA DA INTERAÇÃO ENTRE SEGUNDOS
VIZINHOS NA TERMODINÂMICA E NA DINÂMICA DE
REDES DE SKYRMIONS**

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

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2017

**Ficha catalográfica preparada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Câmpus Viçosa**

T

O48i
2017

Oliveira, Erika Aparecida da Silva, 1978-

A influência da interação entre segundos vizinhos na termodinâmica e na dinâmica de redes de skyrmions / Erika Aparecida da Silva Oliveira. – Viçosa, MG, 2017.
xiv, 111f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Inclui apêndices.

Orientador: Afranio Rodrigues Pereira.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f.104-111.

1. Física. 2. Magnetismo. 3. Termodinâmica. 4. Monte Carlo, Método de. I. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Física. Programa de Pós-graduação em Física. II. Título.

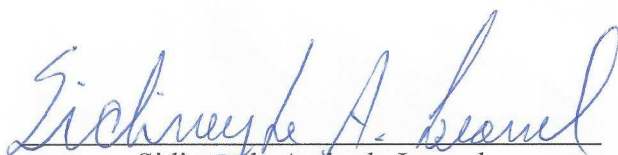
CDD 22. ed. 538

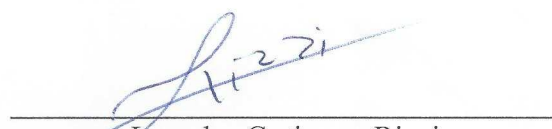
ERIKA APARECIDA DA SILVA OLIVEIRA

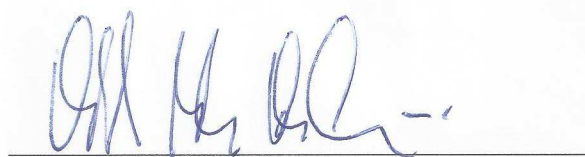
**A INFLUÊNCIA DA INTERAÇÃO ENTRE SEGUNDOS VIZINHOS
NA TERMODINÂMICA E NA DINÂMICA DE REDES DE SKYRMIONS**

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

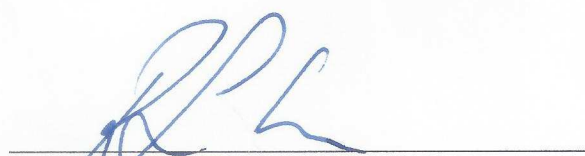
APROVADA: 03 de abril de 2017.

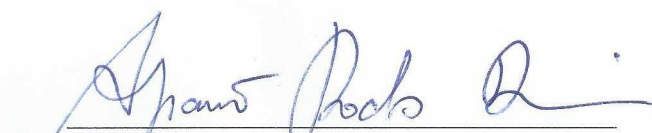

Sidiney de Andrade Leonel


Leandro Gutierrez Rizzi


Oswaldo Monteiro Del Cima


Clodoaldo Irineu Levartoski de Araujo


Ricardo Lopes da Silva
(Coorientador)


Afranio Rodrigues Pereira
(Orientador)

À minha família que embarcou neste sonho comigo para torná-lo realidade.

“Por vezes sentimos que aquilo que fazemos não é senão uma gota de água no mar.

Mas o mar seria menor se lhe faltasse uma gota.”

Madre Teresa de Calcutá (1910-1997)

AGRADECIMENTOS

Primeiramente eu agradeço a Deus que me manteve firme na caminhada.

Agradeço imensamente ao meu amado esposo Gilmar, por sempre caminhar ao meu lado nas jornadas que escolho trilhar, me apoiando acima de tudo, e aos nossos filhos, Matheus e Tais, que me animam a continuar em frente sempre que vejo os olhinhos de admiração e por quem cheguei até aqui. Ensina-mos com exemplos e, por isso, o exemplo que procuro dar é o de persistência, dedicação e amor pelo que se faz, sem abrir mão do convívio familiar.

Ao meu orientador Afranio, a quem tanto admi-ro, vou ser sempre grata por todas as discussões e ensinamentos, mas, principalmente, por me ajudar a desenvolver a independência, tão necessária daqui por diante e aos meus co-orientadores, os professores Winder A. Moura Melo, Ricardo Lopes da Silva e, extra oficialmente, Rodrigo Costa da Silva, pela parceria, pelos ensinamentos e contribuições dadas para a realização deste trabalho. Agradeço ao Ifes, por me liberar, e aos professores da Coordenadoria de Física que assumiram minhas aulas pra que eu pudesse me capacitar.

Aos professores do departamento de Física, especialmente ao Sidinei que contribuiu muito em momentos específicos do meu trabalho e aos servidores do departamento de Física da UFV, em especial àquela que se tornou minha amiga, Lauriete, sempre prestativa, boa ouvinte e tão solícita, inteligente e de bom gosto.

A todos os colegas da pós-graduação, em especial ao pessoal da sala 212, pelo acolhimento, pelos momentos de descontração, boa convivência e pela ajuda nos estudos. À minha mãe Edith e aos meus sogros Eva e Geraldo, que sempre correm em meu socorro quando que preciso e, enfim, agradeço à Universidade Federal de Viçosa e seus servidores, que sempre trabalham para manter sua qualidade.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	vii
RESUMO	xi
ABSTRACT	xiii
1 Magnetismo	5
1.1 Origem	5
1.2 Fases Magnéticas	8
1.2.1 Materiais diamagnéticos	10
1.2.2 Materiais paramagnéticos	11
1.2.3 Magnetismo coletivo	12
1.3 Interações Magnéticas	16
1.3.1 A interação de troca direta	16
1.3.2 A interação de supertroca	18
1.3.3 A interação de Dzyaloshinskii-Moriya	20
2 Skyrmions	24
2.1 Modelos Teóricos	24
2.1.1 O modelo sigma não linear	24
2.1.2 Modelos para magnetos quirais	30
2.1.3 Termodinâmica típica de magnetos quirais	34
2.1.4 Dinâmica típica de magnetos quirais	38

3	Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos	43
3.1	Hamiltoniana utilizada	43
3.2	Métodos Utilizados	46
3.2.1	O Método de Monte Carlo	46
3.2.2	O Algoritmo de Metropolis	49
3.2.3	Grandezas Termodinâmicas	51
3.3	Resultados e Discussão	52
3.3.1	Considerando apenas interações de troca até segundos vizinhos .	52
3.3.2	Considerando apenas interações DM até segundos vizinhos . . .	64
3.3.3	Considerando interações de troca e DM entre segundos vizinhos	71
3.4	Conclusões	72
3.5	Perspectivas	73
4	Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos	74
4.1	Hamiltoniana Utilizada	74
4.2	Métodos Utilizados	76
4.2.1	A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert	76
4.2.2	Equações de movimento	80
4.2.3	O método Runge-Kutta de 4 ^a ordem	82
4.3	Resultados e Discussão	84
4.3.1	Influência de vacâncias na rede	85
4.3.2	Dinâmica da rede livre de impurezas e vacâncias	88
4.4	Conclusões	90
4.5	Perspectivas	91
	Conclusões e Perspectivas	92
A	Dedução da Interação de Troca de Heisenberg	94
B	Dedução da Interação de Dzyaloshinskii-Moriya	98
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	104

LISTA DE FIGURAS

1	Diagrama de fases típico de magnetos quirais	2
2	Fases Helicais, cônicas e skyrmiônicas	3
1.1	Representação esquemática de um paramagneto	11
1.2	Representação esquemática de um ferromagneto	14
1.3	Representação esquemática de um ferrimagneto	14
1.4	Representação esquemática de um antiferromagneto	15
1.5	Susceptibilidade magnética de materiais magnéticos	15
1.6	Representação esquemática da estrutura cristalina do antiferro MnO . .	15
1.7	Representação esquemática de uma interação de troca direta em um material antiferromagnético	17
1.8	Representação esquemática de uma interação de supertroca	18
1.9	Representação esquemática da célula unitária de materiais com estrutura cristalina $B20$	19
1.10	Estrutura de uma perovskita, ABO_3 , na fase (a)centro-simétrica e (b) não centro-simétrico	21
1.11	Regras de Moriya para a determinação do vetor DM	22
2.1	Exemplo de topologia: equivalência topológica entre uma rosquinha e uma xícara	27
2.2	Exemplo de topologia: objetos topologicamente equivalentes separados por gênero	28
2.3	Corte transversal de exemplos de mapeamentos de $S_2^{fis} \rightarrow S_2^{int}$ com (a) $Q=0$, (b) $Q=1$ e (c) $Q=2$	29

2.4	Esquema de projeção estereográfica	29
2.5	Exemplos de distribuição da magnetização de vórtices isolados de soluções topológicas com $Q = 1$ e $Q = 2$	29
2.6	Representação de uma projeção estereográfica $3D$	30
2.7	Estruturas skyrmiônicas para diferentes valores de vorticidade (m) e helicidade (γ)	31
2.8	Rede de skyrmions em FeGe	34
2.9	Diagramas de fase de estruturas magnéticas e texturas de spin em um filme de $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}\text{Si}$	36
2.10	Diagrama de fases teórico A_2 em $T = 0$ para um magneto quiral descrito pela eq. (2.14) com $B = (0, 0, B)$	37
2.11	Calor específico e diagrama diagrama de fase magnética típico para o $MnSi$	38
2.12	Representação esquemática do movimento do elétron através de uma textura magnética skyrmiônica	39
2.13	Representação esquemática das forças que atuam em um skyrmion com origem na corrente elétrica aplicada	41
2.14	Velocidade longitudinal induzida por correntes em função da densidade de corrente j em magnetos quirais	41
3.1	Configurações de spin no espaço real de redes em $T = 0.01J/K_B$, para diferentes intensidades de interação entre segundos vizinhos sob campo $B = 0.0J$	53
3.2	Configuração de spin no espaço real da rede com $J_2/J_1 = 0.6$ em $T =$ $0.01J/K_B$ sob campo $B = 0.0J$	54
3.3	Rede no espaço real com $J_2/J_1 = 0.8$ em diferentes temperaturas na ausência de campo magnético	55
3.4	Grandezas termodinâmicas para magnetos quirais com diferentes inten- sidades de interação de troca entre segundos vizinhos na ausência de campo magnético	56

3.5	Redes no espaço real (temperatura $T = 0.01J/K_B$) com diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B = 1.0(J/K_B)$	57
3.6	Skyrmion de Bloch na rede com $J_2/J_1 = 1.0$ sob campo magnético externo $B = 1.0(J/K_B)$	58
3.7	Grandezas termodinâmicas para magnetos quirais com diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B = 1.0(J/K_B)$	59
3.8	Redes no espaço real com diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B = 2.0(J/K_B)$ em temperatura $T = 0.01J/K_B$	60
3.9	Grandezas termodinâmicas para magnetos quirais com diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B = 2.0(J/K_B)$	62
3.10	Redes de spin no espaço real com diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B = 3.0(J/K_B)$ em temperatura $T = 0.01J/K_B$	63
3.11	Diagrama de fases $(J_2/J_1) \times B$ para $D_2/J_1 = 0$ em $T = 0.1J/K_B$. . .	63
3.12	Redes de spins no espaço real com diferentes intensidades de interação DM entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo nulo em $T = 0.01J/K_B$	65
3.13	Grandezas termodinâmicas para magnetos quirais com diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo nulo	66
3.14	Redes de spins no espaço real com diferentes intensidades de interação de Dzyaloshinskii-Moriya entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B_z = 2.0$ em $T = 0.01J/K_B$	67
3.15	Grandezas termodinâmicas de magnetos quirais com diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B_z = 2.0$	68

3.16	Redes de spins no espaço real com diferentes intensidades de interação de Dzyaloshinskii-Moriya entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B_z = 3.0$ em $T = 0.1J/K_B$	69
3.17	Grandezas termodinâmicas de magnetos quirais com diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B_z = 3.0$	70
3.18	Diagrama de fases $(D_2/J_1) \times B$ para $J_2/J_1 = 0$ em $T = 0.1J/K_B$. . .	71
3.19	Diagrama de fases $(D_2/J_1) \times B$ para (a) $J_2/J_1 = 0.1$ e (b) $J_2/J_1 = -0.1$ em $T = 0.1J/K_B$	72
4.1	Método de Euler	83
4.2	Energia em função do tempo para redes com 40×80 spins na ausência de vacâncias e de corrente polarizada de spins	84
4.3	Zoom de uma configuração de spins no espaço real de um magneto quiral com $J_2/J_1 = 0.2$ sob uma corrente $J_x = 0.03\kappa$ com um percentual de vacâncias $\rho = 1\%$	85
4.4	Número médio de skyrmions em função do tempo para uma rede com 40×80 spins e $J_2/J_1 = 0.2$, sob uma corrente $J_x = 0.03\kappa$ com um percentual de vacâncias $\rho = 1\%$	86
4.5	Zoom de uma configuração de spins no espaço real de ummagneto quiral com $J_2/J_1 = 0.2$ sob uma corrente $J_x = 0.03$ com um percentual de vacâncias $\rho = 1\%$	87
4.6	$v_{\parallel}$ dos skyrmions em função da corrente aplicada para redes com diferentes interações entre segundos vizinhos livre de vacâncias	88
4.7	Número e raio médio dos skyrmions para redes com diferentes interações entre segundos vizinhos livre de vacâncias	89
4.8	$v_{\perp}$ dos skyrmions em função da corrente aplicada para redes com diferentes interações entre segundos vizinhos livre de vacâncias	90

RESUMO

OLIVEIRA, Erika Aparecida da Silva, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, abril de 2017. **A influência da interação entre segundos vizinhos na termodinâmica e na dinâmica de redes de Skyrmions.** Orientador: Afranio Rodrigues Pereira. Coorientadores: Winder Alexander de Moura Melo e Ricardo Lopes da Silva.

Nesta tese estudamos a influência de segundos vizinhos na termodinâmica e na dinâmica de redes de skyrmions. Na primeira parte usamos técnicas de Monte Carlo para estudar a termodinâmica de redes de spins quadradas com interações quirais. Como principal resultado, através do cálculo do calor específico, da susceptibilidade magnética longitudinal e do número de skyrmions na rede, obtivemos o diagrama de fase, interação de Dzyaloshinskii-Moriya entre segundos vizinhos versus campo magnético, para diferentes intensidades de interações de troca entre segundos vizinhos. Além de reproduzir resultados da literatura, quando as interações com os segundos vizinhos é zero, nossos resultados mostram que sistemas com interações antiferromagnéticas mais fortes, entre segundos vizinhos, apresentam a fase skyrmiônica num intervalo maior de campo magnético. Essas interações podem fornecer ainda outras contribuições importantes, como alteração no período dos estados helicais e parâmetro de rede das redes de skyrmions, bem como influenciam diretamente o raio dos skyrmions. Na segunda parte desta tese estudamos a evolução temporal de redes de skyrmions na presença de correntes polarizadas de spins, na rede limpa e com vacâncias, utilizando as equações de Landau-Lifshitz-Ginzburg. Nossos estudos apontam que sistemas com uma concentração grande de impurezas (1%) atrapalham o deslocamento dos skyrmions, atuando como forças de “pinning”, podendo levar à destruição de skyrmions alterando a forma

hexagonal original da rede. Além disso, detectamos uma velocidade transversal à corrente aplicada, que corresponde à uma contribuição de origem topológica ao efeito Hall, ligeiramente maior para os sistemas em que a interação com segundos vizinhos é maior, indicando que em tais sistemas possa ser mais fácil a detecção de tal efeito.

ABSTRACT

OLIVEIRA, Erika Aparecida da Silva, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, April, 2017. **The influence of interactions between second neighbors in thermodynamic and dynamic of skyrmion lattices.** Adviser: Afranio Rodrigues Pereira. Co-advisers: Winder Alexander Moura Melo and Ricardo Lopes da Silva.

In this thesis we have studied the influence of second neighbors in thermodynamics and dynamics of skyrmions lattices. In the first part we have investigated skyrmion lattices and helical states in two-dimensional chiral magnets. We have performed Monte Carlo simulations and considered the Heisenberg exchange and DM interactions until second neighbor. Beyond reproduce previous studies, where second neighbours interactions are taken to be zero, these new terms induce very different and interesting effects on the helical and skyrmion phases as compared to the usual studies which consider only first neighbor interactions. Orientations and dimensions of the stripes can be changed drastically as second neighbors interactions intensity are varied (for the same external magnetic field). On the other hand, the shapes of the skyrmion crystals are also strongly affected by these new couplings as skyrmions change their sizes, positions and so on. The main aim was to find a phase diagram Dzyaloshinskii-Moriya interaction versus magnetic field for some values of exchange interaction between second neighbors. These diagrams show different windows for skyrmion lattices and, in addition, they emphasises that the antiferromagnetic interactions between second neighbors favour skyrmion crystals with small skyrmion lattice constant. In the second part of this thesis, we have studied the lattice time evolution in the presence of polarized spin currents, with and without vacancies. We have used Runge-Kutta fourth order to

solve the Landau-Ginzburg-Lifshitz's equation for our systems. Our studies indicate that big concentrations of impurities hamper skyrmion movement, acting like pinning forces, which can lead to the destruction of skyrmions, changing original hexagonal skyrmion lattice. We have detected a transversal velocity, that is a contribution with topological origin to Hall effect, slightly bigger for systems with bigger second neighbor interactions, indicating that in such systems contributions to topological Hall effect would be more easy to be detected.

Introdução

Sistemas magnéticos são sistemas de muitos corpos extremamente estudados em Física da Matéria Condensada e exibem diversos tipos de excitações coletivas como sólitons, vórtices, skyrmions, etc. Nestes sistemas, geralmente, essas excitações são criadas devido a movimentos coletivos e se comportam como partículas, sendo chamadas “quase-partículas”. Neste trabalho estamos interessados particularmente em sistemas magnéticos cujas interações levem à formação de redes de skyrmions.

Os skyrmions foram originalmente introduzidos como modelo em Física Nuclear para descrever uma configuração de quase-partícula localizada em Teoria de Campos [1]. Skyrme mostrou que excitações (quase-partículas) de campos contínuos existem na presença de certas interações não-lineares. Assim, skyrmions são uma característica de modelos contínuos não-lineares que alcançam desde escalas microscópicas, até escalas cosmológicas [2]. Logo depois, Belavin e Polyakov [3] mostraram que os skyrmions, além de descrever mésons e bárions na Cromodinâmica Quântica, através de uma aproximação em baixas energias na Teoria de Yang-Mills, também são soluções para o Modelo Sigma Não Linear, que aparece como uma aproximação contínua semi-clássica para sistemas ferro e antiferromagnéticos. Desde então os skyrmions passaram a ser chamados também de sólitons de Belavin-Poliakov. Basicamente, em sistemas magnéticos, um skyrmion é uma textura de spins topológica em que os spins apontam em todas as direções envolvendo uma esfera [3,4]. Desde então a palavra skyrmion tem sido usada para denominar objetos matemáticos similares, excitações com carga topológica 1, em muitos contextos diferentes. Skyrmions foram encontrados em condensados de Bose-Einstein [5–12], cristais líquidos [13], superfluidos [14] e em magnetos de Hall Quântico [15–17]. Podemos citar como mecanismos que geram redes

Introdução

de skyrmions: interação dipolar magnética de longo alcance [18], interações quirais, conhecidas como interações de Dzyaloshinskii-Moriya (DM) [19], interações de troca frustradas [20] e interação de trocas de quatro-spins [21,22]. As interações quirais são induzidas em materiais com falta de simetria de inversão [23,24], como ocorre em materiais magnéticos com redes não centro-simétricos como MnSi and $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ e em filmes magnéticos ultra-finos em que a simetria é quebrada pela presença de interfaces não equivalentes [25,26].

Estudos de espalhamentos de neutrons e outros métodos como microscopia eletrônica de transmissão de Lorentz têm confirmado a cristalização de skyrmions em uma pequena região do diagrama de fases temperatura $\times$ campo magnético (T-B) próxima à temperatura crítica de magnetos helicais tridimensionais MnSi [27,28] e $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ [29,30]. Basicamente, o diagrama de fases apresenta três regiões especiais: estado helical, cônico e a chamada fase “A”. A figura 1 mostra um diagrama típico deste tipo de material.

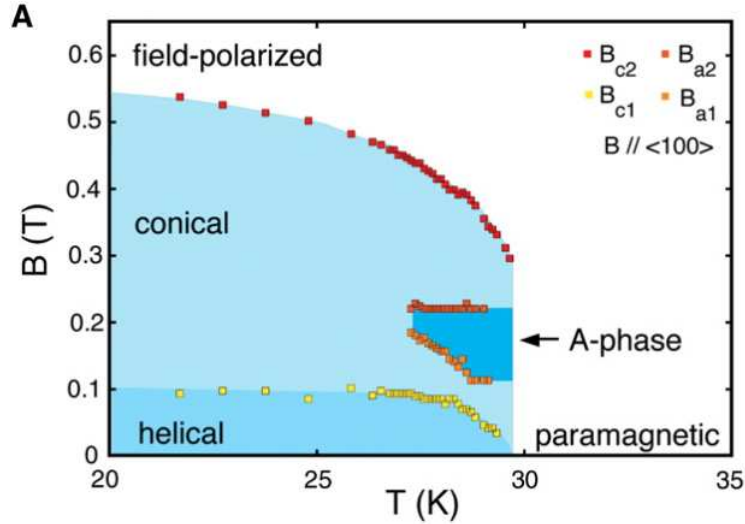


Figura 1: Diagrama de fases típico de magnetos quirais [31].

Abaixo de um campo crítico B_{c1} , o estado fundamental é um estado com uma modulação helimagnética, chamado **estado helical**. O vetor de onda $\vec{q}$ tem uma magnitude fixa, mas a direção dos spins varia no plano que os contém e que é perpendicular ao vetor $\vec{q}$. Em magnetos quirais tridimensionais, para campos dentro de uma faixa

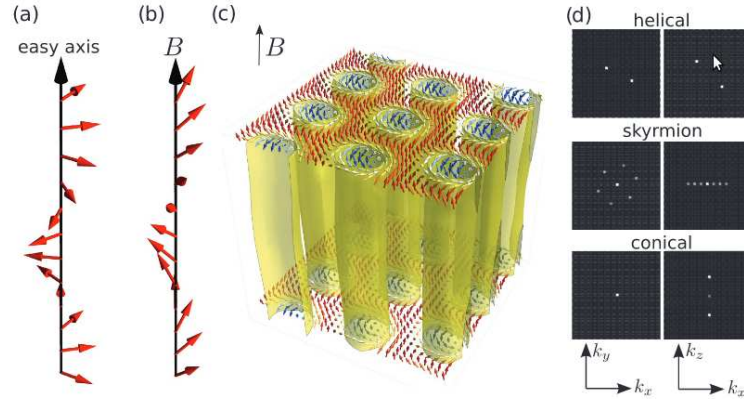


Figura 2: a) Esquema de magnetização no estado helical; b) Esquema de magnetização no estado cônico; c) Esquema de magnetização na fase skyrmiônica (a magnetização na direção do campo magnético nos tubo amarelos é zero) e d) Padrões de intensidade de Bragg projetados no plano (001) (que é $\perp B$)(*esquerda*)e(010)*plano(direita)* [32].

$B_{c1} < B < B_{c2}$, há uma modulação helical estabilizada paralela ao campo magnético, formando o chamado **estado cônico** e em uma pequena região, logo abaixo de T_c , há a chamada **fase A**, onde a modulação helical é perpendicular ao campo magnético aplicado. Esta **fase A** foi identificada como sendo uma fase de redes de skyrmions [29]. A figura 2 mostra um esquema da magnetização nestes três tipos de estados. Em filmes de materiais quirais a direção vetor de onda é confinada dentro do plano da rede porque a espessura da amostra é menor que o comprimento de onda helical. Contudo, quando o campo magnético é perpendicular ao plano, uma rede hexagonal de skyrmions aparece em uma grande região do diagrama de fases com espaçamento de rede da mesma ordem que o período helical, suprimindo o estado cônico. Assim, a fase skyrmiônica pode permanecer estável mesmo para baixas temperaturas [33,34].

Existe uma grande expectativa quanto ao uso de skyrmions em aplicações de spintrônica como equipamentos de armazenamento de dados baseados no movimento controlado destas quase-partículas. Corroborando para este quadro temos o fato de skyrmions já terem sido observados em espaço real [30,33], à temperatura ambiente [35] e estudos teóricos mostram que eles poderiam ser excitados por aquecimento local [36]. Além disso, a corrente de spin polarizada necessária para movê-los é muito menor que a necessária para mover paredes de domínios [37–40]. Em geral, estudos envolvendo

Introdução

apenas primeiros vizinhos têm sido usadas para simular magnetos quirais. No entanto, no ferromagnetismo fraco de materiais como $\alpha - \text{Fe}_2\text{O}_3$, por exemplo, as interações de troca antiferromagnéticas e interações DM são maiores para terceiros e quartos vizinhos [41], e em materiais como RMnO_3 , $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_8$, CuFeO_2 e $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{Zn}_2\text{Fe}_{12}\text{O}_{22}$, a competição entre as interações de trocas entre primeiros (J_1) e segundos vizinhos (J_2) têm um papel importante na aparência das estruturas magnéticas espirais exibidas [42]. Assim, neste trabalho, acrescentamos interações de troca e interações DM entre segundos vizinhos, apesar de a aproximação de segundos vizinhos precisar de uma interação spin-órbita muito forte para descrever estados helicais e skyrmiônicos em algumas estruturas $B20$ como MnGe [31].

Os objetivos centrais deste trabalho são: 1. Estudar sistemas magnéticos em 2 dimensões em que apareçam redes de skyrmions, usando o modelo de Heisenberg acrescido da interação de Dzyaloshinskii-Moriya; 2. Estudar a influência de segundos vizinhos na termodinâmica de redes de skyrmions; 3. Através do cálculo das grandezas termodinâmicas como calor específico, susceptibilidade magnética e número de skyrmions, montar diagramas de fases para diferentes intensidades de interações entre os segundos vizinhos; 4. Analisar a evolução temporal de redes de skyrmions; 5. Acrescentar corrente polarizada de spin para verificar o comportamento das redes de skyrmions na presença de tais correntes.

Esta tese está dividida da seguinte forma: no capítulo 1 apresentamos uma breve revisão sobre materiais magnéticos e suas propriedades e interações magnéticas utilizadas no nosso modelo para descrever estes materiais; No capítulo 2 fazemos uma revisão dos sistemas que exibem redes de skyrmions e suas características. No capítulo 3 apresentamos uma revisão bibliográfica de todas as técnicas computacionais utilizadas para o estudo da termodinâmica dos sistemas propostos, bem como resultados obtidos e discussão dos resultados. No capítulo 4 são apresentadas as técnicas utilizadas no estudo da dinâmica de alguns sistemas, bem como os resultados obtidos e a discussão dos resultados deste estudo. Por fim, na sequência, fazemos um breve resumo dos trabalhos desenvolvidos nesta tese com as conclusões e perspectivas para novos trabalhos.

Capítulo 1

Magnetismo

Neste capítulo fazemos uma breve revisão bibliográfica sobre magnetismo. Nele abordamos a origem do magnetismo nos materiais em geral, principais características de cada fase magnética e, finalmente, descrevemos as interações magnéticas usadas nesta tese para descrever os magnetos quirais.

O magnetismo vem sendo aplicado desde seu descobrimento e muitos dispositivos atuais têm seu funcionamento baseados nele, como é o caso, por exemplo, de dispositivos de armazenamento de informação, como os discos rígidos de computadores, que armazenam uma grande quantidade de informação em um espaço relativamente pequeno. No entanto, a busca por dispositivos cada vez menores, com maior capacidade de armazenamento, mais rápidos e baratos justificam novas pesquisas envolvendo magnetismo e desenvolvimento de novos materiais magnéticos em todo o mundo. Assim, o magnetismo ainda é um ramo de pesquisa muito fértil, sobre o qual se tem muita expectativa. Neste capítulo serão discutidas brevemente a origem de alguns tipos de interações magnéticas e algumas propriedades de materiais magnéticos.

1.1 Origem

Há muito tempo percebeu-se que alguns materiais quando colocados em um campo magnético adquirem um momento magnético e, desde então, procura-se com-

1. Magnetismo

preender como se comporta a magnetização desses materiais e encontrar uma descrição quantitativa dessa magnetização em função de alguns parâmetros específicos. Nosso conhecimento atual sobre magnetismo está intimamente relacionado com o spin, que pode ser entendido como um momento magnético [43] e é uma característica intrínseca da partícula assim como sua carga elétrica e sua massa. Essa propriedade intrínseca da partícula não tem análogo clássico e, juntamente com o Princípio da Exclusão de Pauli, que é um outro fenômeno puramente quântico, podem ser considerados os principais responsáveis pelas propriedades magnéticas da matéria [44]. Façamos uma análise mais detalhada da origem do magnetismo considerando o átomo de hidrogênio.

Consideremos o hidrogênio como sendo formado por uma carga negativa leve, o elétron, orbitando uma carga positiva pesada, o núcleo. Assim, a energia potencial do átomo de hidrogênio é simplesmente a energia de interação Coulombiana entre o elétron e o núcleo. Da equação de Schrödinger ($\mathcal{H}\Psi = E\Psi$) temos que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\Psi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\Psi = E\Psi$$

onde m_e e e são a massa e a carga do elétron, respectivamente, e ϵ_0 é a permissividade elétrica do vácuo. A solução desta equação que pode ser encontrada na referência [45], é dada por:

$$\Psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)\mathcal{Y}_{lm_l}(\theta, \phi)$$

onde r é a distância do elétron ao núcleo e θ e ϕ são coordenadas angulares. Vamos nos ater apenas ao que é importante ressaltar neste momento. Para que a função de onda tenha significado físico, são permitidos apenas alguns valores para os números n , l e m_l , por isso eles são chamados de números quânticos. Os valores são os seguintes:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

O índice n é chamado de número quântico principal, l número quântico de momento

1. Magnetismo

angular e m_l número quântico magnético. Estes números determinam muitas propriedades do elétron no átomo. O número n determina a energia do nível eletrônico, dada por:

$$E_n = - \left(\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \right) \frac{1}{n^2}$$

onde $n = 1, 2, 3, \dots$, e, embora não determine diretamente propriedade magnética no material, ele controla quais valores l e m_l podem assumir. O número quântico orbital l determina o momento angular orbital do elétron, L , cujo módulo é dado por:

$$|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

onde os valores $0, 1, 2, 3, \dots$, correspondem aos orbitais s, p, d e f . Observe que elétrons no orbital s , $\vec{L} = 0$, não contribuem com momento angular orbital para o momento magnético atômico, o que explica, em parte, porque alguns átomos não apresentam resposta a um campo magnético.

O módulo da componente do momento angular orbital paralela a um campo magnético externo também é quantizada sendo determinada pelo número quântico magnético m_l , que pode assumir valores inteiros $-l, -l+1, \dots, l-1, l$. Assim, a componente do momento angular orbital paralela ao campo externo pode assumir $2l+1$ valores distintos, sendo seu módulo dado por $|m_l\hbar|$. O orbital p tem componentes paralelas ao campo externo dadas por $m_l = \hbar, 0$ e $-\hbar$, que são sempre menores que o momento angular orbital que, no caso do orbital p , é $|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar = \sqrt{2}\hbar$, o que implica que o vetor momento angular orbital precessa em torno do vetor campo magnético, nunca se alinhando completamente com a direção do campo externo aplicado.

Se, ao invés de se resolver a equação de Schrödinger, resolvermos a equação relativística de Dirac, dois outros números quânticos aparecem naturalmente para especificar completamente o estado quântico de um elétron em um átomo, sendo eles o número quântico de spin s que, para o elétron tem sempre valor $\frac{1}{2}$, determina o

1. Magnetismo

chamado momento angular de spin $\vec{S}$, cujo módulo é dado por:

$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

observe que esta expressão é análoga à expressão anterior para o momento angular orbital $\vec{L}$ e o número quântico final m_s , chamado de número quântico magnético de spin, tem função é análoga à do número quântico magnético m_l , porém para o momento angular de spin. Ele aparece porque o momento angular de spin $\vec{S}$ também é quantizado sob um campo magnético, com m_s assumindo os valores $-s, -s+1, \dots, s-1, s$. Assim, no caso do elétron, $m_s = +\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$. A componente do momento angular de spin na direção do campo magnético aplicado é dada por $m_s\hbar = \pm\frac{\hbar}{2}$, o que indica que a componente do momento angular de spin na direção do campo magnético é menor que o módulo do momento angular de spin $\vec{S}$, implicando que o vetor momento angular de spin também não se alinha perfeitamente à direção do campo aplicado, mas sim precessiona em torno desta direção.

Como um resultado destes momentos magnéticos de spin e orbital, podem surgir interações relevantes em alguns sistemas físicos. Observe, um elétron com momento angular orbital se comporta como uma corrente elétrica em uma espira, tendo, portanto, um campo magnético associado a essa corrente. Como o momento magnético de spin do elétron interage com um campo magnético, o momento magnético de spin interage com o momento magnético devido ao movimento orbital. Essa interação é a chamada Interação Spin-Órbita e, conforme será explicado posteriormente, resulta num tipo de interação chamada “*Interação de Dzyaloshinskii-Moriya*”, que é uma das interações responsáveis pelo surgimento de um tipo de quasi-partícula denominada “*Skyrmion*”, presente em sistemas com características específicas.

1.2 Fases Magnéticas

Conforme visto no tópico anterior, o magnetismo tem origem atômica. Os momentos magnéticos dos átomos encontram-se alinhados numa mesma direção, em pequenas regiões do material, formando o que chamamos de domínios magnéticos. Em

1. Magnetismo

alguns materiais os momentos magnéticos destes domínios estão mais alinhados, resultando em uma magnetização resultante diferente de zero, em outros estão orientados aleatoriamente, resultando em magnetização nula. Vamos iniciar esse estudo para caracterização dos materiais definindo algumas grandezas fundamentais. Ao se aplicar um campo magnético $\vec{H}$ sobre um material, a densidade de fluxo magnético em seu interior, chamada de indução magnética $\vec{B}$, determina a resposta deste material ao campo externo aplicado. Em alguns casos a indução $\vec{B}$ é linear com $\vec{H}$, mas em geral, a relação entre essas grandezas é bem complicada. A equação que relaciona as duas grandezas é dada por:

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

onde μ_0 é a permeabilidade magnética do meio e $\vec{M}$ é a densidade volumétrica de momentos magnéticos do material, ou seja, $\vec{M}$ é uma propriedade do material que depende tanto dos momentos que constituem o material quanto da forma que esses momentos de dipolo interagem entre si, de maneira que as propriedades magnéticas são definidas de acordo com a resposta do material ao campo magnético aplicado. A susceptibilidade magnética/volume é uma função resposta de sistemas magnéticos e corresponde à resposta do material magnético à aplicação de um campo magnético externo. Quando a magnetização M é paralela ao campo magnético externo $\vec{H}$ aplicado, ela pode ser expressa pela seguinte equação:

$$\chi = \frac{|\vec{M}|}{|\vec{H}|}$$

Essa resposta do material à aplicação de um campo magnético externo, ou seja, a susceptibilidade magnética, pode ser usada para classificar a fase do material. Um material magnético, de acordo com a susceptibilidade, pode apresentar basicamente em três comportamentos: Diamagnetismo, Paramagnetismo ou Magnetismo Coletivo, que ocorre em uma determinada faixa de temperatura. O material apresenta paramagnetismo se $\chi > 0$ ou diamagnetismo se $\chi < 0$. No entanto, alguns materiais não se enquadram nessa classificação, pois a magnetização não é proporcional ao campo magnético aplicado. Ela pode ser, por exemplo, não nula quando $H = 0$, apresentando

1. Magnetismo

neste caso o chamado Magnetismo Coletivo. O material com Magnetismo Coletivo pode apresentar três comportamentos: Ferromagnetismo, Ferrimagnetismo e Antiferromagnetismo. Em geral estes materiais apresentam duas características em comum: uma curva de histerese e uma dependência na temperatura. Todo material ferromagnético se torna paramagnético acima de uma determinada temperatura crítica [46]. No próximo tópico exploraremos um pouco mais cada tipo de comportamento, visto que este comportamento/característica permite a construção do diagrama de fases do material.

1.2.1 Materiais diamagnéticos

Diamagnetismo é uma propriedade de todos os materiais, mas que só é relevante na ausência de paramagnetismo ou magnetismo coletivo [47]. Podemos citar alguns exemplos de diamagnetos na temperatura ambiente: o bismuto, o cobre, a prata e o chumbo [48]. Basicamente o diamagnetismo é uma alteração no movimento orbital dos elétrons quando um campo magnético externo é aplicado [49]. Esta é uma propriedade que todos os materiais que têm cargas em movimento apresentam quando sujeitas a um campo externo ou à sua variação. Esta resposta é como uma reação das cargas em movimento que procuram cancelar qualquer variação do fluxo magnético, lei de Lenz, seja em nível atômico ou por correntes induzidas na superfície macroscópica da amostra principalmente em materiais metálicos e supercondutores (abaixo da temperatura crítica). Como a abordagem clássica apresenta os mesmos resultados da abordagem quântica, pode-se considerar um elétron em uma órbita circular, perpendicular a um campo magnético aplicado variável. A mudança no fluxo magnético gera uma força eletromotriz que atua de modo a eliminar a variação no fluxo. O torque exercido sobre o elétron pelo campo elétrico induzido provoca a variação no momento angular. Esse momento magnético induzido é proporcional ao campo aplicado e contrário a ele. Para um material com uma densidade de átomos por unidade de volume dada por $N = N_A \rho / A$, onde N_A é o número de Avogadro, ρ a densidade e A a massa atômica, a susceptibilidade magnética do material $\chi = |\vec{M}|/|\vec{H}|$ é

$$\chi = -\frac{NZe^2\mu_0}{6m_e} \langle r^2 \rangle_{med}$$

1. Magnetismo

Assim a susceptibilidade é sempre negativa, não depende explicitamente da temperatura e tem uma magnitude da ordem de 10^{-6} por unidade de volume, ou seja, é muito pequena. Esses materiais são, portanto, caracterizados por uma pequena susceptibilidade magnética negativa e independente da temperatura, ou seja a magnetização induzida por um campo externo é sempre contrária e proporcional ao campo.

1.2.2 Materiais paramagnéticos

O Paramagnetismo ocorre em materiais cujos átomos possuem momentos magnéticos resultantes. No entanto, possuem momentos magnéticos desemparelhados e, quando na presença de um campo magnético, somente uma pequena parte desses momentos se alinham, provocando um leve aumento na intensidade do valor do campo magnético. Uma representação destes momentos é mostrada na figura (1.1). Esses materiais são fracamente atraídos pelos ímãs. O alumínio, o magnésio, platina, titânio e o sulfato de cobre são exemplos na temperatura ambiente. Caracterizam-se por uma susceptibilidade positiva e pequena (da ordem de 10^{-3} a 10^{-5}) e, dependendo de sua origem, tem uma forte dependência com a temperatura. Para campos pequenos, a densidade de fluxo dentro do material paramagnético é proporcional ao campo aplicado, assim a susceptibilidade magnética é aproximadamente constante.

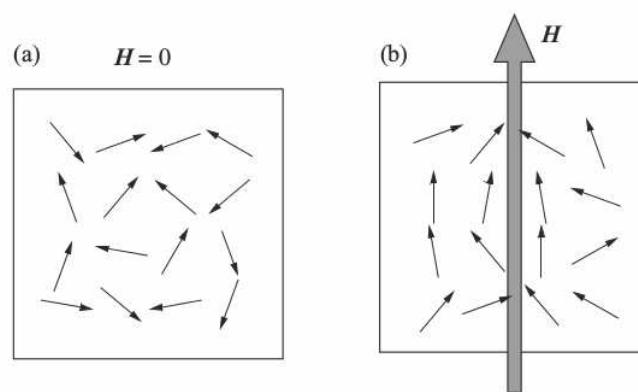


Figura 1.1: Representação esquemática de um material paramagnético na ausência, figura à esquerda (a), e na presença, figura à direita (b), de um campo magnético externo. Figura adaptadas da ref. [49].

Em alguns casos os paramagnetos seguem a Lei de Curie que diz que a suscepti-

1. Magnetismo

bilidade magnética é inversamente proporcional à temperatura, dependência explicada pelo Modelo de Momentos Localizados de Langevin, que assume que os momentos não interagem entre si e estão orientados aleatoriamente como resultado de sua energia térmica. De acordo com o Modelo de Langevin a magnetização de um paramagneto na presença de um campo magnético externo é dada por:

$$\vec{M} = -\frac{N\mu_0 m^2}{3K_B} \frac{\vec{H}}{T}$$

onde N é o número total de momentos magnéticos da amostra, K_B é a constante de Boltzman e T é a temperatura, sendo a susceptibilidade magnética do tipo $\chi = C/T$. Como o modelo de Langevin é clássico, assume que os momentos podem se orientar em qualquer direção em relação ao campo aplicado. Mas ao se quantizar o modelo, onde apenas algumas orientações discretas são aceitas, a susceptibilidade apresenta o mesmo comportamento, diferindo apenas a constante C . Em outros casos, como nos paramagnetos metálicos, a susceptibilidade é independente da temperatura, estes são conhecidos como paramagnetos de Pauli, cujo paramagnetismo resulta de um mecanismo diferente descrito pela teoria de estrutura de bandas. Muitos paramagnetos, no entanto, têm uma dependência mais geral com a temperatura, apresentando um ordenamento espontâneo de seus dipolos abaixo de uma determinada temperatura crítica. Estes tipos de paramagneto, em especial, apresentam o que é chamado de “*magnetismo coletivo*”.

1.2.3 Magnetismo coletivo

Nos materiais que apresentam o chamado magnetismo coletivo a susceptibilidade exibe um comportamento que varia dependendo de parâmetros como temperatura e campo aplicado e apresentam um ordenamento de seu dipolos, que não é induzido por campos externos, abaixo de uma certa temperatura chamada de temperatura crítica. Este ordenamento ocorre principalmente de três maneiras distintas, que permite classificar a fase apresentada como: ferro, ferri ou antiferromagnética.

1. Magnetismo

Ferromagnetismo

Nestes paramagnetos, os domínios magnéticos sofrem uma ordenação espontânea, para temperaturas inferiores a uma temperatura crítica chamada temperatura de Curie T_C . Weiss explicou tal comportamento postulando a existência de uma interação interna entre os momentos localizados que faria com que os momentos magnéticos internos se alinhassem, gerando o que ele chamou de “*campo molecular*”. Assim, o campo total seria a soma do campo externo com esse campo molecular, de maneira que:

$$H_{tot} = H + H_W$$

onde $\vec{H}_W = \gamma \vec{M}$, sendo γ uma constante. Assim

$$\chi = \frac{\vec{M}}{\vec{H}_{tot}} = \frac{\vec{M}}{\vec{H} + \gamma \vec{M}} = \frac{C}{T}$$

Daí

$$\vec{M} = \frac{C\vec{H}}{T - C\gamma}$$

ou seja

$$\chi = \frac{C}{T - \theta} \quad (1.1)$$

a equação (1.1) é a chamada Lei de Curie-Weiss. Observe que em $T = \theta$ ocorre uma divergência na susceptibilidade magnética indicando uma transição para uma fase ordenada, ou seja, nestes materiais a magnetização espontânea ocorre abaixo da temperatura crítica T_c , denominada Temperatura de Curie. Além disso, nestes materiais os momentos magnéticos exibem uma direção preferencial, figura (1.2), e, na presença do campo magnético externo, se organizam facilmente, aumentando a intensidade do campo magnético de maneira que a susceptibilidade magnética é grande ($\chi > 1$). Exemplos na temperatura ambiente: ferro, cobalto e níquel.

Ferrimagnetismo

Os materiais são formados basicamente por duas subredes ferromagnéticas A e B com magnetizações diferentes, de maneira que, para $T < T_c$, a magnetização total

1. Magnetismo

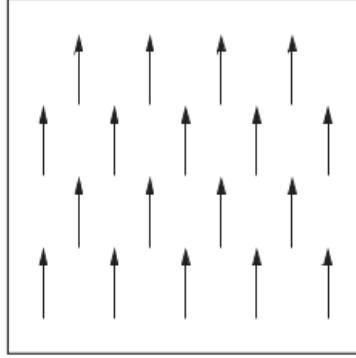


Figura 1.2: Representação esquemática de um material ferromagnético abaixo da temperatura crítica. Figura adaptada da ref. [49].

$M = M_A + M_B \neq 0$, figura (1.3). Podemos citar como ferrimagnetos as ferrites como $\alpha\text{Fe}_2\text{O}_4$ (α pode ser *Ni*, *Co*, *Fe*, *Mn* ou *Zn*), magnetites e em geral óxidos metálicos.

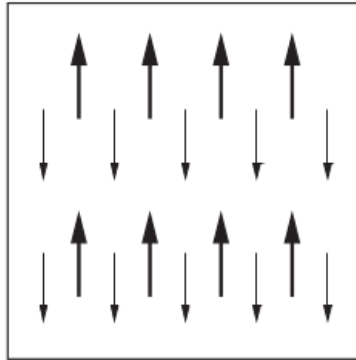


Figura 1.3: Representação esquemática de um material ferrimagnético abaixo da temperatura crítica. Figura adaptada da ref. [49].

Antiferromagnetismo

O antiferromagnetismo é um caso particular de ferrimagnetismo onde a magnetização de saturação das subredes tem mesma intensidade [50], mas é contrária uma à outra para temperaturas abaixo da temperatura crítica, figura (1.4), que é chamada de Temperatura de Néel (T_N). Assim, abaixo da Temperatura T_N a magnetização total de materiais antiferromagnéticos é zero. A susceptibilidade de um antiferromagneto não diverge em $T = T_N$, mas tem um pequeno pico, como pode ser visto na figura (1.5). Como exemplos de materiais antiferromagnéticos podemos citar o cromo, manganês e

1. Magnetismo

o óxido de níquel. Uma representação da rede cristalina do MnO é apresentada na figura (1.6) como um exemplo deste tipo de material.

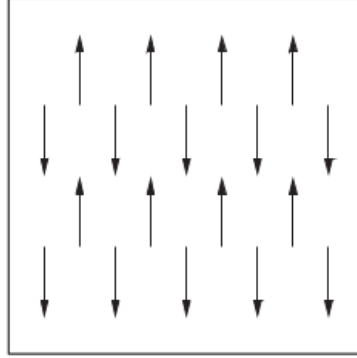


Figura 1.4: Representação esquemática de um material antiferromagnético abaixo da temperatura crítica. Figura adaptada da ref. [49].

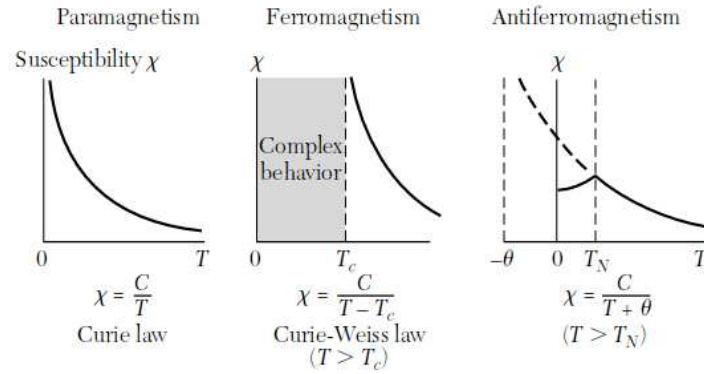


Figura 1.5: Dependência com a temperatura da susceptibilidade magnética de paramagnetos, ferromagnetos e antiferromagnetos. Figura adaptada da ref. [50].

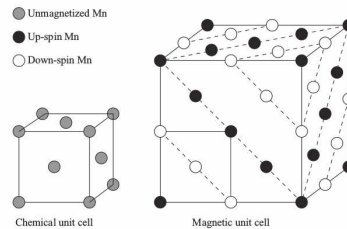


Figura 1.6: Estrutura do MnO acima e abaixo da temperatura de Néel, à esquerda e à direita, respectivamente. Figura adaptada da ref. [49].

1.3 Interações Magnéticas

Basicamente o comportamento coletivo é resultado de interações entre os momentos magnéticos permanentes que, na maioria das vezes, só podem ser explicadas pela mecânica quântica. As principais interações entre os momentos magnéticos são as interações do tipo dipolo-dipolo (clássica) e interações de troca direta e indireta como a supertroca. Nesta seção discutiremos um pouco mais sobre as interações que são consideradas no estudo proposto nesta tese, ou seja, a interação de troca, também chamada de interação de troca de Heisenberg, e a interação de Dzyaloshinskii-Moriya, que é a interação de supertroca acrescida de efeitos relativísticos do acoplamento spin-órbita.

1.3.1 A interação de troca direta

Apesar das interações entre os elétrons em um sólido, assim como as forças exercidas pelos íons da rede sobre os elétrons, serem essencialmente de origem Coulombiana, a necessidade de uma interpretação da interação entre os momentos magnéticos dos elétrons já havia sido reconhecida há muito tempo. Um resultado clássico obtido por Niels Bohr e Hendrika Van Leeuwen demonstra que o magnetismo é um fenômeno puramente quântico pois em mecânica estatística clássica um campo aplicado não produz qualquer magnetização. Assim, a orientação dos momentos magnéticos em materiais ferromagnéticos, que resultam numa magnetização espontânea, ocorre devido à uma interação entre estes momentos, conforme proposto por Heisenberg em 1932 [51]. Basicamente Heisenberg propôs que uma interação efetiva entre os spins de dois elétrons, muito mais forte do que a interação dipolar, era induzida pelo princípio da exclusão de Pauli e, considerando interação Coulombiana entre os elétrons, propôs a seguinte expressão para a interação entre dois spins:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j=1}^N J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.2)$$

1. Magnetismo

que é a forma mais comum da interação de troca de Heisenberg, onde

$$J_{ij} = 2 \int \phi_i^*(\vec{r}_1) \phi_j^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{r_{ij}} \phi_i(\vec{r}_2) \phi_j(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (1.3)$$

e $\vec{S}_i$ é o spin total do átomo no sítio i .

A expressão (1.2) é a forma mais comum da interação de troca de Heisenberg, cuja dedução encontra-se detalhada no apêndice A. A integral na equação (1.3), envolve a superposição das funções de onda e decai rapidamente a zero com a distância. Assim, é muito comum levar em consideração a interação de troca apenas entre primeiros vizinhos. Uma outra maneira de explicar o que ocorre é visualizar a superposição de ondas no mecanismo de troca direta correspondendo ao elétron de um dos dois átomos “passando” para o orbital do outro átomo, que seria a chamada “troca”, representada simplificada na figura (1.7).

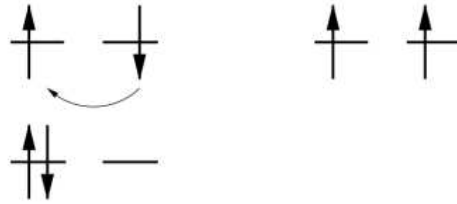


Figura 1.7: Representação esquemática de uma interação de troca em um material anti-ferromagnético: O alinhamento antiparalelo dos spins (esquerda) é favorecido, uma vez que os elétrons podem “pular” para o orbital do átomo vizinho. Para spins paralelos, a troca é suprimida pelo Princípio da Exclusão de Pauli. Figuras adaptadas da ref. [52].

Nos metais de transição estes orbitais são tipicamente os orbitais altamente localizados d . Assim, só deveria haver este tipo de interação de troca entre dois átomos muito próximos um do outro. No entanto, a maioria dos isolantes antiferromagnéticos são metais de transição oxídios, ou seja, os metais de transição (cátions) estão separados uns dos outros por grandes átomos de oxigênios (ânions), o que inviabiliza a interação de troca direta entre os orbitais- d dos metais de transição. Mesmo assim, o conceito de troca direta pode ser estendido a estes casos levando em consideração a interação de troca via um orbital intermediário, no caso dos átomos de oxigênio orbital- p , resultando

1. Magnetismo

na chamada *interação de supertroca*. Esta interação é importante pois muitos metais de transição oxídios fazem parte de um grupo de materiais chamados “*magnetos quirais*”. Os magnetos quirais exibem no estado fundamental um tipo de fase magnética diferente das discutidas até aqui, as fases magnéticas helicais e, usualmente na presença de campo magnético, podem exibir redes de uma quase-partícula magnética chamada skyrmion, que são o principal objeto de estudo desta tese.

1.3.2 A interação de supertroca

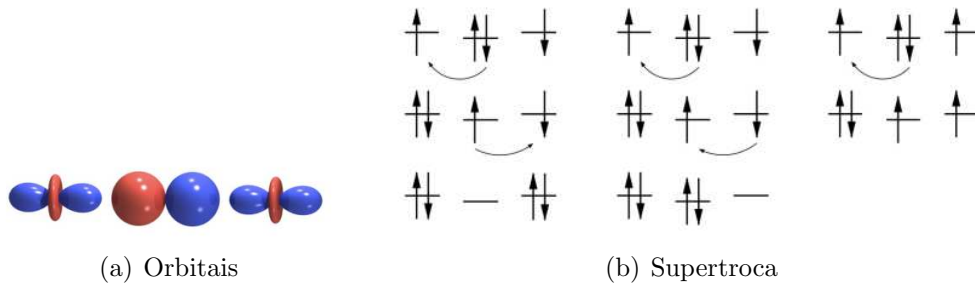


Figura 1.8: (a) Na supertroca um orbital p do átomo de oxigênio media a interação de troca entre dois orbitais d de metais de transição. (b) Representação simplificada da supertroca. O orbital do átomo do centro é diferente dos orbitais dos átomos laterais. Para spins anti-paralelos há dois processos de troca consecutivos possíveis. Enquanto para spins paralelos a segunda troca foi suprimida pelo Princípio da Exclusão de Pauli. Figuras adaptadas da ref. [52].

Supertroca pode ser definida como um mecanismo de troca que ocorre em metais de transição nos quais os íons estão separados, normalmente, por grupos diamagnéticos e são mal condutores à temperatura ambiente [53]. Os estados relevantes neste sistema dependem da configuração dos cátions. Isto é, a interação de supertroca depende da geometria do sistema, ou seja, dos ângulos das ligações entre os átomos. O sistema mais simples possível que poderia exibir um comportamento de supertroca é o descrito na figura (1.8), consistindo de um ânion diamagnético entre dois cátions paramagnéticos, que podem apresentar configurações ferro ou antiferromagnética para sua distribuição de spin eletrônico.

Contudo, somente a interação de supertroca ainda não é suficiente para explicar o comportamento dos metais de transição oxídios que apresentam ferromagnetismo

1. Magnetismo

fraco e pertencem ao grupo dos “magnetos quirais”. Materiais como $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, MnCO_3 e CoCO_3 , que não apresentam simetria de inversão espacial, exibem uma magnetização espontânea fraca, chamada de ferromagnetismo fraco, cuja magnitude dos momentos magnéticos varia entre $10^{-2} - 10^{-5}$ do seu valor nominal. Dzyaloshinskii [19] mostrou que a falta de simetria de inversão espacial destes materiais gera uma pequena rotação nas estruturas magnéticas, que é responsável pelo pequeno momento magnético resultante apresentado por eles. Na figura (1.9) temos uma representação da estrutura cristalina do $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ e do Cr_2O_3 . A figura 1.9(b) de cima corresponde à estrutura do $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, que não possui simetria de inversão espacial e apresenta ferromagnetismo fraco, enquanto a figura de baixo é a estrutura do Cr_2O_3 , que possui simetria de inversão e não apresenta ferromagnetismo fraco, estando a principal diferença na orientação dos spins ao longo da diagonal da célula unitária. A projeção dos spins do $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ sobre um eixo de simetria é apresentada em 1.9(c) e em 1.9(d) uma outra vista desta projeção. Devido ao pequeno ângulo entre os spins e o eixo horizontal, exagerado na figura 1.9(d) para facilitar a visualização, o momento resultante não é nulo.

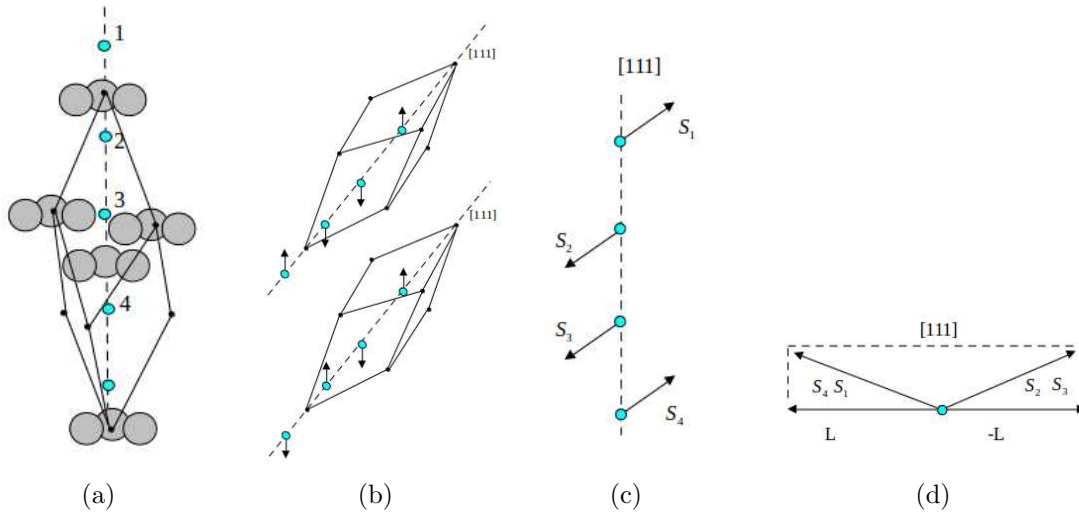


Figura 1.9: (a) Representação esquemática da célula unitária de materiais com estrutura cristalina $B20$ como o Fe_2O_3 . Os círculos grandes representam átomos de oxigênio e os pequenos os átomos de Fe ou Cr. (b) Na figura de cima temos a configuração dos spins no Fe_2O_3 e na figura de baixo a configuração do Cr_2O_3 . (c) Projeção dos spins de Fe_2O_3 sobre um eixo de simetria do cristal e (d) Outra vista da projeção dos spins no eixo de simetria. Figura adaptada da ref. [19].

1. Magnetismo

1.3.3 A interação de Dzyaloshinskii-Moriya

Conforme proposto por Dzyaloshinskii [19], o ferromagnetismo fraco apresentado por materiais com falta de simetria de inversão espacial como $\alpha - \text{Fe}_2\text{O}_3$, MnCO_3 e CoCO_3 pode ser explicado através da rotação das estruturas magnéticas resultante de acoplamentos anti-simétricos. Assim, no hamiltoniano de sistemas com tais características, Dzyaloshinskii propôs que fosse inserido um termo de interação de troca de spin anti-simétricos dado por:

$$H_{DM} = -\vec{D} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_j, \quad (1.4)$$

sendo $\vec{D}$ um vetor constante, que depende da simetria do material. Uma interação de troca anisotrópica, como um efeito combinado do acoplamento spin-órbita e interação de troca já havia sido discutida por vários autores, mas eles se restringiam a acoplamentos pseudo-dipolares, que são acoplamentos spin-órbita de segunda ordem. Segundo Moriya [54,55], o acoplamento proposto por Dzyaloshinskii é obtido quando se leva em conta efeitos relativísticos do acoplamento spin-órbita na interação de supertroca, o que resulta numa interação linear em relação ao acoplamento spin-órbita, importante em cristais magnéticos de baixa simetria, e geralmente muito maior que acoplamentos pseudo-dipolares. Uma dedução completa da expressão 1.4 é feita no apêndice (B).

Em geral, se o material é centro-simétrico, que significa dizer que a molécula e sua imagem estão presentes no cristal em igual número ou que a própria molécula é centro-simétrica, o acoplamento de spin anti-simétrico de Dzyaloshinskii-Moriya desaparece. Quando a simetria do cristal é baixa, no entanto, este acoplamento pode ser o acoplamento anisotrópico mais importante entre os spins. Este é o caso dos materiais quirais, pois eles não possuem um centro de inversão espacial. Um material é dito quiral quando ele e sua imagem no espelho não se sobrepõem [56]. Para ilustrar a questão da centro-simetria, na figura (1.10), temos uma representação de uma perovskita em uma fase centro-simétrica e, em 1.10(b), temos este mesmo material em uma fase que não é centro simétrica. Na fase não centro-simétrica, por exemplo, a perovskita exibe um fenômeno chamado ferroeletricidade, ilustrando a importância da centro-simetria

1. Magnetismo

nas características dos materiais [57].

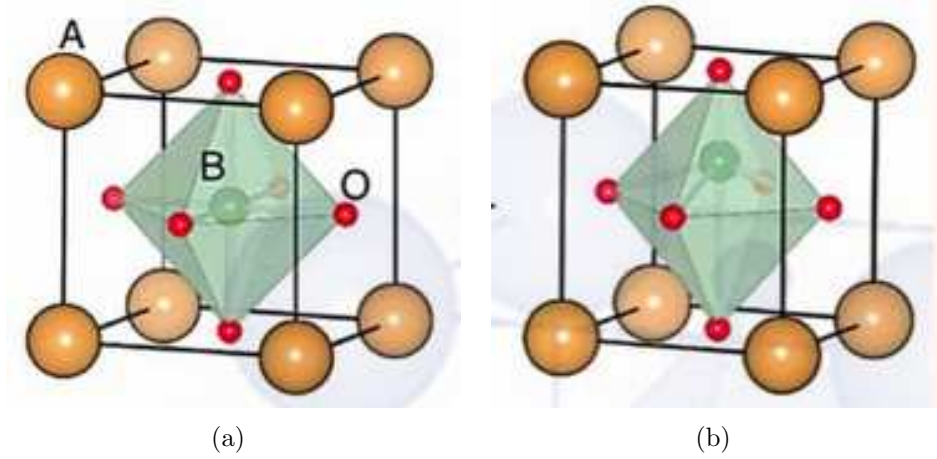


Figura 1.10: Estrutura de uma perovskita, ABO_3 , na fase (a) centro-simétrica e (b) não centro-simétrica. Nestes materiais, A é um Bi ou Pb e B é um metal de transição [42]. Na fase centro-simétrica, em relação ao centro de simetria, para cada átomo situado na posição $\vec{r}$ existe um idêntico na posição $-\vec{r}$. Podemos citar como exemplos de provskitas: $BiFeO_3$, $BiMnO_3$ e $PbFe_{1-x}Nb_xO_3$. Figura adaptada da ref. [57].

Moriya enunciou regras, considerando a simetria da rede cristalina formada pelo material, para a determinação da direção do vetor de Dzyaloshinskii [55] devido à interação de supetroca. Considere dois íons na posições i e j e o ponto de bissetriz, X , na linha que une estes dois íons ij . As regras de Moriya estabelecem que:

a) Quando há um centro de inversão em X ,

$$\vec{D} = 0.$$

b) Quando há um plano de reflexão perpendicular a ij que passa por X ,

$$\vec{D} \text{ paralelo ao plano ou perpendicular a } ij.$$

c) Quando há um plano de reflexão que passa por i e j , ou seja, paralelo a ij ,

$$\vec{D} \text{ é perpendicular a plano.}$$

d) Quando há um eixo de dupla rotação, perpendicular a ij que passa por X ,

1. Magnetismo

$\vec{D}$ é perpendicular a este eixo de rotação.

e) Quando há um eixo n -rotações ($n > 2$) ao longo de ij ,

$\vec{D}$ é paralelo ao eixo.

Uma representação esquemática das regras de Moriya é apresentada na figura (1.11). Hopkinson [58] mostrou que uma base completa de vetores ortogonais, consistentes com as regras acima e com a simetria cristalina do MnSi é dada por vetores paralelos à direção de ligação entre os átomos. Assim, considerando um spin $\vec{S}_i$ locali-

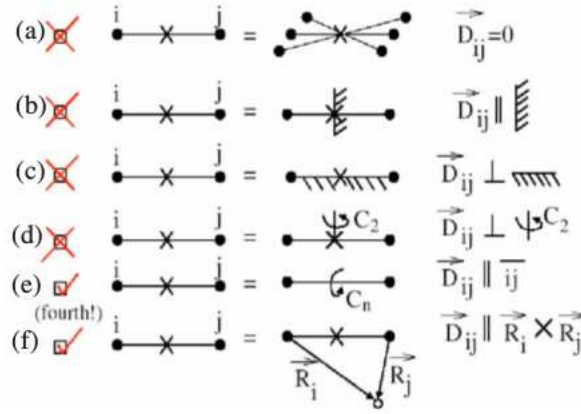


Figura 1.11: De (a)-(e) temos as regras de Moriya para a determinação dos vetores Dzyaloshinskii-Moriya em materiais isolantes devido a interações de supertroca e, em (f), temos direção do vetor de Dzyaloshinskii-Moriya devido a impureza nos sítios i e j em sistemas itinerantes [59,60]. As direções dos vetores são mostradas para quando o cristal apresenta as seguintes simetrias: (a) no ponto médio de $\vec{R}_{ij}$ temos um centro de inversão, (b) no ponto médio de $\vec{R}_{ij}$ temos um espelho plano perpendicular a $\vec{R}_{ij}$, (c) temos um espelho plano paralelo a $\vec{R}_{ij}$, (d) no ponto médio há um eixo de dupla rotação perpendicular a $\vec{R}_{ij}$, (e) no ponto médio há um eixo de n -rotações paralelo a $\vec{R}_{ij}$ e (f) um átomo itinerante com acoplamento spin-órbita a uma distância $\vec{R}_i$ e $\vec{R}_j$ dos momentos situados em i e j , respectivamente. O MnSi não apresenta as simetrias de (a) até (d), pois ele apresenta simetria $P2_13$. O caso (e) só se aplica quando i e j são quartos vizinhos mais próximos.

zado na posição $\vec{r}_i$ e seus primeiros vizinhos $\vec{S}_j$, localizados nas posições $\vec{r}_j$, de acordo com a expressão (B. 12), a interação de Dzyaloshinskii–Moriya entre este spin e seus vizinhos é dada pela seguinte expressão

$$\mathcal{H}_{DM} = - \sum_{j=1}^4 \vec{D}_{ij} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_j, \quad (1.5)$$

1. Magnetismo

onde $\vec{D}_{ij} = D\hat{r}_{ij}$ é o vetor de Dzyalishinskii-Moriya para materiais como MnSi e FeGe [58], sendo $\hat{r}_{ij}$ a direção do vetor que une os íons i e j . Assim, considerando um spin $\vec{S}$ localizado na posição $\vec{r}$ e seus quatro primeiros vizinhos localizados nas posições $\vec{r} + \hat{x}$, $\vec{r} + \hat{y}$, $\vec{r} - \hat{x}$ e $\vec{r} - \hat{y}$, a expressão (1.5) pode ser reescrita como

$$\mathcal{H}_{DM} = -D[\vec{S}_{\vec{r}} \times (\vec{S}_{\vec{r}+\hat{x}} - \vec{S}_{\vec{r}-\hat{x}})|_x - \vec{S}_{\vec{r}} \times (\vec{S}_{\vec{r}+\hat{y}} - \vec{S}_{\vec{r}-\hat{y}})|_y], \quad (1.6)$$

que é a forma mais encontrada na literatura. Deste então a expressão acima vem sendo muito utilizada em modelos magnéticos [61,62] por gerar estados espirais para pequenas anisotropias.

Capítulo 2

Skyrmions

Neste capítulo fazemos uma pequena revisão bibliográfica sobre skyrmions. Desde sua previsão pelo Modelo sigma não linear e mecanismos responsáveis por sua formação nos sistemas da matéria condensada até as principais características da termodinâmica deste tipo de sistema magnético e sua dinâmica característica.

2.1 Modelos Teóricos

2.1.1 O modelo sigma não linear

Skyrmions são sólitons topologicamente estáveis e com energia finita que foram propostos como solução de parte de uma teoria de campo não linear, Teoria de Yang-Mills, para descrever mésons e bárions na Cromodinâmica Quântica [1]. Devido às semelhanças entre a Teoria de Yang-Mills e o modelo Sigma Não-Linear, que consiste no modelo de Heisenberg (interação de troca do capítulo anterior) no limite contínuo, rapidamente as soluções encontradas por Skyrme migraram também para a Matéria Condensada, onde tal modelo é amplamente utilizado. Em 1975 Belavin e Polyakov [3] mostraram que ferromagnetos bidimensionais com 3 componentes de spin, $n^\alpha(x)$, suportam a existência dessas soluções não triviais. Nesta seção apresentamos um resumo do modelo sigma não-Linear, baseado no capítulo 3 do livro de Rajaraman [63] e no capítulo 2 do livro do Yang [64].

2. Skyrmions

O modelo sigma não-linear $O(3)$, em d dimensões, consiste de três campos escalares ($\vec{n}(\vec{x}, t) \equiv n_\alpha(\vec{x}, t); \alpha = 1, 2, 3$) sujeito a um vínculo e, em sua forma mais geral, pode ser descrito pela seguinte densidade Lagrangeana

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \sum_{\alpha=1}^N (\partial_\mu n_\alpha) \cdot (\partial^\mu n_\alpha) = \frac{1}{2} (\partial_\mu \vec{n}) \cdot (\partial^\mu \vec{n}) , \quad (2.1)$$

onde μ é o índice espaço-temporal, que é invariante de Lorentz, e α representa o espaço interno, ou seja, os campos escalares. No caso do sistema ferromagnético bidimensional estudado por Belavin e Polyakov, $d = 3$ corresponde às duas dimensões do espaço e ao tempo e α são as componentes do spin. O espaço interno apresenta simetrias quanto a rotações $O(N)$, sendo neste caso $N = 3$. Assim, tanto a Lagrangeana quanto o vínculo são invariantes sob rotações globais no espaço interno, sendo a não linearidade do modelo devido ao vínculo

$$\sum_{\alpha=1}^N n_\alpha^2 = \vec{n}(\vec{r}, t) \cdot \vec{n}(\vec{r}, t) = 1 . \quad (2.2)$$

As equações de campo podem ser obtidas aplicando o princípio variacional de Euler-Lagrange na ação. Um método padrão de incorporar o vínculo ao modelo consiste em implementar um multiplicador de Lagrange, reescrevendo a ação da densidade Lagrangeana como

$$S[\vec{n}] \equiv \int dx \int dt \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \vec{n}) \cdot (\partial^\mu \vec{n}) + \lambda(\vec{x}, t) (\vec{n} \cdot \vec{n} - 1) \right] , \quad (2.3)$$

e tratando as componentes $n_\alpha(\alpha = 1, 2, 3)$ como variáveis independentes. Assim, a equação de movimento obtida ao minimizar a ação é dada por:

$$\partial_\mu \partial^\mu \vec{n} + \lambda \vec{n} = (\square^2 + \lambda) \vec{n} = 0 . \quad (2.4)$$

O multiplicador de Lagrange pode ser eliminado usando o vínculo (2.2):

$$\lambda(\vec{x}, t) = \lambda \vec{n} \cdot \vec{n} = -\vec{n} \cdot \square^2 \vec{n} . \quad (2.5)$$

2. Skyrmions

Substituindo (2.5) em (2.7), obtemos a equação de movimento da densidade Lagrangeana (2.1) sujeita ao vínculo (2.2),

$$\square^2 \vec{n} - (\vec{n} \cdot \square^2 \vec{n}) \vec{n} = 0, \quad (2.6)$$

Restringindo as soluções para **soluções estáticas**, que são independentes do tempo, $\partial_t \vec{n} = 0$, em duas dimensões espaciais

$$\nabla^2 \vec{n} - (\vec{n} \cdot \nabla^2 \vec{n}) \vec{n} = 0. \quad (2.7)$$

A energia da solução estática é dada por

$$E = \frac{1}{2} \int (\partial_i \vec{n}) \cdot (\partial^i \vec{n}) d^2 \vec{r}, \quad (2.8)$$

com $i = 1, 2$. O **estado fundamental**, soluções com energia zero (vácuo clássico), devem satisfazer, para todo o espaço, ou seja, para qualquer $\vec{r}$, à condição $\partial_i \vec{n}(\vec{r}) = 0$. Assim, $\vec{n}(\vec{r}) = \vec{n}_0$, com $\vec{n}_0$ sendo qualquer vetor unitário no espaço interno. Apesar de $\vec{n}_0$ ser $\vec{r}$ -independente no estado fundamental, ele pode apontar em qualquer direção no espaço interno. Então, existe uma família de soluções com $E = 0$, correspondentes às diferentes direções que $\vec{n}_0$ pode ter, o que corresponde a uma quebra espontânea de simetria, já que agora todos os spins da rede apontam numa mesma direção.

Usando coordenadas polares (r, θ) e tendo em vista (2.8), obtemos que as soluções com **energia finita** são obtidas exigindo que

$$\lim_{r \rightarrow \infty} (r \parallel \nabla \vec{n} \parallel) \rightarrow 0 \quad (2.9)$$

ou

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \vec{n} = \vec{n}_0 \quad (2.10)$$

em que $\vec{n}_0$ é novamente qualquer vetor unitário no espaço interno. Note que no infinito a direção do campo é fixa, pois, caso contrário, se o campo dependesse do ângulo θ , a componente angular do gradiente, $(1/r) (\partial \vec{n} / \partial \theta)$, não satisfaria (2.9). No entanto, o campo é livre pra apontar em qualquer direção no centro, já que o sistema possui

2. Skyrmons

simetria $O(3)$. Assim, como $\vec{n}(\vec{r})$ se aproxima de um mesmo valor $\vec{n}_0$ em todos os pontos no infinito, o plano físico de coordenadas pode ser compactado envolvendo a superfície de uma esfera, chamada S_2^{fis} . Assim, é possível mapear todo o plano físico na superfície de uma esfera unitária (S_2^{fis}), de forma que o círculo no infinito se reduza ao pólo norte da esfera. Por outro lado, o “espaço interno”, ou seja, o espaço dos campos, sujeito ao vínculo $\sum_{a=1}^3 n_a^2 = 1$, também é uma superfície esférica, de raio unitário, que é usualmente chamada S_2^{int} . Assim, qualquer configuração estática de energia finita $\vec{n}(\vec{r})$ é um mapeamento de S_2^{fis} em S_2^{int} .



Figura 2.1: Equivalência topológica entre uma rosquinha e uma xícara. Figura obtida na internet em <https://blogs.scientificamerican.com/guest-blog/in-love-with-geometry/>

A topologia estuda propriedades do espaço que se preservam sob deformações contínuas como esticar e dobrar, sem, no entanto, cortar ou colar. Como exemplo de objetos que pertencem a um mesmo setor homotópico podemos citar uma xícara e uma rosquinha. Como um pode ser deformado continuamente até atingir a forma do outro, conforme figura (2.1), a xícara e a rosquinha são topologicamente equivalentes. A figura (2.2) mostra grupos de objetos que pertencem a um mesmo setor homotópico, sendo cada grupo pertencente a um gênero, ou seja, cada grupo pertence a um setor diferente do outro.

Voltando ao nosso problema especificamente, todo mapeamento não-singular de uma superfície esférica S_2 em outra S_2 pode ser classificada em setores homotópicos, ou seja, o espaço de soluções não-singulares de energia finita pode ser dividido em setores ou classes. Essas classes homotópicas formam um grupo, formalmente escrito como $\pi_2(S_2) = \mathbb{Z}$, onde $\mathbb{Z}$ é o conjunto dos números inteiros. Estes setores são topologicamente desconectados, no sentido de que os campos de um setor não podem ser continuamente distorcidos até atingir um do outro setor sem violar a condição de ener-

2. Skyrmions

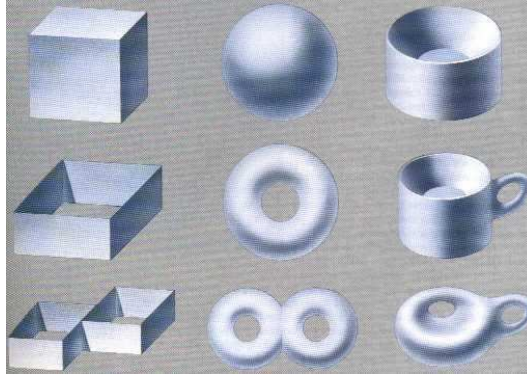


Figura 2.2: Objetos topologicamente equivalentes separados por gênero. Os objetos da primeira linha não têm nenhum buraco (Gênero 0), os da segunda linha contêm um buraco (gênero 1) e os da última linha contêm dois buracos (gênero 2). Neste caso, o que se mantém invariante ao deformar um objeto no outro é o número de buracos. Figura obtida na internet em [http : //www.bertolo.pro.br/fisica_cosmologia/Cosmologia/Cosmology/Properties – of – Space.htm](http://www.bertolo.pro.br/fisica_cosmologia/Cosmologia/Cosmology/Properties-of-Space.htm)

gia finita. Os setores homotópicos são definidos por um índice ou “carga” topológica Q , que se mantém invariante no tempo. No caso do mapeamento de uma superfície esférica S_2 em outra S_2 , essa carga topológica é dada por

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int \vec{n} \cdot (\partial_x \vec{n} \times \partial_y \vec{n}) d^2 \vec{r} = \frac{1}{8\pi} \int \epsilon_{ij} \vec{n} \cdot (\partial_i \vec{n} \times \partial_j \vec{n}) d^2 \vec{r}. \quad (2.11)$$

Pode-se mostrar que

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int dS^{int} \quad (2.12)$$

o que significa dizer, neste caso, que a carga topológica Q mede quantas vezes o espaço interno é mapeado no espaço físico. O estado fundamental, ou “vácuo” do sistema, pertence ao setor com carga $Q = 0$ onde, por exemplo, o mapeamento forma ferromagnetos, Fig. 2.3(a), enquanto que soluções pertencentes ao setor com carga $Q = 1$ são sólitons como vórtices, skyrmions, etc, Fig. 2.3(b).

Uma maneira simples de determinar a forma das soluções topológicas é a chamada projeção estereográfica, na qual o espaço interno é representado no plano infinito. A figura (2.4) mostra como a projeção estereográfica é feita. Nas Figuras 2.5(a) e 2.5(b) temos a projeção no plano das soluções com $Q = 1$ e $Q = 2$, respectivamente, da figura (2.3) e na Figura (2.6) temos uma outra representação deste tipo de projeção.

2. Skyrmions

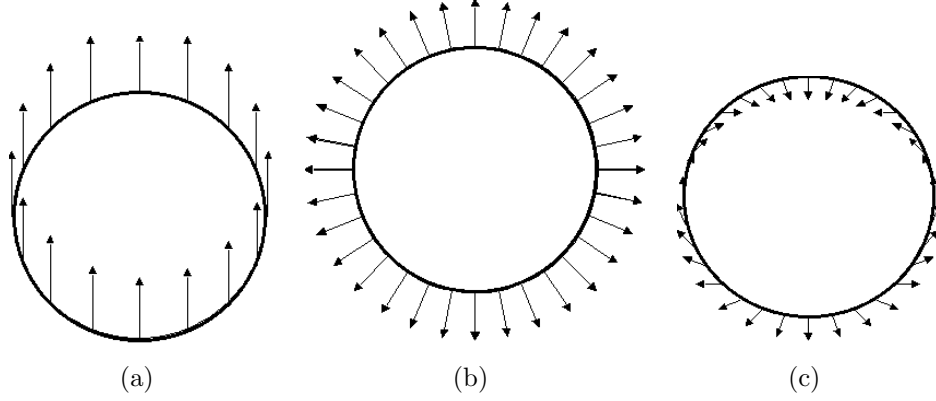


Figura 2.3: Corte transversal de exemplos de mapeamentos de $S_2^{fis} \rightarrow S_2^{int}$ com (a) $Q=0$, (b) $Q=1$ e (c) $Q=2$. A superfície de linha contínua representa S_2^{fis} e os vetores indicam a direção do campo nos pontos correspondentes em S_2^{int} .

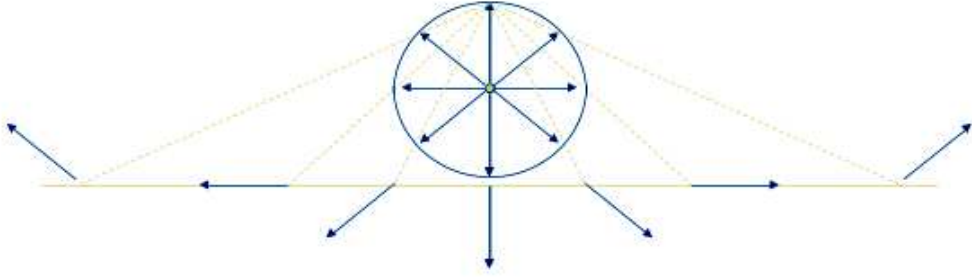


Figura 2.4: Esquema de projeção estereográfica.

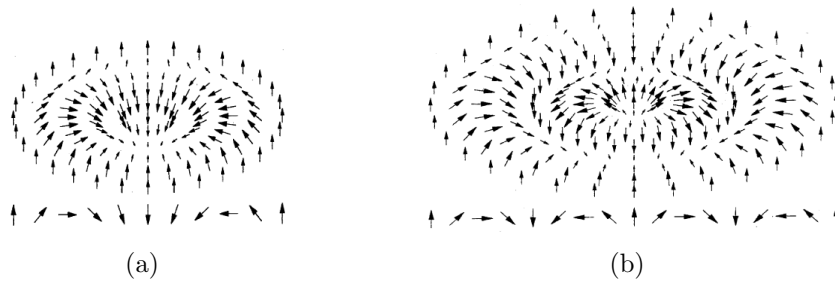


Figura 2.5: Exemplos de distribuição da magnetização de vórtices isolados de soluções topológicas com $Q = 1$ e $Q = 2$. Figura extraída da Ref. [65].

Como passar de uma configuração com uma certa carga topológica pra outra, com carga topológica diferente, exige alto custo energético, dizemos que os skyrmions são topologicamente estáveis. Assim, skyrmions são configurações de campo topologi-

2. Skyrmions

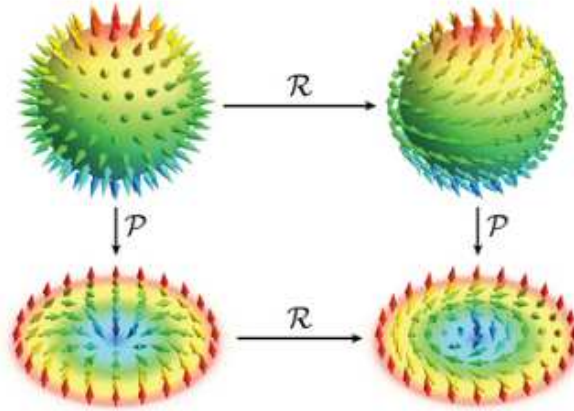


Figura 2.6: Representação de uma projeção estereográfica 3D. O skyrmion da esquerda é chamado skyrmion de Néel e o da direita skyrmion de Bloch [66]. Figura extraída de <http://www.christophschuette.com/physics/skyrmions.php>

camente estáveis com energia finita. Com o tempo, soluções para modelos não lineares, topologicamente estáveis e com energia finita começaram a aparecer em diferentes áreas da Física e a palavra skyrmion passou a ser usada para se referir a estes objetos. Desde então, procura-se por indícios da presença destes objetos em diferentes sistemas físicos. Como em Matéria Condensada o campo com o qual lidamos é um campo de spins, uma outra definição para os skyrmions é que skyrmions são configurações de spins envolvendo toda a superfície de uma esfera unitária. Devido à sua estabilidade topológica e outras características descobertas mais tarde, que apresentaremos nas próximas seções, os skyrmions passaram a ocupar um papel de destaque em sistemas magnéticos.

2.1.2 Modelos para magnetos quirais

Como vimos na seção anterior, há muitas configurações de campo dentro de uma mesma classe homotópica. Assim, há muitos tipos de estruturas skyrmiônicas ($Q = 2$) possíveis. A figura (2.7) apresenta os diferentes tipos possíveis de estruturas skyrmiônicas, correspondendo a diferentes valores de helicidade γ , cujos valores correspondem ao ângulo do campo em relação à configuração com helicidade $\gamma = 0$, e de vorticidade m , onde a vorticidade determina a carga topológica do skyrmion e a helicidade corresponde a uma fase [22].

2. Skyrmions

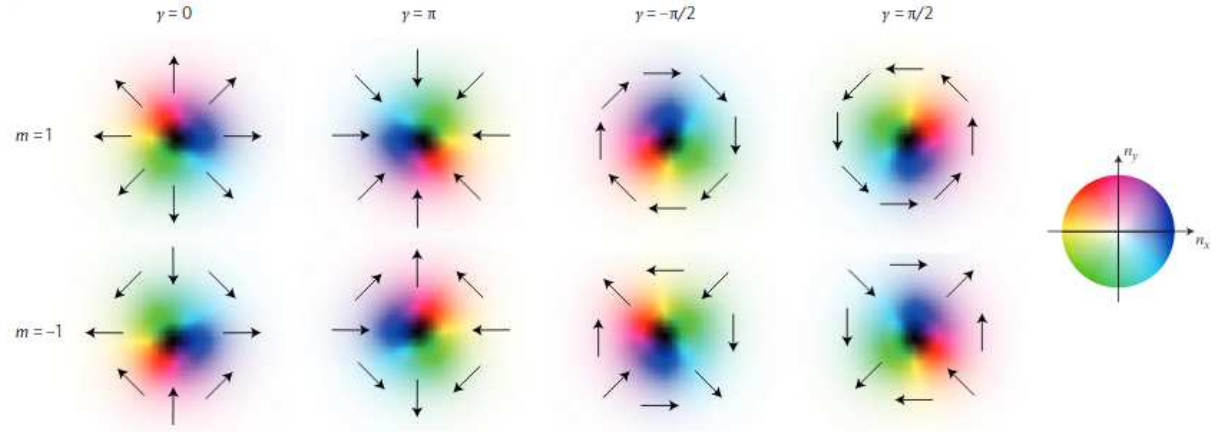


Figura 2.7: Estruturas skyrmônicas para diferentes valores de vorticidade (m) e helicidade (γ). As setas indicam a direção das componentes de spin no plano e as cores indicam a componente normal ao plano (o branco indica direção para cima e o preto direção para baixo). Todas as estruturas dos anti-skyrmions ($m = -1$) correspondem a rotações no plano xy . Figura extraída da Ref. [22]

Cada tipo de estrutura skyrmônica é favorecida de acordo com o mecanismo envolvido na geração de tais estruturas. A formação dos skyrmions em sistemas magnéticos se dá basicamente através de quatro mecanismos que podem ocorrer concomitantemente ou não. São eles:

- 1 Interações magnéticas dipolares de longo alcance;
- 2 Interação de Dzyaloshinskii-Moriya (DM);
- 3 Interações de troca frustradas;
- 4 Interações de troca de quatro spins.

As interações responsáveis pela estabilização de skyrmions num sistema magnético sofrem variações energéticas com a helicidade e com a vorticidade, ou seja, cada interação requer diferentes valores, levando a diferentes configurações. Nas interações dipolares, a energia mínima para a estabilização de skyrmions ocorre para $m = 1$ e $\gamma = \pm\pi/2$, sendo o custo energético muito alto para valores diferentes e o sinal da helicidade é um grau de liberdade do sistema. Para a interação DM, a energia

2. Skyrmions

mínima é obtida para $m = 1$ e $\gamma = \pm\pi/2$, mas o sinal é determinado pela estrutura cristalina. Nas duas últimas interações, a energia de skyrmions e anti-skyrmions, $m = \pm 1$, é degenerada e γ pode ter qualquer valor arbitrário.

Cada mecanismo é favorecido em um tipo de sistema, sendo os dois primeiros os principais, por não necessitarem dos outros para estabilizarem os skyrmions no sistema. No primeiro mecanismo, a formação de skyrmions se dá, usualmente, em filmes finos de materiais magnéticos centrosimétricos com anisotropia de eixo fácil perpendicular ao plano do filme. Devido a competição entre a interação dipolar, que favorece o alinhamento dos spins no plano do filme, e a energia de troca, que favorece o alinhamento perpendicular ao plano do filme [67–69], o resultado é a formação de estados helicais (“stripes”), em que a magnetização gira em um plano perpendicular ao filme e, quando um campo é aplicado perpendicular ao filme, as stripes são convertidas em skyrmions. No segundo, que é o de interesse nesta tese, a formação dos skyrmions ocorre em magnetos quirais, que são materiais magnéticos não-centrosimétricos, e, como visto no capítulo anterior, surge devido a um efeito relativístico do acoplamento spin órbita. Neste caso, na presença de um determinado campo magnético externo, os skyrmions podem formar uma rede, semelhante a uma cristalina.

A principal diferença entre os estados helicais gerados nos mecanismos de interações dipolares de longo alcance e interação DM é que, enquanto a direção do giro no primeiro caso é indeterminada (γ pode ter qualquer sinal), no segundo ela é definida pela direção do vetor Dzyaloshinskii-Moriya, conforme mencionado anteriormente. Uma outra diferença entre os mecanismos que levam à estabilização de skyrmions no sistema é o tamanho típico dos skyrmions gerados em cada tipo de interação. Enquanto nas duas primeiras os skyrmions têm diâmetro de $5 - 100nm$, nas duas últimas o diâmetro é em torno de $1nm$, ou seja, os skyrmions gerados nos dois primeiros processos têm tamanho maior que o parâmetro de rede, enquanto os gerados nos dois últimos têm tamanhos atômicos.

Até aqui vimos como os skyrmions foram previstos teoricamente, através de um modelo bem geral, o Modelo Sigma Não-Linear, e quais mecanismos poderiam levar

2. Skyrmions

à sua estabilização em sistemas magnéticos da matéria condensada. Estamos interessados, no entanto, nos magnetos quirais, que são materiais com falta de simetria de inversão não centro-simétricos. Assim, daqui por diante, nosso foco são estes materiais. Vejamos, portanto, qual o comportamento destes materiais, tanto previstos por modelos teóricos específicos quanto observados em laboratório.

Os skyrmions foram experimentalmente identificados pela primeira vez no magneto quiral MnSi [31] e $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ [29], que são metais de transição que cristalizam no grupo espacial $P2_13$, portanto, não têm simetria de inversão espacial, e pertencem ao grupo B20. Outros materiais com estas características são compostos metálicos de transição monosilicídios e monogermanídios, como $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$, $\text{Mn}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, FeGe, MnGe e misturas deles e isolantes como o Cu_2OSeO_3 .

O modelo mais utilizado para descrever um magneto quiral como o MnSi e FeGe, no qual o principal mecanismo de geração de skyrmions é a interação DM, consiste no hamiltoniano de Bak [70] que, em uma aproximação contínua, é dado por:

$$\mathcal{H} = \int d\vec{r} \left[\frac{J}{2} (\vec{\nabla} \vec{M})^2 + D \vec{M} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{M}) - \vec{H} \cdot \vec{M} \right], \quad (2.13)$$

onde $\vec{H}$ é o campo magnético, $\vec{M}$ é a magnetização local e D é a constante de interação de Dzyaloshinskii-Moriya. Esse modelo foi adaptado por Yi [17] para uma rede discreta de spins em duas dimensões, sendo dado por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J \sum_{\vec{r}} \vec{S}_{\vec{r}} \cdot (\vec{S}_{\vec{r}+\hat{x}} + \vec{S}_{\vec{r}+\hat{y}}) - D \sum_{\vec{r}} \left(\vec{S}_{\vec{r}} \times \vec{S}_{\vec{r}+\hat{x}} \cdot \hat{x} + \vec{S}_{\vec{r}} \times \vec{S}_{\vec{r}+\hat{y}} \cdot \hat{y} \right) + \\ & A_1 \sum_{\vec{r}} \left[(\vec{S}_{\vec{r}}^x)^4 + (\vec{S}_{\vec{r}}^y)^4 + (\vec{S}_{\vec{r}}^z)^4 \right] - A_2 \sum_{\vec{r}} \left(\vec{S}_{\vec{r}}^x \vec{S}_{\vec{r}+\hat{x}}^x + \vec{S}_{\vec{r}}^y \vec{S}_{\vec{r}+\hat{y}}^y \right) - \vec{B} \cdot \sum_{\vec{r}} \vec{S}_{\vec{r}}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde $\vec{S}_{\vec{r}}$ é o vetor de spin unitário na posição $\vec{r}$ em uma rede bidimensional quadrada com parâmetro de rede $a = 1$, J é a constante de troca isotrópica, D é a constante de Dzyaloshinskii-Moriya, A_1 e A_2 são anisotropias e $\vec{B} = B\hat{z}$ é o campo magnético externo. A razão entre a constante de Dzyaloshinskii-Moriya e a constante de troca

2. Skyrmions

está diretamente relacionada à periodicidade (P) da rede de skyrmions [61] é dada por

$$P = 2\pi a \left[\arctan \left(\frac{2\sqrt{2}D}{4J + A_2} \right) \right]^{-1}. \quad (2.15)$$

Vale lembrar que o vetor Dzyaloshinskii-Moriya para o MnSi é do tipo $\vec{D}_{ij} = D\hat{r}_{ij}$ [58], onde $\hat{r}_{ij}$ é a direção de ligação entre os spins i e j . A partir daí, tal modelo vem sendo utilizado na maioria dos trabalhos de simulação computacional pra descrever tais materiais.

2.1.3 Termodinâmica típica de magnetos quirais

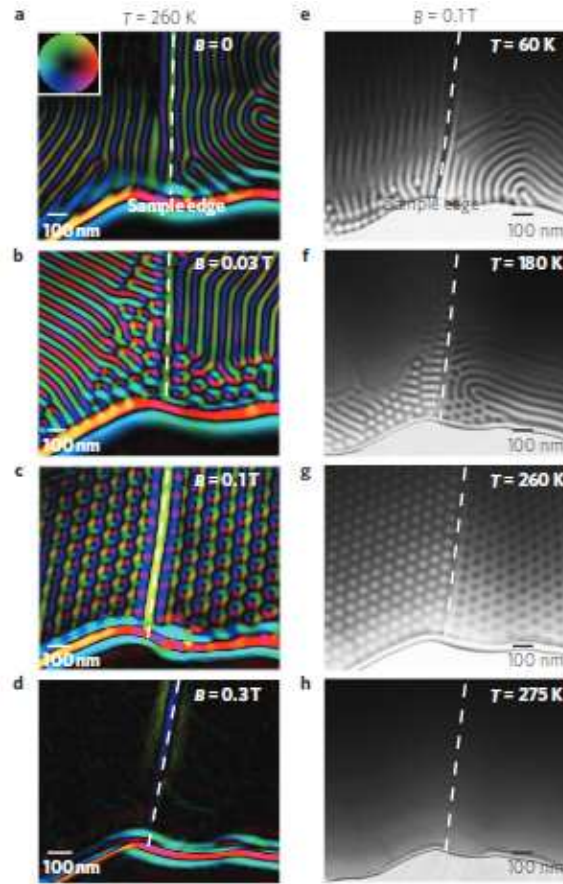


Figura 2.8: Rede de skyrmions em FeGe. Nas figuras da esquerda, a) a d), a temperatura foi mantida fixa e o campo magnético externo foi variado. Nas figuras da direita, e) a h), foi mantido o campo magnético externo e a temperatura foi variada. Figura extraída da Ref. [35]

2. Skyrmions

A formação de redes de skyrmions na fase-A de metais ferromagnéticos como MnSi [31], e outros compostos de estrutura B20 [29,71], foram detectadas através de experimentos com difração de neutrons em pequenos ângulos, que apontam padrões hexagonais consistentes com redes triangulares de Skyrmions. No entanto, também já foram realizadas observações de skyrmions formando redes cristalinas no espaço real, através da técnica de microscopia eletrônica de transmissão de Lorentz. Um exemplo é apresentado na Figura 2.8, em que temos a rede no espaço real em um filme fino de $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$ sob um campo magnético perpendicular [35].

Nas figuras da esquerda, a) a d), a temperatura foi mantida fixa. Nesta temperatura, na ausência de campo, o sistema encontra-se numa fase helical. Ao se aplicar campo externo, na medida em que o campo aumenta, as “stripes” vão dando lugar a skyrmions, até que a rede de skyrmions fica estabelecida e, acima de um certo valor de campo, o sistema migra para a fase ferromagnética. Nas figuras da direita, e) a h), verifica-se comportamento similar. No entanto, nestas figuras, foi mantido um campo magnético externo e a temperatura é que foi variada. Para baixas temperaturas, o estado é helical, mas, na medida em que a temperatura foi sendo aumentada, os skyrmions foram aparecendo no sistema até a rede de skyrmions ser formada. A partir de certa temperatura, o sistema migra para o estado paramagnético.

Os diagramas de fases destes materiais apresentam as mesmas características, independentemente de os materiais serem metais, semicondutores ou isolantes (MnGe é talvez a única exceção [72]), apresentando basicamente três regiões especiais: um estado helical, um estado cônico e um estado chamado de Fase A, que já foi identificado como uma rede hexagonal de skyrmions. Nestes sistemas, o estado fundamental tem uma modulação helimagnética até um determinado campo B_{C_1} e é chamado de estado helical. Neste estado, o vetor de onda q tem uma módulo fixo, mas a direção não, e o plano de spins é perpendicular a q . No entanto, em magnetos helicais bidimensionais, a direção do vetor de onda está confinada ao plano porque a espessura da amostra é menor que o comprimento de onda helical. Para campos magnéticos em um intervalo $B < B_{C_2}$, em magnetos tridimensionais uma modulação helical paralela ao campo é estabilizada, formando o que é chamado de fase cônica, sendo que, logo abaixo de

2. Skyrmions

T_C , há uma pequena região, chamada inicialmente chamada de fase A, recentemente identificada como sendo uma rede de skyrmions [29,31,73], em que a modulação helical é perpendicular ao campo aplicado. Em magnetos helicais bidimensionais, na presença de campos perpendiculares ao plano de spins, a fase cônica não é estabilizada, de maneira que a rede de skyrmions abrange uma região muito maior no diagrama de fases e permanece estável até mesmo em baixas temperaturas, conforme podemos observar na figura (2.9(a)), que mostra o diagrama de fases experimental obtido por Yu “*et al*” [33] para um filme fino de $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$, e na figura (2.9(b)), que mostra o diagrama teórico realizado através de simulações de Monte Carlo para uma rede bidimensional de spins sem termos de anisotropia. Estes diagramas mostram que a fase skyrmiônica existe mesmo em temperaturas muito baixas como pode ser visto na figura.

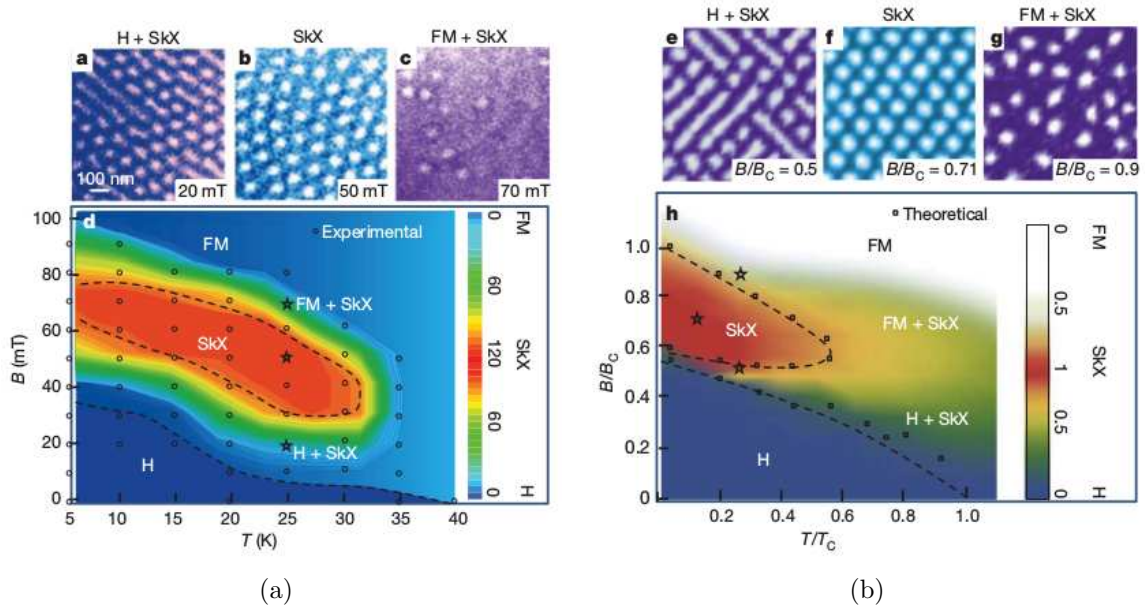


Figura 2.9: Diagramas de fase de estruturas magnéticas e texturas de spin (a) experimental - baseado em observações no espaço real usando Microscopia eletrônica de Transmissão em um filme de $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$; (b) obtido por simulações de Monte Carlo para o modelo descrito pela eq. (2.14) com $A_1 = 0$, $A_2 = 0$ e $B = (0, 0, B)$. H, representa estrutura helical; SkX, estrutura cristalina de skyrmions; FM, estrutura ferromagnética; FM+SkX e H+SkX representam a coexistência de duas destas estruturas magnéticas. Figura extraída da Ref. [33]

Estudos termodinâmicos realizados por Yi *et al* [17] através de simulações de Monte Carlo para magnetos quirais usando o modelo descrito na seção anterior -

2. Skyrmions

eq. (2.14), revelam um rico diagrama de fases que inclui diferentes tipos de redes skyrmiônicas, como mostrado na Figura (2.10).

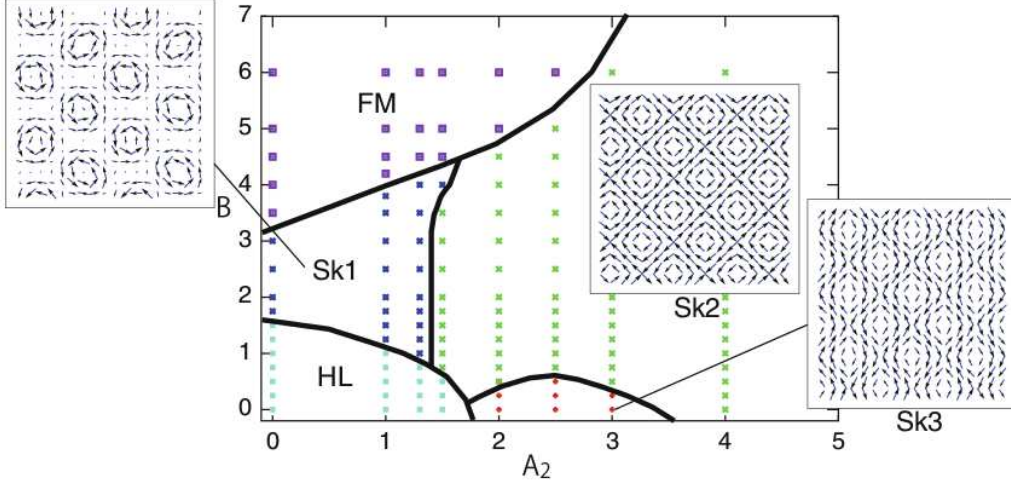


Figura 2.10: Diagrama de fases teórico A_2 em $T = 0$ para um magneto quiral descrito pela eq. (2.14) com $B = (0, 0, B)$ obtido por simulação de Monte Carlo. Rede com 18×18 sítios com condição de contorno periódica e parâmetros $J = 1$, $D = \sqrt{6}$, $A_1 = 0,5$ e $|S| = 1$. Sk1 é uma rede triangular de skyrmions e Sk2 e Sk3 são um tipo diferente de fase cristalina skyrmiônica. HL e FM indicam fases helical e ferromagnética, respectivamente. Figura extraída da Ref. [74].

Estudos de grandezas como o calor específico e a susceptibilidade magnética têm ajudado identificar a natureza das transições de fase e os contornos da fase A nos diagramas [27]. O calor específico C do MnSi, por exemplo, medido para diferentes campos magnéticos H , é mostrado na figura (2.11). Na ausência de campo magnético externo, um pico acentuado, indicando uma transição de primeira ordem, é observado em T_c . Ao passar da fase paramagnética para a fase helical, a transição de fase de primeira ordem é dirigida por flutuações causadas pela abundância de modos “softs”, o que pode ser descrito em termos do cenário de Brazovskii [32,75]. Com o aumento do campo H , este pico desloca para temperaturas ligeiramente mais baixas, enquanto sua magnitude é suprimida, de acordo com o diagrama de fases típico mostrado na figura (2.11). O pico da transição de primeira ordem é acompanhado por uma faixa larga, como um ombro, que diminui com o aumento de H , resultando em um ponto de transição característico em $T^* = 30,8K$ [76]. Esta ombro é uma reminiscência de uma

2. Skyrmions

transição de segunda ordem [32] que ocorre para campos mais altos $H > H_{C_2} \approx 0,55T$, onde a ordem helimagnética é suprimida e a transição ocorre entre as fases de campo polarizado (PF) e paramagnética (PM).

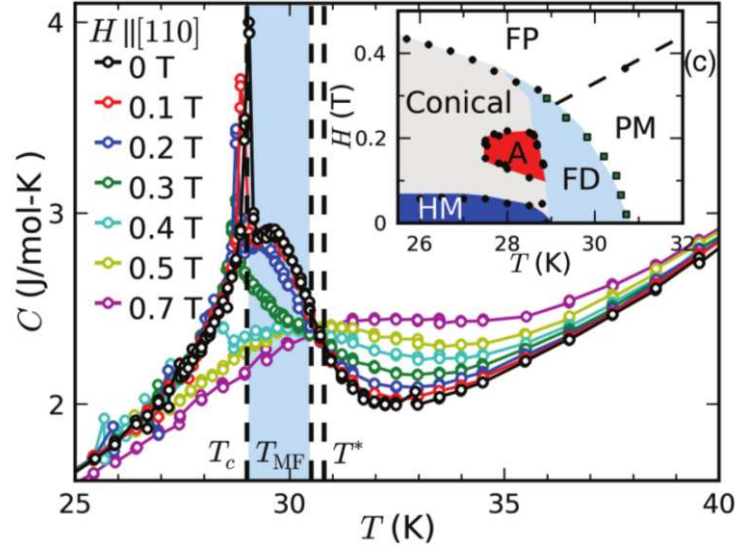


Figura 2.11: Calor específico C para diferentes campos magnéticos. T_C e T^* indicam a posição do pico característico de uma transição de primeira ordem e um ponto invariante de Vollhardt, para o qual $\partial_H C(T) = 0$, respectivamente. O gráfico inserido à direita mostra o diagrama de fase magnética típico para o $MnSi$. HM, FP, FD e PM correspondem à fase helimagnética, campo polarizado (field-polarized), estados misturados (fluctuation-disordered paramagnetic), e paramagnética (mean-field disordered paramagnetic). “A” corresponde à fase A que na qual se tem redes de skyrmions. Figura extraída da Ref. [76]

2.1.4 Dinâmica típica de magnetos quirais

A dinâmica de excitações magnéticas frente a aplicação de uma corrente elétrica, como o movimento de paredes de domínio magnético, tem um papel essencial em dispositivos spintrônicos. Correntes elétricas na ordem de $10^5 - 10^8 \text{ Acm}^{-2}$ são necessárias para mover a parede de domínio magnético convencional ou um vórtice magnético em nanoestruturas ferromagnéticas (FM). Tais densidades de corrente elevadas provocam um efeito Joule intenso, o que torna tais estruturas impróprias para aplicações práticas em spintrônica. No entanto, uma densidade de corrente elétrica muito menor, da ordem de 10^2 Acm^{-2} , é capaz de movimentar um skyrmion. Esta característica tem atraído um interesse significativo para os skyrmions.

2. Skyrmions

A movimentação do skyrmion através da aplicação de corrente elétrica foi primeiramente evidenciada por um estudo de espalhamento de neutrons combinado com medidas de efeito Hall feito por Jonietz *et al* [40]. Usualmente, uma corrente polarizada de spins é obtida aplicando uma corrente elétrica na amostra com um momento magnético finito, mas existem outras maneiras como aplicação de um gradiente de temperaturas ou do gradiente de um campo magnético na amostra [77].

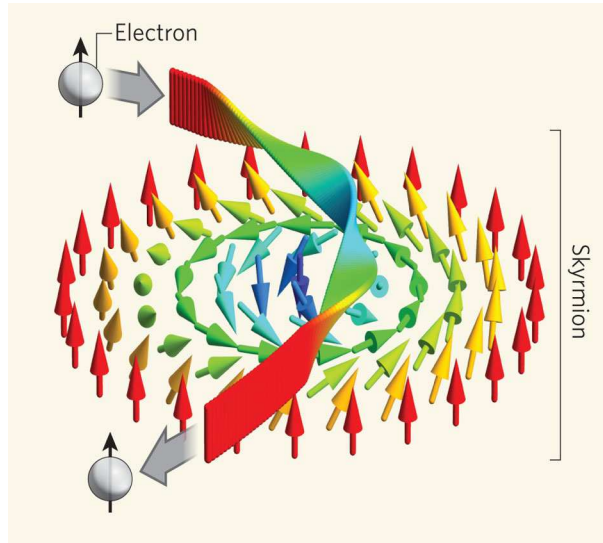


Figura 2.12: (a) Quando o elétron se move através de uma textura magnética, seu momento magnético (spin) gira adiabaticamente acompanhando a magnetização local. Este giro, provoca uma mudança na direção da velocidade do elétron, o que acaba por empurrar elétron e skyrmion em direções opostas (não mostrado na figura). Figura adaptada da Ref. [71].

Quando os elétrons de condução em um metal se movem através de uma textura magnética, seu spin muda de direção, de acordo com a magnetização local, o que está ilustrado na figura 2.12. Estes spins adquirem uma fase de Berry, que pode ser vista como uma fase de Aharonov-Bohm que surge de um campo efetivo. Esse campo induz uma força de Lorentz, que gera o movimento de translação do skyrmion através do material. Essa força dá origem a uma contribuição “topológica” adicional para o efeito Hall, proporcional ao produto do campo pela polarização local dos elétrons de condução, que já foi detectada experimentalmente [73,78]. Assim, uma vez que os elétrons são defletidos por esta força, é exercida uma força sobre a estrutura magnética de modo que pode aparecer um “acoplamento giromagnético” entre a corrente e a rede

2. Skyrmions

de skyrmions.

De acordo com Jonietz *et al* [40], de uma maneira bem simplificada, é como se o skyrmion pudesse ser visto como correntes circulares de spins sem dissipação, já que eles são caracterizados por gradientes na orientação dos spins. Quando uma corrente extra de spins, ou seja, uma corrente elétrica, atravessa o material, de um lado dos skyrmions a corrente é reforçada e do outro diminuída, dando origem a uma força de Magnus atuando nos skyrmions, de maneira semelhante a uma bola que, quando é lançada girando, sofre uma deflexão da trajetória que teria se ela não estivesse girando. A figura 2.13(a) ilustra a força de Magnus e a força “dissipativa”, que ocorre devido à corrente elétrica aplicada, atuando à esquerda em uma bola girando em movimento (as setas cinzas correspondem ao fluxo de ar) e à direita em uma rede de skyrmions (as setas cinzas correspondem à corrente elétrica).

Além do movimento de translação, gerado pelas forças “dissipativas” e pelas forças de Magnus, tanto as forças dissipativas, que arrastam os skyrmions paralelamente à corrente elétrica aplicada, quanto as forças de Magnus, que atuam perpendicularmente à corrente elétrica aplicada, na presença de gradiente de temperatura ou campo perpendicular à corrente aplicada, são responsáveis por gerar um torque sobre a estrutura de spin. As forças que atuam no skyrmion, sob tais condições, não são homogêneas, o que gera o torque na própria estrutura do skyrmion, dependendo da orientação do gradiente. A figura 2.13(b) mostra como o torque sobre a estrutura do skyrmion pode ser gerado por estas forças e sua dependência com a orientação do gradiente na temperatura em relação à corrente elétrica. Por fim, além da força de Magnus e das forças dissipativas, também aparecem forças do próprio material da amostra e de impurezas atuando sobre os skyrmions que tendem a fixá-los no mesmo lugar, são as chamadas forças de “pinning”. Assim, se não houver corrente elétrica aplicada, não há força de Magnus, nem dissipativas, portanto, o skyrmion não se desloca pela rede devido às forças de “pinning”.

Simulações numéricas utilizando a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, feitas por Iwazaki, Mochizuki e Nagaosa [38], para magneto quirral bidimensional com impurezas, implementadas através de anisotropias de eixo fácil, representando forças de

2. Skyrmions

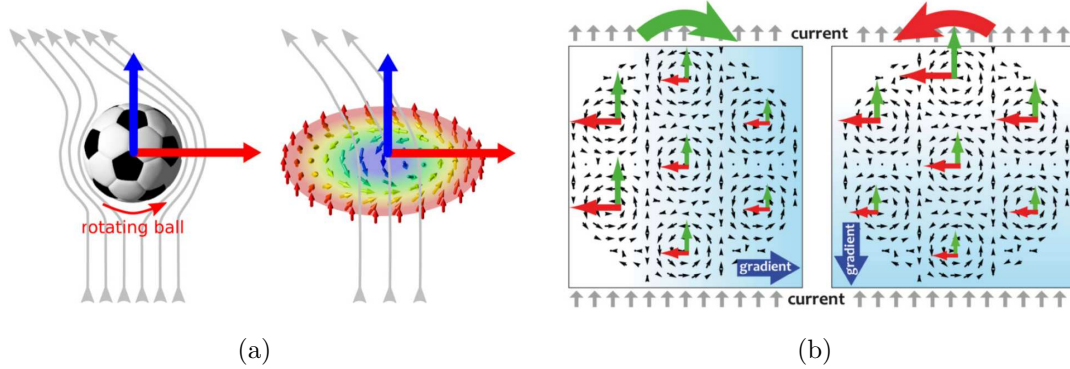


Figura 2.13: (a) Aqui a força de Magnus está representada pela seta vermelha, cuja origem está relacionada à fase de Berry, e em azul encontram-se as forças dissipativas, cuja origem está nas correntes elétricas aplicadas. (b) Representação esquemática das forças, paralelas à corrente elétrica (forças dissipativas em verde) e perpendiculares (força de Magnus em vermelho), que atuam em um skyrmion. Na presença de gradientes de temperatura ou campo, estas forças não são homogêneas ao longo da estrutura do skyrmion, induzindo torques sobre este que dependem sensivelmente da orientação da corrente e do gradiente. As setas pretas correspondem à magnetização local no skyrmion projetada no plano perpendicular ao campo externo. Figura adaptada das Refs. [77] e [79] respectivamente.

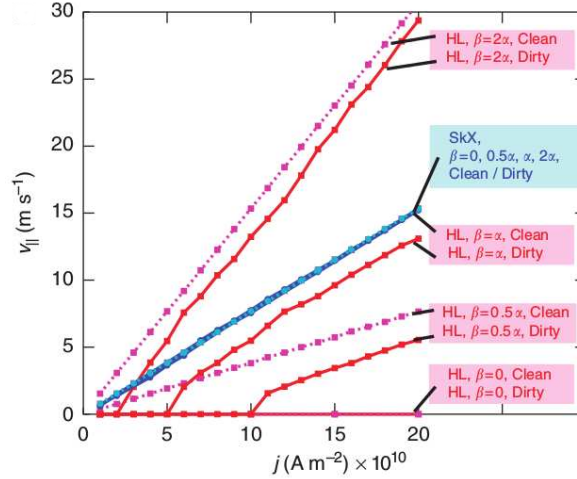


Figura 2.14: Velocidade longitudinal $v_{\parallel}$ induzida por correntes nas fases helicais (HL) e skyrmiônica (SkX) em função da densidade de corrente j para vários valores de β e concentração de impurezas. Na fase Skx a velocidade independe destes fatores. Figura adaptada da Ref. [38].

“pinning”, revelaram que existe uma relação universal corrente-velocidade para o movimento de um skyrmion praticamente independente de efeitos adiabáticos ou de impurezas. A figura 2.14 mostra a velocidade $v_{\parallel}$ (paralela a $\vec{j}$) como função da densidade

2. Skyrmions

de corrente $\vec{j}$ para as fases helicais (HL) e skyrmiônica (Skx) para diferentes valores de β (efeitos não adiabáticos), concentração de impurezas ($x = 0$ - “clean”, $x = 0,1\%$ - “dirty”). Na fase skyrmiônica ela permanece independente destes fatores, de acordo com o que é esperado pelo processo de transferência de torque de spin $v_{\parallel} = \frac{pa^3}{2eM}j$ [38].

Capítulo 3

Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

Neste capítulo analisamos, através de simulações de Monte Carlo, a influência de segundos vizinhos na termodinâmica de sistemas que apresentam redes de skyrmions. A partir da análise das grandezas termodinâmicas calculadas, foram montados diagramas de fase inéditos. Assim, neste capítulo apresentamos a Hamiltoniana utilizada neste estudo, bem como detalhes das técnicas computacionais, os resultados obtidos - com discussão, conclusão e perspectivas de continuação deste estudo. Parte dos resultados aqui apresentados estão publicados em: Oliveira et al 2017 J. Phys.: Condens. Matter <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa63dd>

3.1 Hamiltoniana utilizada

Estamos considerando uma abordagem semiclássica para uma rede quadrada de spin, tamanho L , separados de um parâmetro de rede “ a ” uns dos outros, com condições de contorno periódicas, na presença de um campo magnético externo uniforme $\vec{B}$ perpendicular ao plano da rede, neste caso, paralelo ao eixo z . O fato de

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

escolhermos fazer a abordagem semiclássica implica, primeiramente, tratarmos o spin como um vetor. Para estudarmos o comportamento desta rede consideramos as seguintes interações/correções: interação de troca direta de Heisenberg, termo de zeeman e interação de Dzyaloshinskii-Moriya.

A hamiltoniana de Heisenberg, como vimos no capítulo 1 descreve a interação de troca entre os spins e, numa rede discreta, é dada pela seguinte expressão (Eq. 1.2):

$$\mathcal{H}_H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (3.1)$$

onde a soma $\langle i, j \rangle$ é feita sobre os vizinhos e J_{ij} é a constante de troca (*exchange*) e mede a intensidade da interação de troca entre os spins. Geralmente a soma na expressão (1.2) é feita apenas sobre primeiros vizinhos, mas neste trabalho, estamos interessados em saber a influência dos segundos vizinhos no comportamento da rede. Assim, estamos considerando até os segundos vizinhos mais próximos. Além disso, estamos considerando o sistema isotrópico, o que significa dizer que a constante de troca é a mesma para quaisquer pares de primeiros vizinhos, assim como é a mesma para quaisquer pares de segundos vizinhos. Porém, considerando a interação entre segundos vizinhos menor que a interação entre primeiros vizinhos, usamos $J_1 = cte_1 > J_2 = cte_2$. Dessa forma, a hamiltoniana que descreve a interação de troca, para nosso caso, é dada pela seguinte expressão:

$$\mathcal{H}_{H_2} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_1 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} J_2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (3.2)$$

onde $\langle i, j \rangle$ representam a soma sobre primeiros vizinhos e $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ representa a soma sobre segundos vizinhos. Numa abordagem quântica, $\mathbf{S}_i$ é o operador de spin atuando sobre funções de onda. Porém, como estamos adotando uma abordagem semiclássica, estes operadores podem ser identificados como vetores do tipo $\vec{S} = (\text{sen}(\theta)\cos(\phi), \text{sen}(\theta)\text{sen}(\phi), \cos(\theta))$, onde θ e ϕ são os ângulos polar e azimutal, respectivamente. Além da interação de troca estamos também considerando a interação

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

dos spins com o campo magnético externo através do termo de zeeman, dado por:

$$\mathcal{H}_B = - \sum_i \vec{B} \cdot \vec{S}_i. \quad (3.3)$$

Essa interação tem como principal efeito o alinhamento entre os spins provocando uma magnetização não nula. Por fim, estamos considerando a interação de Dzyaloshinskii-Moriya, que, conforme discutido no capítulo 1, é uma extensão da interação de super-troca considerando efeitos relativísticos da interação spin-órbita, e que tem a seguinte forma

$$\mathcal{H}_{DM} = - \sum \vec{D} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_j. \quad (3.4)$$

Conforme discutido ainda no capítulo 1, o vetor de Dzyaloshinskii-Moriya depende da simetria do material e sua direção é dada pelas regras apresentadas por Moriya [55]. Assumimos materiais que tenham um vetor $\vec{D}$ do tipo $D\vec{r}_{ij}$, onde $\vec{r}_{ij}$ é o vetor posição do spin localizado no sítio j em relação ao spin do sítio i , e D é uma constante, ou seja, assumimos um material cujo vetor Dzyaloshinskii-Moriya esteja ao longo da ligação entre os átomos, que é a direção do vetor $\vec{D}$ em materiais com estrutura cristalina $B20$ como MnSi [58] e $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$ [33]. Assim, a interação Dzyaloshinskii-Moriya entre um spin S_i spin e seus vizinhos S_j passa a ser dada pela seguinte expressão

$$\mathcal{H}_{DM} = -D \sum_{j=1}^4 \vec{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_j, \quad (3.5)$$

onde, neste caso, D é uma constante. Para o caso de considerarmos a interação de Dzyaloshinski-Moriya atuando até segundos, os termos em nossa hamiltoniana correspondentes a esta interação é dado por:

$$\mathcal{H}_{DM_2} = -D_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_j - D_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \vec{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_j, \quad (3.6)$$

onde $\langle i, j \rangle$ representam a soma sobre primeiros vizinhos e $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ representa a soma sobre segundos vizinhos. Assim, a hamiltoniana utilizada neste estudo é dada por:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{H_2} + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{DM_2}. \quad (3.7)$$

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

Para o estudo utilizamos unidades reduzidas $J_1 = 1$, $a = 1$ e $K_B = 1$ e $D_1/J_1 = \sqrt{6}$, que de acordo com a equação 2.15, para $A_2 = 0$, resulta numa rede de skyrmions com periodicidade aproximadamente $P = 9a$, e variamos outros parâmetros nos seguintes intervalos: $-1.0 < J_2 < 1.0$, $0.0 < D_2 < 1.0$ e $0 < B_z < 4.0$, mas apresentamos resultados apenas nos intervalos mais convenientes, ou seja, em que o sistema apresenta um comportamento interessante. Além disso, normalizamos o spin em 1.

3.2 Métodos Utilizados

3.2.1 O Método de Monte Carlo

Em mecânica estatística usualmente se procura por variáveis termodinâmicas, como energia ou magnetização, que são basicamente uma média ponderada sobre todos os estados no espaço de fase [80]. Consideremos um processo com M resultados. Cada resultado $A_1, A_2, \dots, A_j, \dots, A_M$ é um evento e possui uma probabilidade $P(A_j) = P_j \geq 0$ de ocorrer. Consideremos ainda eventos mutuamente excludentes, ou seja, dois eventos não ocorrem simultaneamente. Neste caso, $P(A_i \text{ e } A_j) = 0$ enquanto a probabilidade e ocorrência de A_i ou A_j é dada por $P(A_i \text{ ou } A_j) = P(A_i) + P(A_j)$. A probabilidade de um evento A_j ocorrer em M medidas com M_j resultados é dada por:

$$P_j = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{M_j}{M}. \quad (3.8)$$

De maneira que

$$\sum_j P_j = 1. \quad (3.9)$$

Assim, o valor esperado de uma grandeza $\langle A \rangle$ de um processo é definido como [81]

$$\langle A \rangle = \sum_j A_j P_j. \quad (3.10)$$

Como estamos tratando neste trabalho com materiais magnéticos, é coerente usar a ensemble canônico que descreve sistemas em contato com um reservatório

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

térmico, com volume e número de partículas fixos, ou seja, descreve bem sistemas em contato com um reservatório térmico por uma parede diatérmica (que permite troca de calor) fixa e impermeável. No ensemble canônico, a probabilidade de se encontrar o sistema num microestado j é dada por [82].

$$P(A_j) = \frac{1}{Z} \exp[-\beta E(A_j)] , \quad (3.11)$$

onde $E(A_j)$ é a energia na j -ésima configuração, $\beta = 1/K_B T$, sendo K_B a constante de Boltzmann $K_B = 1.38 \times 10^{-23} JK^{-1}$, e Z é a chamada função de partição, dada por

$$Z = \sum_j^M \exp[-\beta E(A_j)] . \quad (3.12)$$

A soma da Eq. 3.12 deve ser feita sobre os estados acessíveis ao sistema. Devido ao enorme número de graus de liberdade de sistemas como os sistemas magnéticos, realizar essa soma exatamente é impossível. Neste sentido usar métodos aproximados, como o Método de Monte Carlo, é uma necessidade. O objetivo do Método de Monte Carlo em mecânica estatística de equilíbrio é usar números pseudo-aleatórios para compor uma amostra representativa de microestados j da distribuição de probabilidade no equilíbrio [83], ou seja, tomamos apenas as configurações mais relevantes, desde que grande o suficiente para ter um resultado de boa qualidade. Basicamente, ao invés de escolher configurações aleatórias e pesá-las com $\exp(-E/K_B T)$, escolhemos configurações com probabilidade $\exp(-E/K_B T)$ e pesamos uniformemente. Dessa forma, como os estados têm o mesmo peso de Boltzmann, a Eq. 3.10 se torna uma média simples.

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_j^M A_j . \quad (3.13)$$

Consideremos um ensemble de microestados que tem uma certa distribuição de probabilidade inicial $P(q, 0)$. Num processo Markoviano, em que cada microestado gerado só depende do estado anterior, a evolução da taxa de distribuição $P(q, t)$ é dada

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

por

$$P(q, t + 1) = P(q, t) + \sum_{q'} P(q', t) W(q' \rightarrow q) - P(q, t) \sum_{q'} W(q \rightarrow q'), \quad (3.14)$$

onde $W(q \rightarrow q')$ é a taxa de transição do estado q pro estado q' . No estado estacionário, $t \rightarrow \infty$. Assim, espera-se que $P(q, t) \rightarrow P_i$, ou seja, espera-se que a probabilidade de um microestado, no equilíbrio, seja independente do tempo. Neste caso:

$$\sum_{q'} P_{eq}(q', t) W(q' \rightarrow q) - P_{eq}(q, t) \sum_{q'} W(q \rightarrow q') = 0. \quad (3.15)$$

A equação acima é conhecida como condição de balanço detalhado. Assim, se a taxa de transição obedece à equação de balanço detalhado (Eq. 3.15) e o processo randômico da Eq. 3.14 pode alcançar cada microestado a partir de qualquer outro microestado através de um número finito de passos, condição de ergodicidade, a distribuição de probabilidades se aproxima da distribuição de equilíbrio.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(q, t) = P_{eq}(q). \quad (3.16)$$

O que implica em

$$W(q \rightarrow q') = W(q' \rightarrow q) \frac{P_{q'}}{P_q}. \quad (3.17)$$

Da Eq. 3.11 podemos ver que, no ensemble canônico, a taxa de transição de um microestado para outro não depende do conhecimento da função de partição Z (Eq. 3.12), mas sim da diferença de energia entre eles ΔE , isto é,

$$\frac{W(q \rightarrow q')}{W(q' \rightarrow q)} = \exp\left(\frac{-\Delta E}{K_B T}\right). \quad (3.18)$$

Um algoritmo muito usado para determinar a amostragem por importância das M configurações mais relevantes é o Algoritmo de Metropolis, que é utilizado neste trabalho.

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

3.2.2 O Algoritmo de Metropolis

Qualquer taxa de transição que satisfaça o balanço detalhado pode ser utilizada em uma simulação Monte Carlo. Para o Algoritmo de Metropolis a taxa de transição é dada por:

$$W_{q,q'} = \begin{cases} \exp\{-\beta[E(q') - E(q)]\} & \text{se } \Delta E > 0 \\ 1 & \text{se } \Delta E < 0 \end{cases} \quad (3.19)$$

O Algoritmo de Metropolis gera uma sequência de configurações estocásticas independentes $q_1, q_2, \dots, q_t, q_{t+1}, \dots, q_M$, de tal forma que a configuração q_{t+1} seja gerada a partir de q_t , ou seja, pelo processo de Markov, através da probabilidade condicional de transição $P(q_{t+1}|q_t)$, de maneira que o sistema seja conduzido à distribuição de equilíbrio

$$P_{eq}(q_t) = \frac{1}{Z} \exp[-\beta E(q_t)] , \quad (3.20)$$

e condição suficiente para que se atinja o estado de equilíbrio é dada pelo princípio do balanço detalhado (Eq. 3.15). O algoritmo de Metropolis pode ser escrito da seguinte maneira:

- 1 Especificar uma configuração inicial q_t . No nosso caso adotamos uma configuração inicial em que cada spin tem uma direção aleatória;
- 2 Gerar uma nova configuração q_{t+1} (a partir da anterior). No nosso caso, escolhemos aleatoriamente um spin da rede e sorteamos uma nova orientação para ele, com $0 \leq \theta \leq 2\pi$ e $0 \leq \phi \leq \pi$;
- 3 Calcular a diferença de energia entre as configurações;
- 4 Se $\Delta E < 0$, aceitar a nova configuração e retornar ao passo 2;
- 5 Se não, calcular $\exp(-\beta\Delta E)$;
- 6 Gerar um número aleatório $r \in [0, 1]$;
- 7 Se $r \leq \exp(-\beta\Delta E)$, aceitar a nova configuração e retornar ao passo 2;

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

8 Caso contrário, manter a configuração inicial e retornar ao passo 2.

Como em todo o trabalho utilizamos unidades reduzidas, fizemos $K_B = 1$.

Termalização

De acordo com o algoritmo de Metropolis, a configuração inicial é uma configuração qualquer e, dificilmente, corresponde à configuração de equilíbrio do sistema. Na medida em que as cadeias de Markov vão sendo geradas e as novas configurações vão sendo aceitas ou não, de acordo com a prescrição de Metropolis, o sistema vai sendo levado para o estado de equilíbrio. Por isso, as primeiras configurações geradas devem ser descartadas. Descartar as configurações até que a configuração de equilíbrio seja alcançada é chamado de termalizar o sistema. Para saber se o sistema está termalizado deve-se olhar para as grandezas termodinâmicas de interesse e verificar se elas começaram a flutuar em torno de um valor médio. A partir daí, pode-se começar a tomar as médias termodinâmicas. Quando se repete este algoritmo N vezes, sendo N o número de partículas do sistema, dizemos que realizamos 1 passo de Monte Carlo (MCS - Monte Carlo “step”), pois demos a chance de todas as partículas do sistema sofrerem alguma alteração em sua configuração. Assim, para sistemas com L^2 partículas, que é o caso de uma rede quadrada de spins de lado L , a cada L^2 repetições do algoritmo fizemos 1 MCS . Neste trabalho utilizamos 5×10^5 MCS para termalizar o sistema. Além disso, a cada vez que se repete o algoritmo alteramos a configuração de uma única partícula do sistema, de maneira que todas as outras continuam na mesma configuração. Então duas configurações tomadas em sequência são altamente correlacionadas. Uma maneira de se descorrelacionar o sistema e repetir o algoritmo muitas vezes entre uma tomada de dados e outra para a obtenção de médias termodinâmicas, o que gera um custo computacional muito alto e perda de tempo. Uma outra maneira consiste em dividir a saída dos dados em um sub-conjuntos e calcular as médias para as configurações dentro cada sub-conjunto e depois fazer uma média dos valores dos feixes, junto com os desvios associados. Como tomamos 10^6 MCS para fazer as médias das grandezas termodinâmicas e utilizamos 20 feixes, dentro de cada feixe fizemos as médias utilizando 5×10^4 MCS .

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

O método de “Simulated Annealing”

O método de “simulated annealing” consiste em ir diminuindo a temperatura do sistema lentamente. Basicamente definimos uma temperatura inicial T_i ; termalizamos o sistema nesta temperatura e extraímos as médias termodinâmicas; utilizamos a última configuração obtida como configuração inicial; definimos uma nova temperatura um pouco mais baixa, $T_n = T_i - \Delta T$ e reiniciamos todo o processo de termalização do sistema na nova temperatura, repetindo os passos anteriores sucessivamente, até o sistema atingir a temperatura desejada. Neste trabalho iniciamos com uma temperatura $T = 7.0$ em unidades de (J/K_B) e fomos diminuindo em $\Delta T = 0.01$ até atingir a temperatura final de $T = 0.01$, tendo sido utilizado 5×10^5 MCS para termalizar o sistema em cada temperatura.

3.2.3 Grandezas Termodinâmicas

As grandezas termodinâmicas de interesse para análise de possíveis transições de fase no sistema calculadas neste trabalho foram: energia (E), componente z da magnetização (m_z), calor específico (C_B), susceptibilidade magnética da componente z do spin (χ_T). Além disso, o número de skyrmions e seu raio médio também foram calculados. No limite termodinâmico, tanto a energia quanto a magnetização são aproximadamente iguais aos seus valores esperados. Assim, a energia foi calculada a partir do hamiltoniano da rede, em cada MCS, como segue:

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle \quad (3.21)$$

e a magnetização ao longo do eixo z foi calculada somando as componentes z do do spin (S_z)

$$m_z = \langle S_z \rangle . \quad (3.22)$$

O calor específico a campo magnético (B) constante é dado por

$$C_B = K_B \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (3.23)$$

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

e a componente z da susceptibilidade magnética foi calculada usando a seguinte expressão

$$\chi_T = \beta (\langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2) . \quad (3.24)$$

O número de skyrmions foi calculado usando o número de skyrmion, ou carga topológica, $Q_{sky} = \sum \rho_{sky}(x)$, com

$$\rho = \frac{1}{4^2} \vec{S} \cdot \left[\left(\vec{S}_{i+a\hat{x}} - \vec{S}_{i-a\hat{x}} \right) \times \left(\vec{S}_{i+a\hat{y}} - \vec{S}_{i-a\hat{y}} \right) \right] \quad (3.25)$$

onde ρ_{sky} é a densidade de carga topológica. Para definir a carga topológica Q do skyrmion, calculamos a densidade de carga total sobre a área de um único skyrmion. Para calcular o número de skyrmions dividimos a carga total por Q [61,84]. Uma outra maneira de calcular o número de skyrmions é identificar o centro de cada skyrmion e os spins conectados a ele, como um “cluster”. Usando os dois métodos podemos diferenciar a redução do número de skyrmions devido à destruição dos skyrmions ou devido à uma mudança na configuração do sistema. Para o cálculo do raio médio dos skyrmions usamos o algoritmo de identificação de “clusters” para identificar cada skyrmion e calcular o número médio de spins em cada skyrmion n , que corresponde à área em unidades de a^2 , sendo a o parâmetro de rede, então

$$R = \sqrt{n/\pi} . \quad (3.26)$$

3.3 Resultados e Discussão

3.3.1 Considerando apenas interações de troca até segundos vizinhos

Nesta parte do trabalho consideramos $D_2 = 0$ na hamiltoniana 4.1, para avaliar o papel da interação de troca até segundos vizinhos. Assim, a hamiltoniana utilizada é dada por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_1 \vec{S}_i \times \vec{S}_j - \sum_{\langle i,k \rangle} J_2 \vec{S}_i \times \vec{S}_k - \sum_i \vec{B} \cdot \vec{S}_i - D_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_j \quad (3.27)$$

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

onde $\langle i, j \rangle$ são primeiros vizinhos e $\langle i, k \rangle$ são segundos vizinhos. Consideramos diferentes campos magnéticos externos, pois nos interessa a região no espaço de fases campo magnético $\times$ interação de troca entre segundos vizinhos $\left(B \times \frac{J_2}{J_1}\right)$ pois, tecnologicamente, é mais interessante encontrar condições em que redes de skyrmions apareçam na ausência de campo. Além disso, nossas redes não têm vacâncias ou impurezas.

Campo magnético externo $B_z = 0.0$

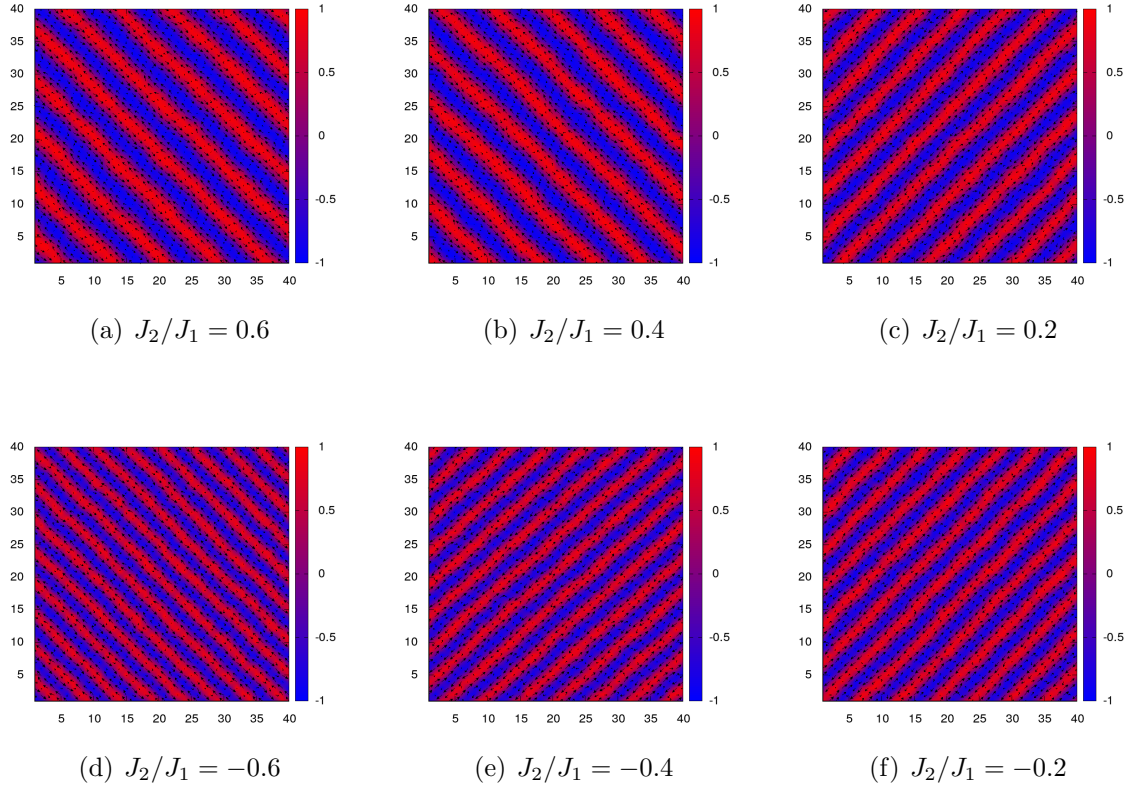


Figura 3.1: Estado de mais baixa energia ($T = 0.01J/K_B$) das redes com diferentes interações entre segundos vizinhos (J_2/J_1) na ausência de campo magnético.

A maioria dos materiais que apresentam excitações do tipo skyrmions, necessita da presença de campo magnético externo para a formação da rede de skyrmions, ou seja, a rede de skyrmions é estabilizada por um campo magnético. Estes materiais, na ausência de campo, apresentam estados helicais como estado fundamental. Robler

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

[2] mostrou que, teoricamente, a rede de skyrmions pode ser o estado fundamental do sistema sem necessidade de campo para estabilizá-la, o que foi comprovado em 2011, por Heinze “et al” [21], em que redes de skyrmions foram encontradas em filmes de Fe na ausência de campo magnético externo. O mais comum, no entanto, é que, na ausência de campo magnético externo, os materiais apresentem estados helicais como estado fundamental, pelo menos a maioria dos materiais estudados até aqui. Esse é o caso do nosso sistema, em que estado de mais baixa energia para $T = 0.01J/K_B$, na ausência de campo magnético externo, é o estado helical. A figura 3.1 mostra configurações de spin no espaço real das redes simuladas no estado de mais baixa energia para temperatura de $T = 0.01J/K_B$, para diferentes intensidades de interação entre segundos vizinhos. Podemos constatar, pelas figuras, que a interação entre segundos vizinhos provoca uma alteração no período dos estados helicais, mas não foram capazes, pelo menos para as intensidades testadas, de fazer emergir a rede de skyrmions na ausência de campo externo. Nesta figura, as setas representam a projeção no plano xy dos spins da rede e a cor representa a componente “z” dos spins, que vai de “azul” ($S_z = -1$) até “vermelho” ($S_z = 1$), no espaço real. Uma ampliação é dada na figura 3.2.

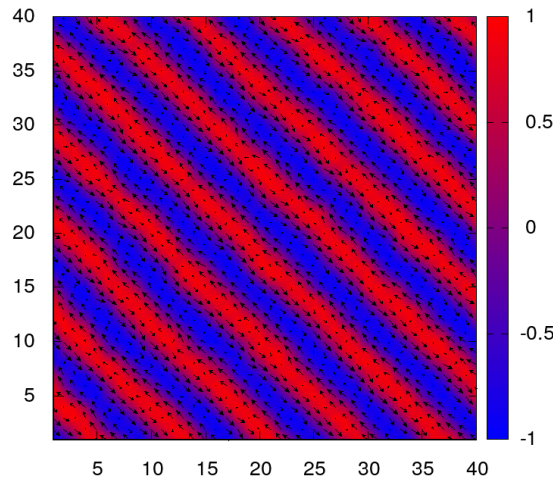


Figura 3.2: Estado de mais baixa energia ($T = 0.01J/K_B$) da rede com $J_2/J_1 = 0.6$ na ausência de campo magnético.

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

Analisemos o que ocorre com a variação da temperatura para um caso específico. A figura 3.3 mostra o que ocorre na rede com interação de troca $J_2/J_1 = 0.8$ à medida em que a temperatura vai aumentando.

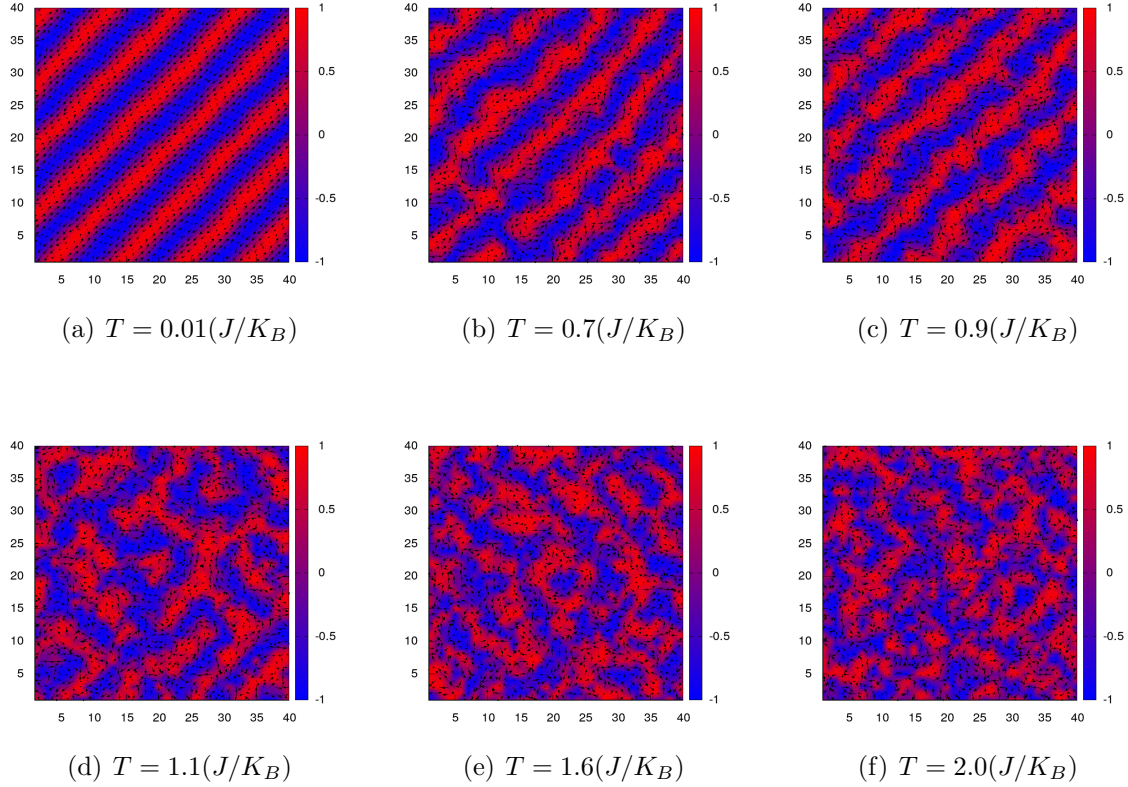


Figura 3.3: Rede no espaço real com $J_2/J_1 = 0.8$ em diferentes temperaturas na ausência de campo magnético. Em (a) temos como o estado de mais baixa energia o estado helical bem definido. Com o aumento da temperatura o sistema vai desordenando até se tornar paramagnético.

Da figura 3.3 podemos inferir uma transição de fase do estado helical para o estado paramagnético por volta de $T = 1.0$, o que pode ser confirmado com os gráficos do calor específico, figura 3.4(a), e da susceptibilidade magnética, figura 3.4(b), pelos picos apresentados, indicando a transição do tipo ordem-desordem e da energia 3.4(c), através da mudança na concavidade por volta desta mesma temperatura. O gráfico do calor específico expressa um comportamento típico de magnetos quirais, apresentando um pico seguido por uma sobressalência à direita. A transição para a fase helical é

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

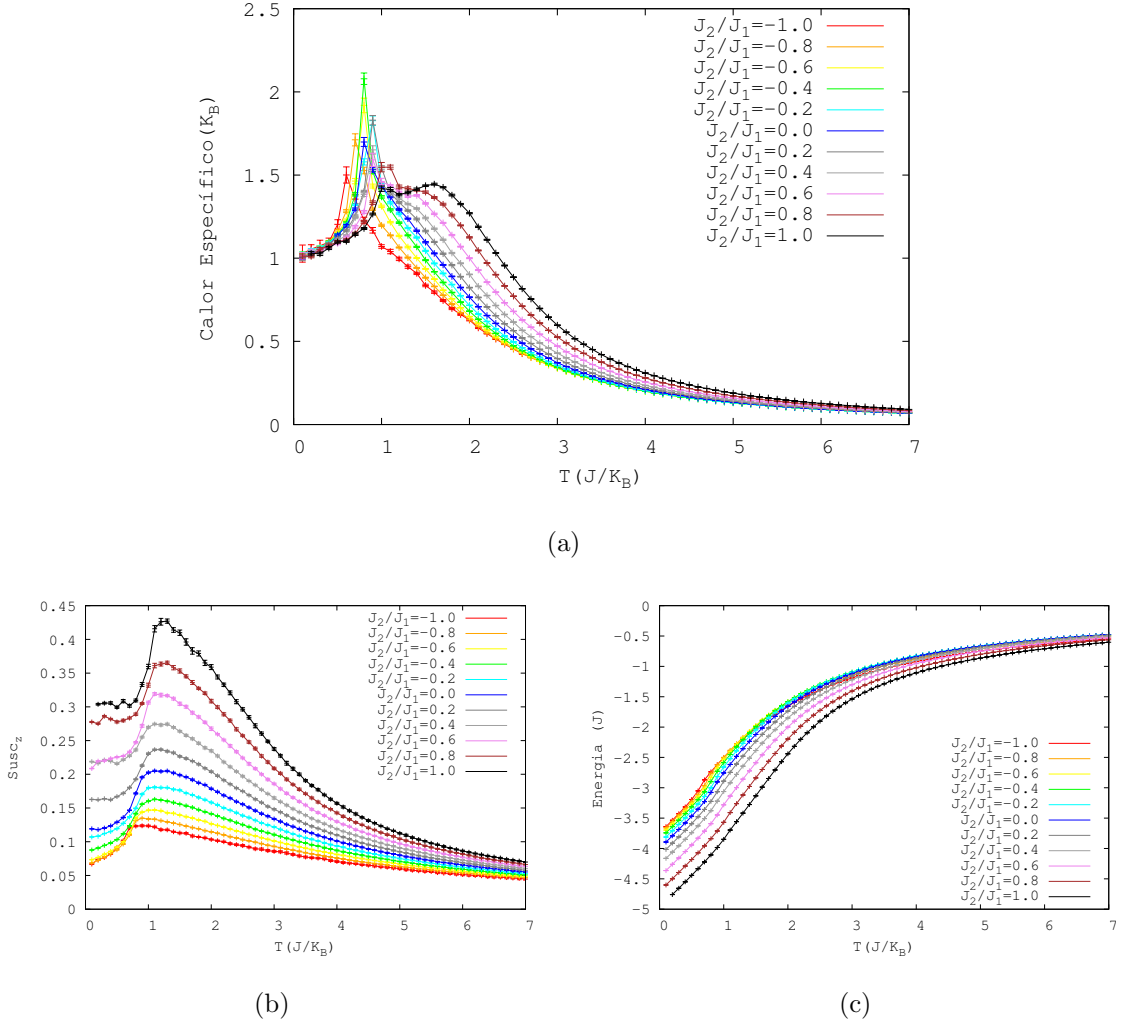


Figura 3.4: (a) Calor específico, (b) Susceptibilidade Magnética e (c) Energia em função da temperatura, em unidade de (J/K_B) , para diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo nulo.

tipicamente de primeira ordem, mas à esta sobressalência é atribuída um resquício de transição de segunda ordem. A transição de primeira ordem se dá devido a abundância de modos “softs”, correspondendo ao cenário de Brazovskii [75,85].

Campo magnético externo $B_z = 1.0$

Na presença de um campo $B_z = 1.0(J/K_B)$ e ausência de interações entre segundos vizinhos, o sistema apresenta estado helical como estado de mais baixa energia em $T = 0.01J/K_B$. Nos chama a atenção este estado helical ondulado, da figura 3.5(a).

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

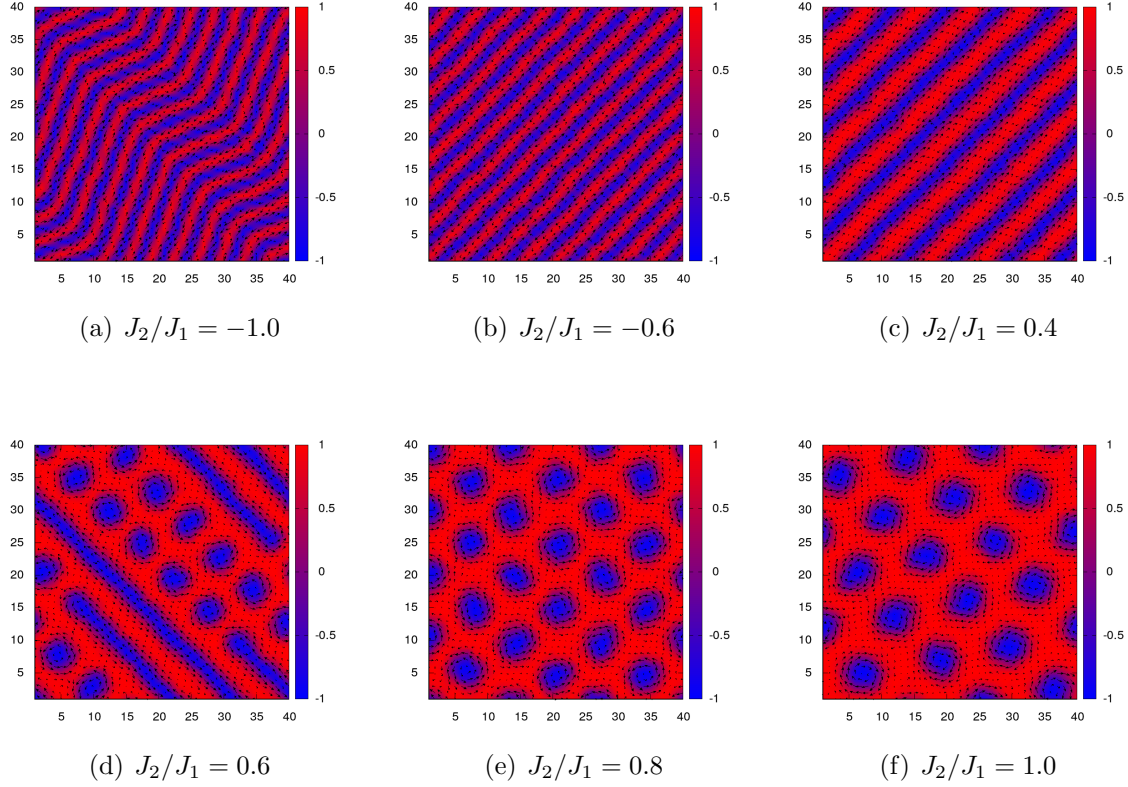


Figura 3.5: Estado de mais baixa energia de redes no espaço real (temperatura $T = 0.01J/K_B$) com diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B = 1.0(J/K_B)$.

Este estado aparece também para interações com $J_2/J_1 = -0.9$ (não mostrado), porém com essas ondulações mais suaves. Indicando que é um efeito da intensidade de tal interação. Além disso, simulamos o sistema com condições de contorno abertas e encontramos o mesmo resultado, indicando não se tratar de uma incomensurabilidade das condições de contorno. Quando a interação com segundos vizinhos é inserida, o estado de mais baixa energia pode ser até mesmo uma rede de skyrmions. Para altas temperaturas o sistema encontra-se na fase paramagnética e, na medida em que a temperatura diminui, o sistema sofre transições de fase, chegando na fase helical ou skyrmônica, de acordo com a intensidade da interação entre segundos vizinhos, o que pode ser verificado na sequência de figuras 3.5(a), 3.5(b) e 3.5(c), que mostram a rede na fase helical na temperatura $T = 0.01J/K_B$, enquanto a figura 3.5(d), mostra que

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

nestas condições o sistema encontra-se em um estado misto, em que há presença tanto de skyrmions quanto de “*stripes*”. Na medida em que esta interação vai aumentando as “*stripes*” vão se partindo e surgem bimerons no sistema. Se a interação for grande o suficiente, surge uma rede hexagonal de skyrmions como mostram as figuras 3.5(e) e 3.5(f). A figura 3.6 nos mostra uma ampliação de um dos skyrmions da rede apresentada na figura 3.5(f). Spins com componente $S_z = 1$, em vermelho, apontam na mesma direção e sentido do campo externo aplicado e spins com $S_z = -1$, em azul, apontam no sentido contrário ao campo externo aplicado. Do centro para a periferia, os spins giram em planos perpendiculares à direção radial, caracterizando skyrmions do tipo Bloch [66], de acordo com o esperado para interações DM [22].

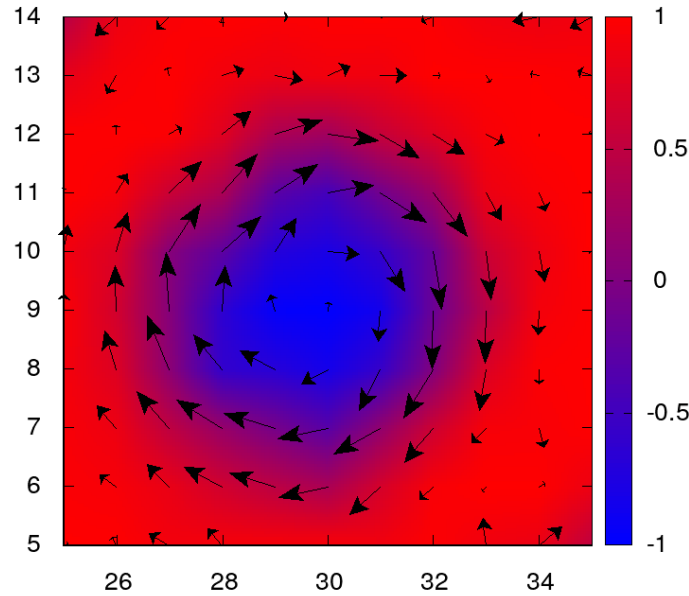


Figura 3.6: Skyrmion do tipo Bloch [66] da rede com $J_2/J_1 = 1.0$ sob campo magnético externo $B = 1.0(J/K_B)$. Spins com componente $S_z = 1$, em vermelho, apontam na mesma direção e sentido do campo externo aplicado e spins com $S_z = -1$, em azul, apontam no sentido contrário ao campo externo aplicado. Do centro para a periferia, os spins giram em planos perpendiculares à direção radial, o que caracteriza skyrmions deste tipo.

Analisemos mais detalhadamente o que ocorre nesta faixa de campo externo aplicado. Na figura 3.7(a), que apresenta o calor específico da rede sob campo externo

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

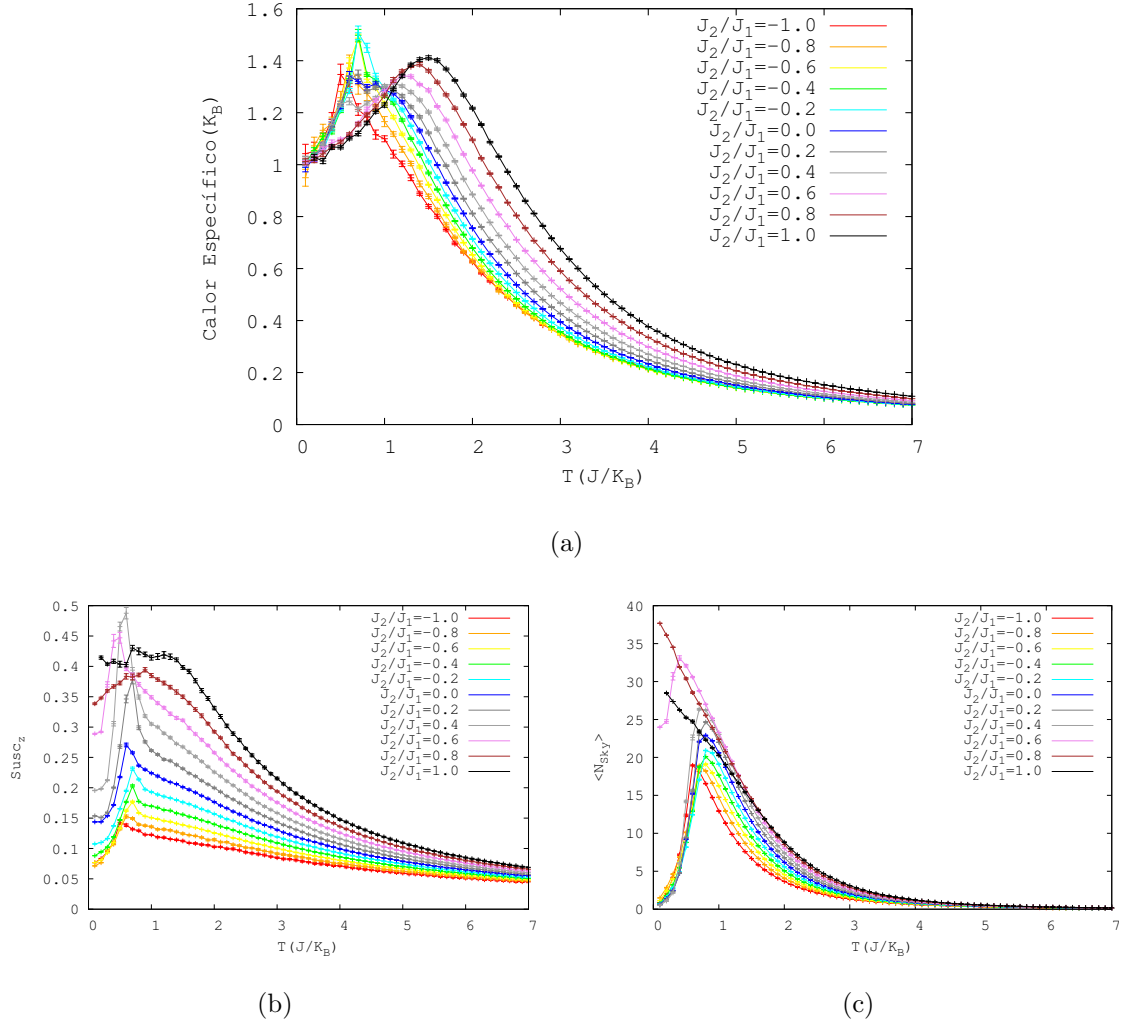


Figura 3.7: (a) Calor específico, (b) Susceptibilidade Magnética e (c) Número de skyrmions para diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B = 1.0(J/K_B)$.

$B = 1.0(J/K_B)$, temos picos agudos indicando uma transição de fase de primeira ordem para interações entre $-1.0 \leq J_2/J_1 \leq 0.4$ seguidos pela saliência à direita. Na medida em que a interação anti-ferromagnética com segundos vizinhos diminui e se transformando em ferromagnéticas, o pico vai diminuindo e a saliência, que sugere um resquício de transição de segunda ordem, vai aumentando. Para interações ferromagnéticas entre segundos vizinhos, com intensidades acima de $J_2/J_1 > 0.4$ o pico desaparece, restando apenas curvas suaves, tanto para o calor específico, quanto para a susceptibilidade magnética longitudinal, figura 3.7(b), indicando que essa transição, para estados que

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

apresentam skyrmions, tem origem diferente da transição para fase helical. Associamos assim, a presença da saliência ao lado dos picos agudos nas transições para o estado helical, na presença de campo, à formação de alguns skyrmions. Note que o número de skyrmions, figura 3.7(c), é diferente de zero para um intervalo de temperaturas, chegando a um máximo logo acima da temperatura na mudança de fase.

Campo magnético externo $B_z = 2.0$

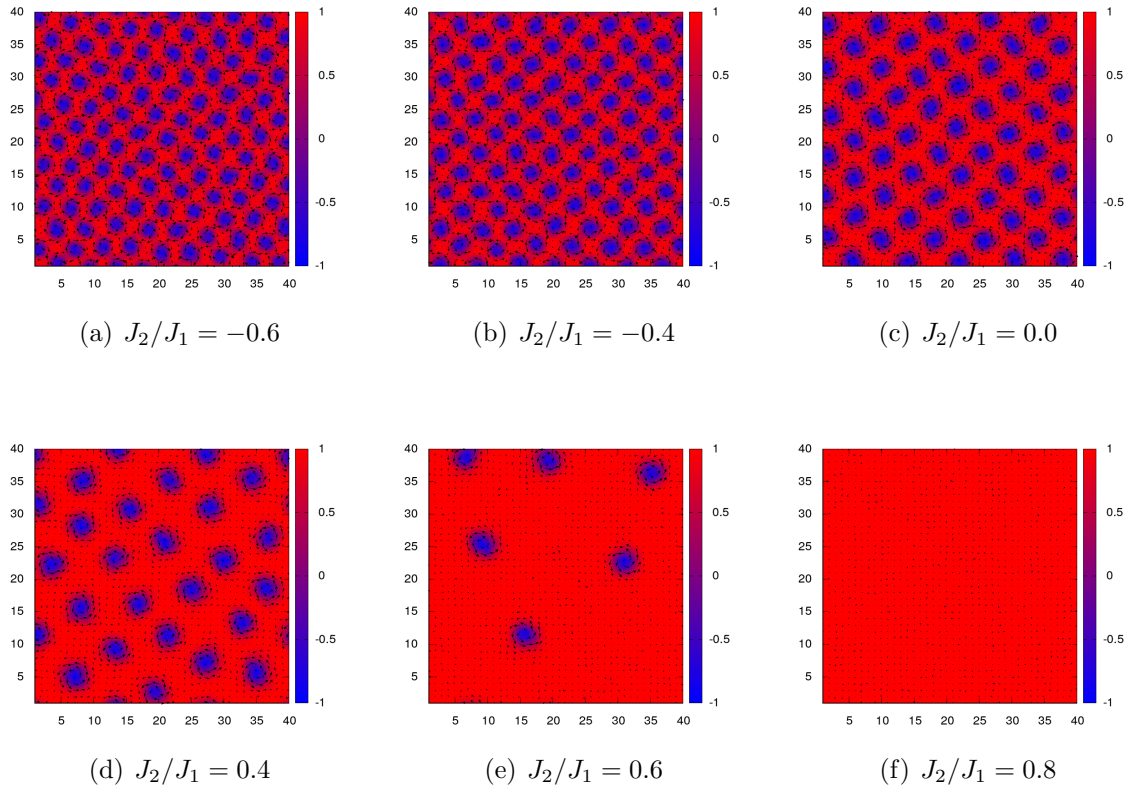


Figura 3.8: Estado de mais baixa energia para $T = 0.01J/K_B$ de redes no espaço real com diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B = 2.0(J/K_B)$.

Aumentando o campo magnético para uma intensidade de $B = 2.0J/K_B$, encontramos redes hexagonais de skyrmions bem definidas para intensidades baixas da interação entre segundos vizinhos. Observe que a periodicidade da rede de skyrmions para $A_2 = 0$ e $D_1/J_1 = \sqrt{6}$ é aproximadamente $P = 9a$, conforme previsto pela

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

equação 2.15. No entanto, dentro de uma determinada faixa de campo, a periodicidade varia também com J_2 . Na medida em que a intensidade da interação aumenta, a rede vai se desfazendo dando lugar a um gás de skyrmions que também é um tipo de fase presente nestes sistemas [84]. O estado de mais baixa energia em $T = 0.01J/K_B$ da rede para algumas intensidades J_2/J_1 sob campo magnético externo $B = 2.0J/K_B$ é apresentado na figura 3.8. O número de skyrmions no estado de mais baixa energia nesta temperatura é maior para interações antiferromagnéticas mais fortes entre segundos vizinhos e vai diminuindo, apesar de manter a rede hexagonal, até $J_2/J_1 = 0.4$, figuras de 3.8(a) a 3.8(d). Lembrando que a interação de troca entre primeiros vizinhos foi considerada ferromagnética para todas as redes estudadas ($J_1 = 1.0$). Para interações com $J_2/J_1 > 0.4$, a rede vai se desfazendo, figura 3.8(e), sobrando apenas skyrmions soltos na rede, ou gás de skyrmions. Para interações ferromagnéticas grande o suficiente, no caso $J_2/J_1 > 0.6$, o sistema sofre transição do estado paramagnético para o estado ferromagnético, figura 3.8(f).

A figura 3.9(a) corrobora o quadro descrito, mostrando que o número de skyrmions no estado de mais baixa energia vai diminuindo quando a interação antiferromagnéticas entre segundos vizinhos diminui e continua diminuindo quando a interação passa a ser ferromagnética. Na curva da susceptibilidade, 3.9(b), a curva para $J_2/J_1 = 0.6$ marca uma transição no comportamento das redes em que o estado de mais baixa energia é uma rede de skyrmion e as redes em que o estado de mais baixa energia é ferromagnético. Os picos na curva da susceptibilidade magnética, entretanto, não representam mais uma transição para estados helicais, pois os estados de mais baixa energia, nestes casos, são estados skyrmiônicos ou ferromagnéticos. Da mesma forma que as curvas para o calor específico, figura 3.9(c), não apresentam os picos característicos de transições para estados helicais. No casos em que os estados de mais baixa energia são skyrmiônicos, elas são curvas suaves, características de transições de segunda ordem.

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

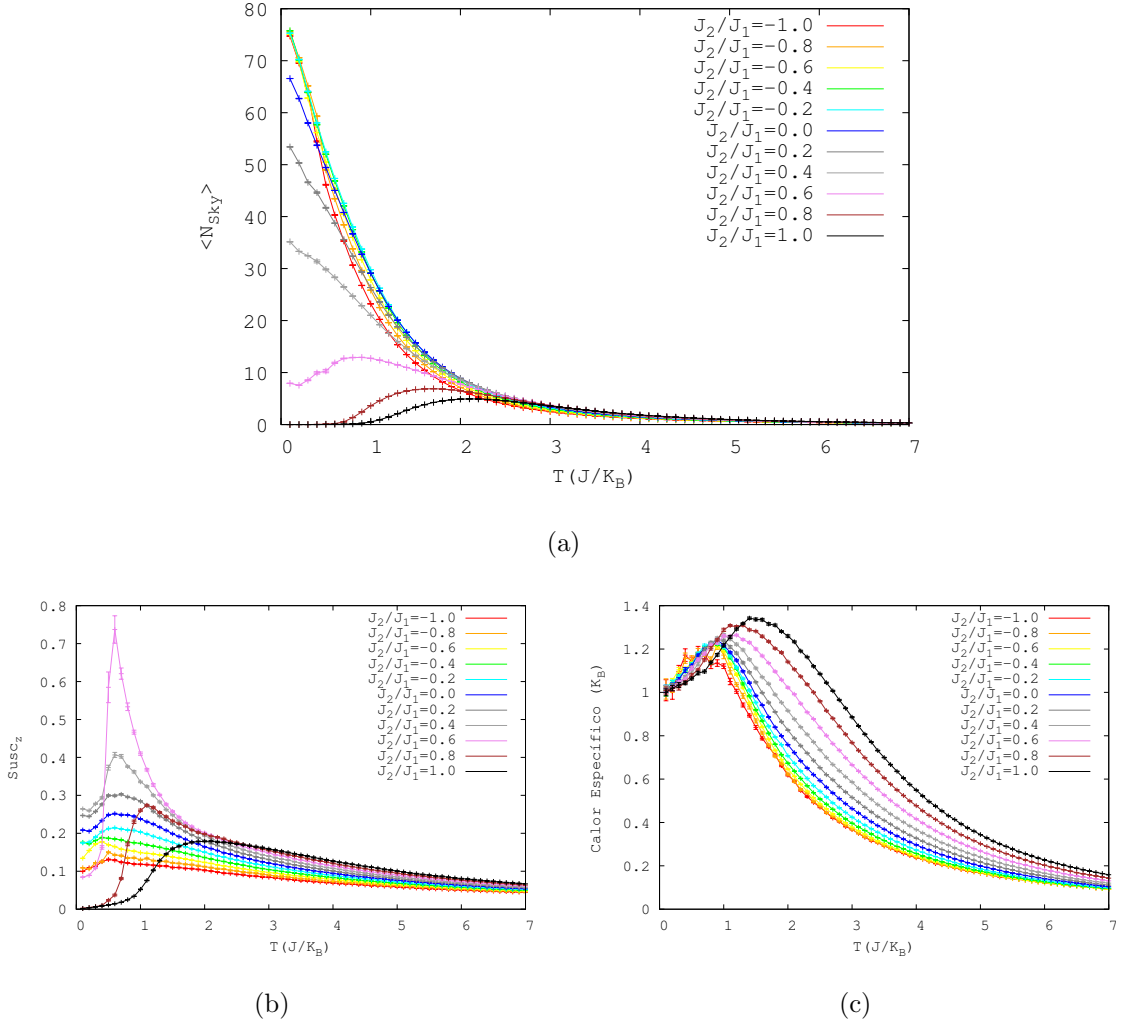


Figura 3.9: (a) Número de skyrmions, (b) Susceptibilidade magnética longitudinal e (c) Calor específico para diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B = 2.0(J/K_B)$.

Campo magnético externo $B_z = 3.0$

Neste valor de campo, o sistema ainda pode apresentar skyrmions soltos no sistema, mas um aumento na interação de troca entre segundos vizinhos leva o sistema para um estado ferromagnético, como pode ser constatado das figuras 3.10(a) a 3.10(c). Os gráficos das grandezas termodinâmicas não são apresentados por apresentarem as mesmas características que os gráficos para campo externo $B = 2.0$, figura 3.9.

O diagrama de fases completo $J_2/J_1 \times B$ é apresentado na figura 3.11 para sistema com interação de troca até segundos vizinhos. Nele podemos perceber que quando a

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

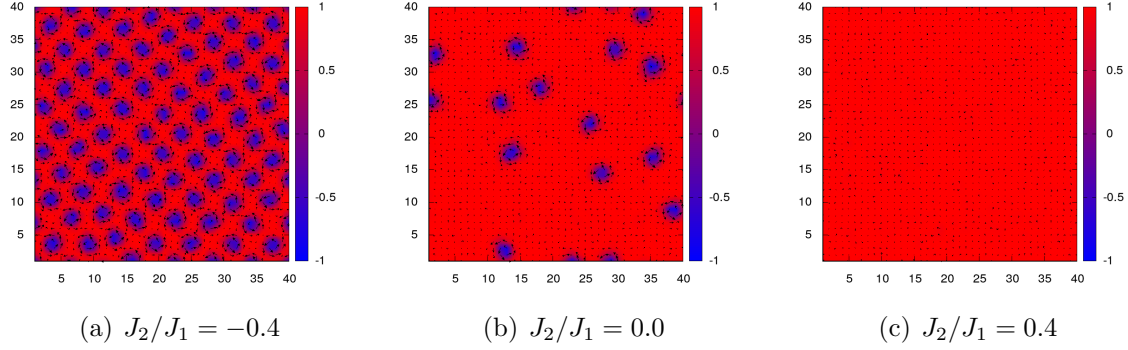


Figura 3.10: Redes de spin no espaço real com diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B = 3.0(J/K_B)$ em temperatura $T = 0.01J/K_B$.

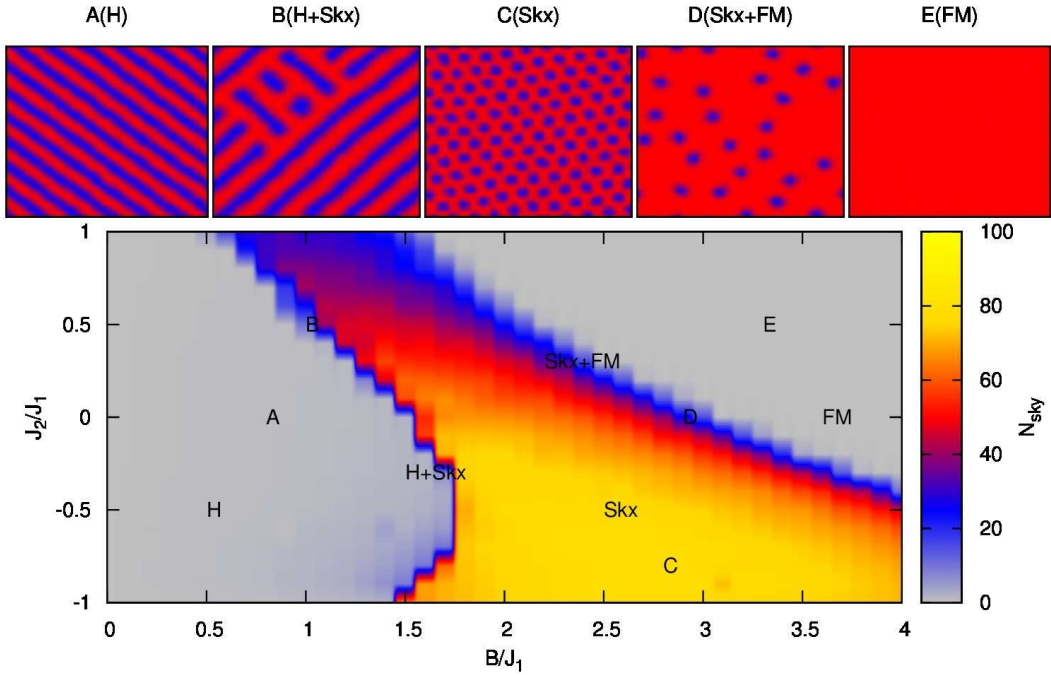


Figura 3.11: Diagrama de fases $(J_2/J_1) \times B$ para $D_2/J_1 = 0$ em $T = 0.01J/K_B$. Nas figuras menores, que mostram as redes em alguns pontos do diagrama, a cor “vermelha” indica a componente “z” (S_z) do spin com mesma direção e sentido do campo magnético externo e a cor “azul” indica componente “z” do spin com sentido contrário ao do campo externo aplicado.

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

interação de troca entre segundos vizinhos é antiferromagnética, o intervalo de campo magnético em que aparecem redes de skyrmions é muito maior do que quando a interação é ferromagnética.

3.3.2 Considerando apenas interações DM até segundos vizinhos

Nesta seção buscamos avaliar o comportamento do sistema apenas com interações de Dzyaloshinskii-Moriya até segundos vizinhos, ou seja, não consideramos interações de troca entre segundos vizinhos, $J_2/J_1 = 0.0$. Para isto estudamos o intervalo $0 < D_2/J_1 < 1.0$ na seguinte Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_1 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i \vec{B} \cdot \vec{S}_i - D_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_j - D_2 \sum_{\langle i,k \rangle} \vec{r}_{ik} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_k \quad (3.28)$$

onde $\langle i, j \rangle$ são primeiros vizinhos e $\langle i, k \rangle$ são segundos vizinhos.

Campo magnético externo $B_z = 0.0$

O estado de mais baixa energia do sistema, em $T = 0.01J/K_B$, na ausência de campo magnético externo e considerando apenas a interação de Dzyaloshinskii-Moriya até segundos vizinhos, também é um estado helical, como mostra a figura 3.12. A principal diferença entre as “*stripes*” encontradas no primeiro caso estudado, quando não há interação DM entre segundos vizinhos, para este caso é que, com o aumento desta interação (DM), as “*stripes*” tendem a sofrer um giro. Este comportamento já era esperado, devido à disposição espacial dos segundos vizinhos no sistema. Se, estando os primeiros vizinhos nas direções horizontal e vertical, as “*stripes*” se encontram na diagonal, no estado fundamental, então, estando os segundos vizinhos nas diagonais, criando-se uma interação forte o suficiente, as “*stripes*” giram para as direções vertical ou horizontal. Até uma certa intensidade de D_2/J_1 as “*stripes*” se mantêm na diagonal, figuras 3.12(a) a 3.12(b). Na figura 3.12(c) há uma competição entre as interações DM entre primeiros e segundos vizinhos e as “*stripes*” se apresentam onduladas. A partir daí, figuras 3.12(d) a 3.12(f), as “*stripes*” se apresentam na vertical, apresentando

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

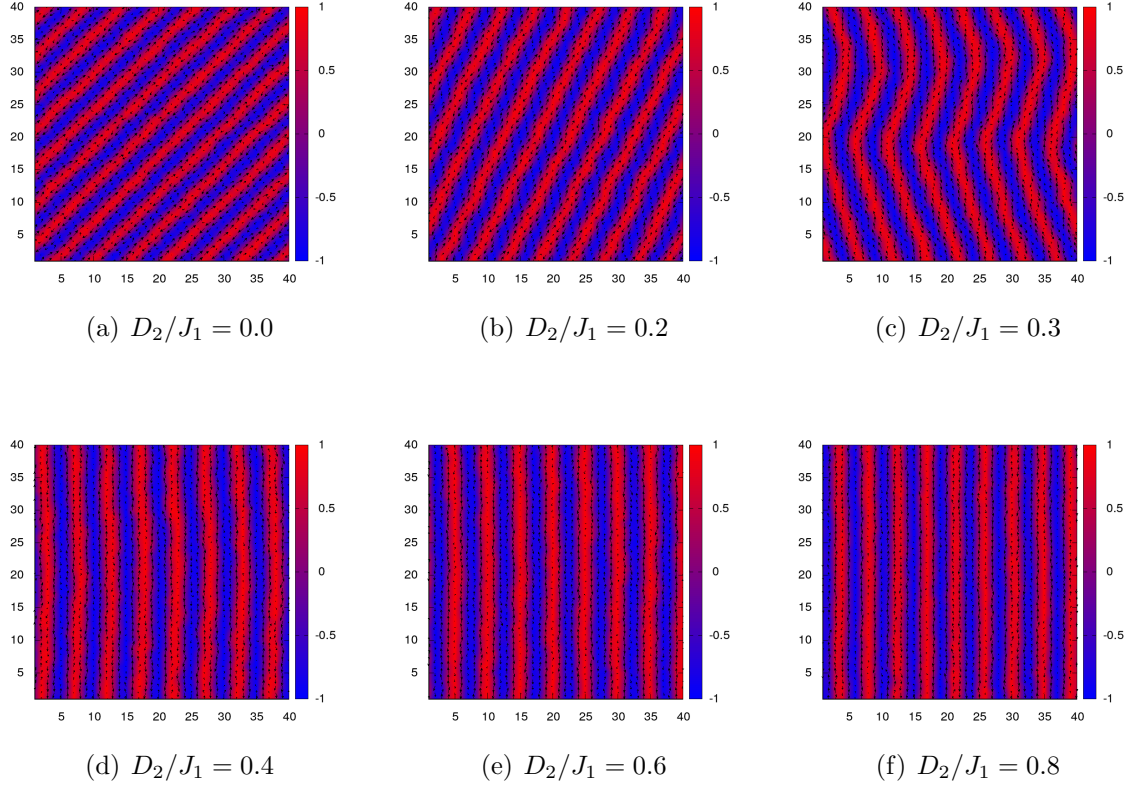


Figura 3.12: Estado de mais baixa energia, $T = 0.01J/K_B$, das redes de spins no espaço real com diferentes intensidades de interação DM entre segundos vizinhos sob $B_z = 0.0$.

apenas um leve aumento no período.

Em altas temperaturas o sistema está num estado paramagnético, na medida em que a temperatura é diminuída o sistema sofre mudança de fase do tipo ordem-desordem para chegar no estado helical. Esta mudança de fase pode ser verificada no comportamento do calor específico, figura 3.13(a), da susceptibilidade magnética, figura 3.13(b), e da energia, figura 3.13(c). Note que a curva do calor específico na figura 3.13(a) para $D_2/J_1 = 0.0$, apresenta um comportamento totalmente diferente das demais curvas, onde se tem esta interação diferente de zero. Ao passo que esta curva apresenta um pico acentuado, mesmo comportamento dos casos onde a interação com segundos vizinhos é a interação de troca anti-ferromagnética da figura 3.4(a), quando se acrescenta a interação DM entre segundos vizinhos ($D_2/J_1 \neq 0.0$) as curvas do calor específico apresentam um comportamento suave, o que indica transições com

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

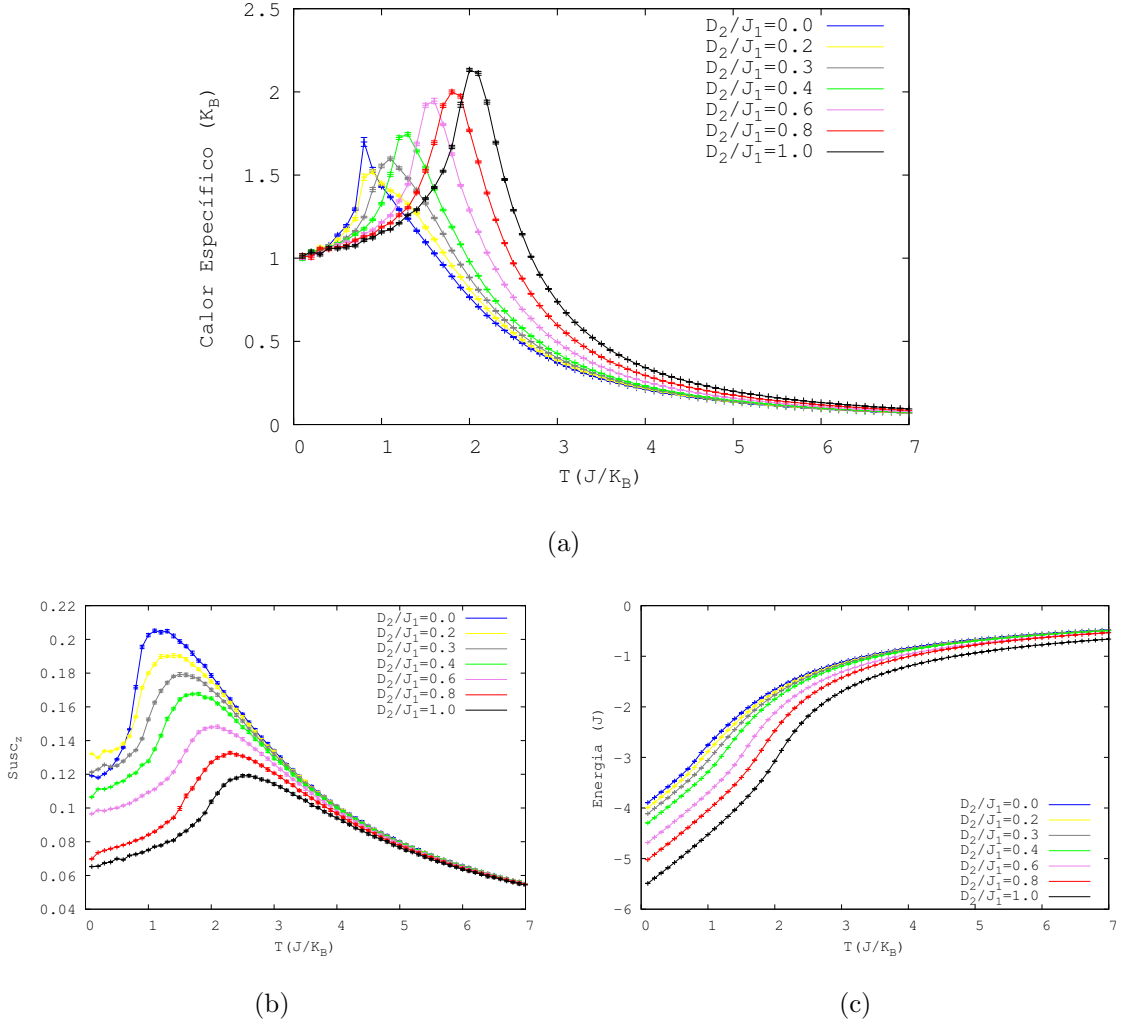


Figura 3.13: (a) Calor específico, (b) Susceptibilidade Magnética e (c) Energia para diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo nulo.

naturezas diferentes.

Campo magnético externo $B_z = 2.0$

Para esta intensidade de campo magnético, na ausência de interações entre segundos vizinhos, tanto de troca quanto de DM , o estado de mais baixa energia, para $T = 0.01J/K_B$, é composto por uma rede hexagonal de skyrmions e o número de skyrmions presentes na rede é máximo. Quando se acrescenta a interação DM entre segundos vizinhos, os sistemas, que para altas temperaturas é paramagnético,

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

na medida em que a temperatura é reduzida, migram para um estado skyrmiônico, para baixas intensidades de D_2/J_1 (figuras 3.14(a) e 3.14(b)), ou helical, a partir de certa intensidade de D_2/J_1 (figuras 3.14(c) a 3.14(f)). Os estados helicais variam: para intensidades baixas de D_2/J_1 , o estado helical apresenta as “stripes” na diagonal (figura 3.14(c)), aumentando a interação DM as “stripes” se apresentam retorcidas (figura 3.14(d)) e para intensidades mais altas de interação DM as “stripes” giram ficando na vertical (figuras 3.14(e) e 3.14(f)).

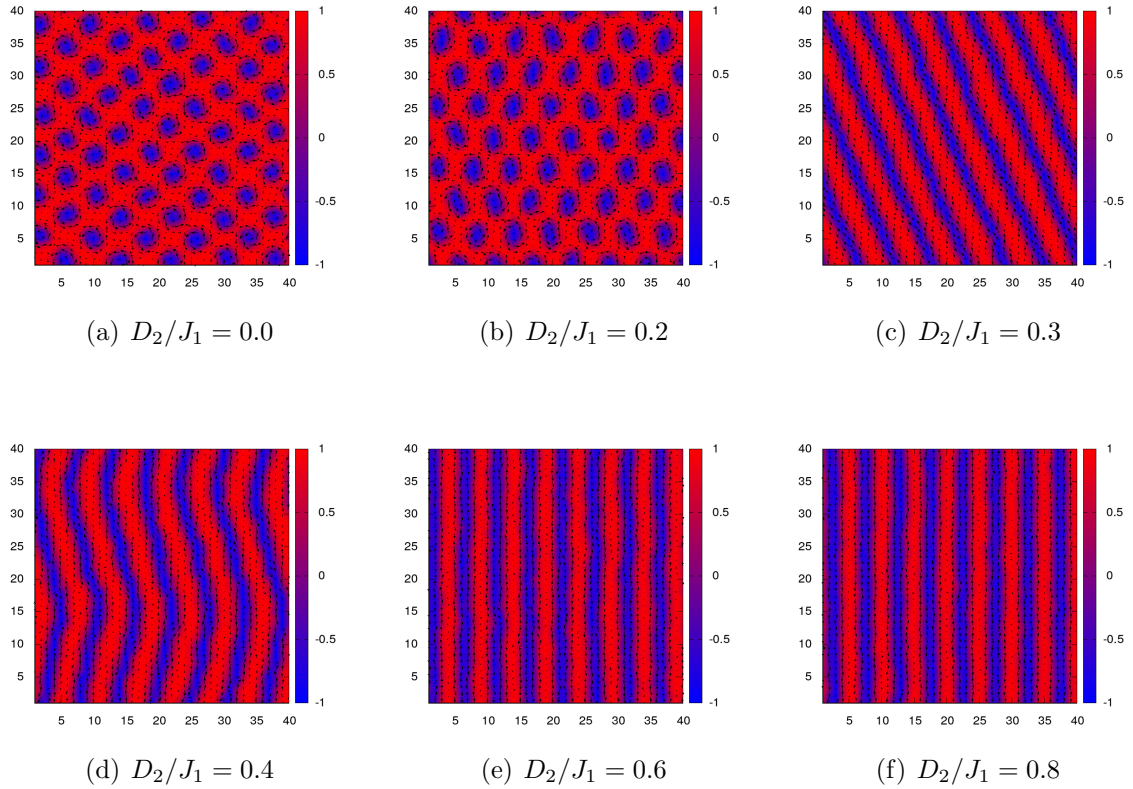


Figura 3.14: Redes de spins no espaço real com diferentes intensidades de interação de Dzyaloshinskii-Moriya entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B_z = 2.0$ em $T = 0.01J/K_B$.

Como esperado, em altas temperaturas os sistemas encontram-se num estado paramagnético e, na medida em que a temperatura diminui, os sistemas sofrem uma mudança de fase para estados helicais ou skyrmiônicos, o que pode ser verificado no comportamento das curvas para o calor específico, figura 3.15(a), da susceptibilidade

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

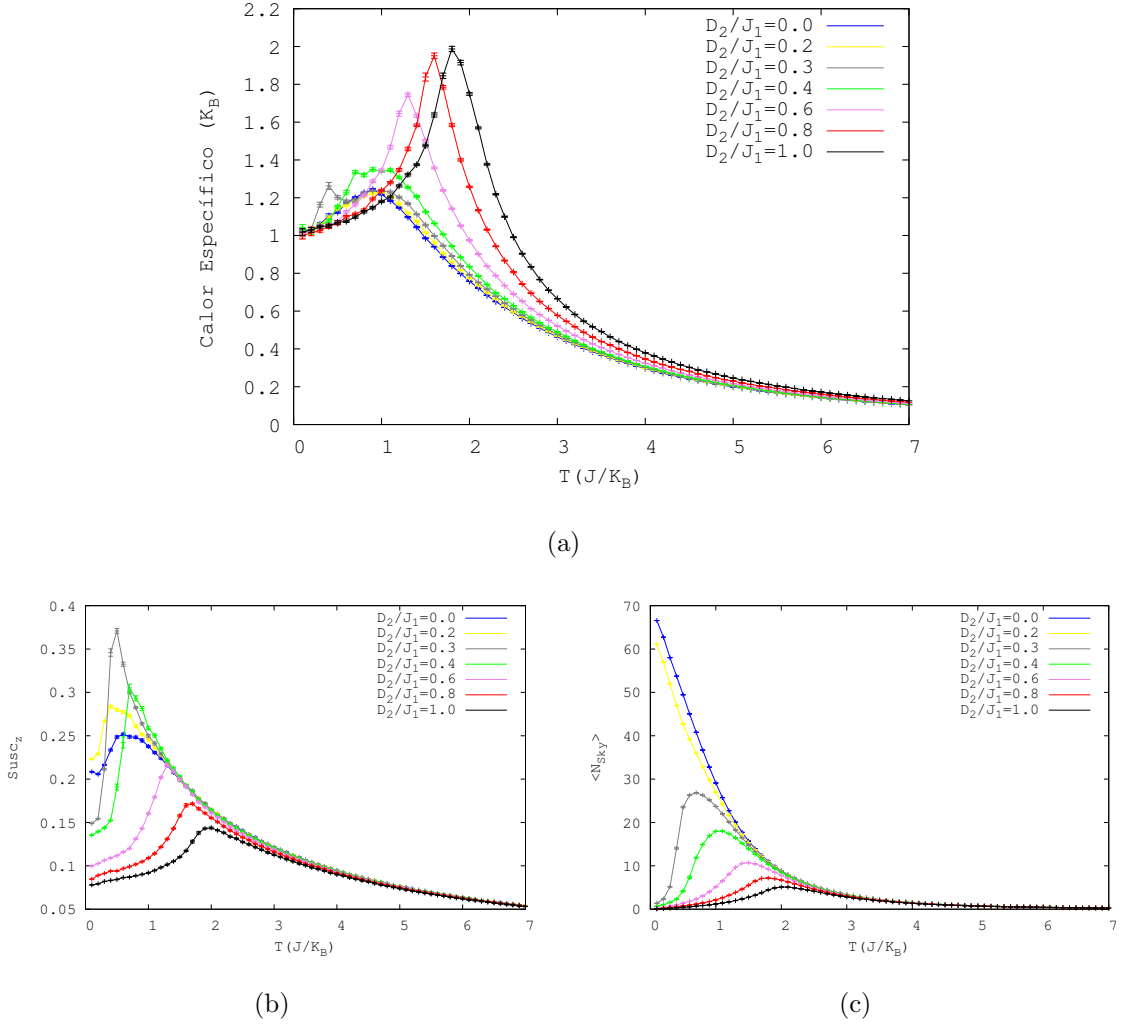


Figura 3.15: (a) Calor específico, (b) Susceptibilidade Magnética e (c) Número de skyrmions para diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B_z = 2.0$.

magnética, figura 3.15(b), e da energia, figura 3.15(c). Há uma mudança no comportamento das curvas para a susceptibilidade (3.15(b)) que é maior, na medida que D_2/J_1 aumenta, no intervalo $0 \leq D_2/J_1 \leq 0.3$, e depois passa a ser menor. As curvas do calor específico (3.15(a)) também apresentam uma mudança de comportamento por volta de $D_2/J_1 = 0.3$. Para $0 \leq D_2/J_1 \leq 0.3$ as curvas do calor específico são suaves, para $D_2/J_1 = 0.3$, a curva apresenta o pico seguido da saliência à direita, característico de estados helicais, em $D_2/J_1 = 0.4$, ainda existe um resquício de saliência à direita do pico e, para interações DM maiores, elas passam a exibir picos agudos, deixando claro

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

a diferença na natureza entre as transições para os estados helicais diagonais, verticais e estados skyrmiônicos.

Campo magnético externo $B_z = 3.0$

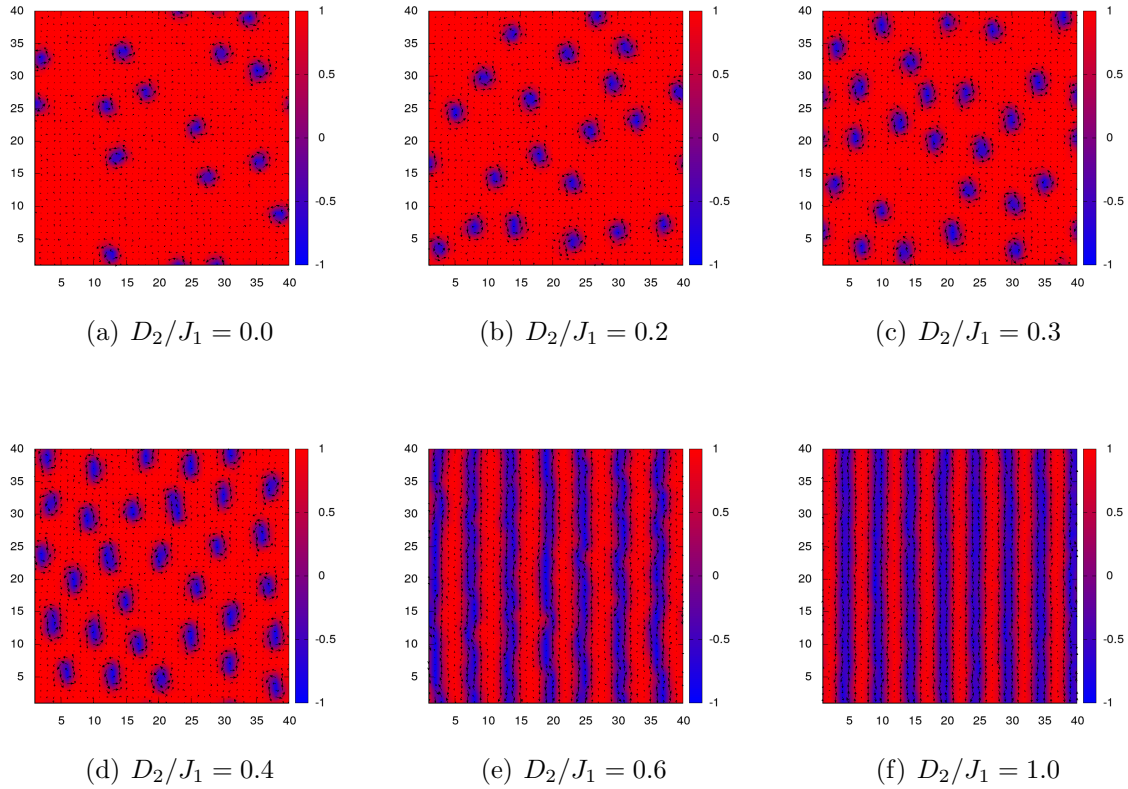


Figura 3.16: Redes de spins no espaço real com diferentes intensidades de interação de Dzyaloshinskii-Moriya entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B_z = 3.0$ em $T = 0.1J/K_B$.

Para campos um pouco mais altos que o da situação anteriormente descrita, o estado de mais baixa energia para $T = 0.01J/K_B$, na ausência de interações entre segundos vizinhos, é um gás de skyrmions. Na medida em que se acrescenta interação DM entre segundos vizinhos, o estado de mais baixa energia pode ser um gás de skyrmions (figuras 3.16(a) a 3.16(c)) ou, se esta interação for muito grande, pode ser um estado helical (figuras 3.16(e) a 3.16(f)). No meio termo (figura 3.16(d)) os skyrmions são deformados, achatados, e estão organizados formando uma rede, ainda

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

que esta rede não seja perfeitamente espaçada.

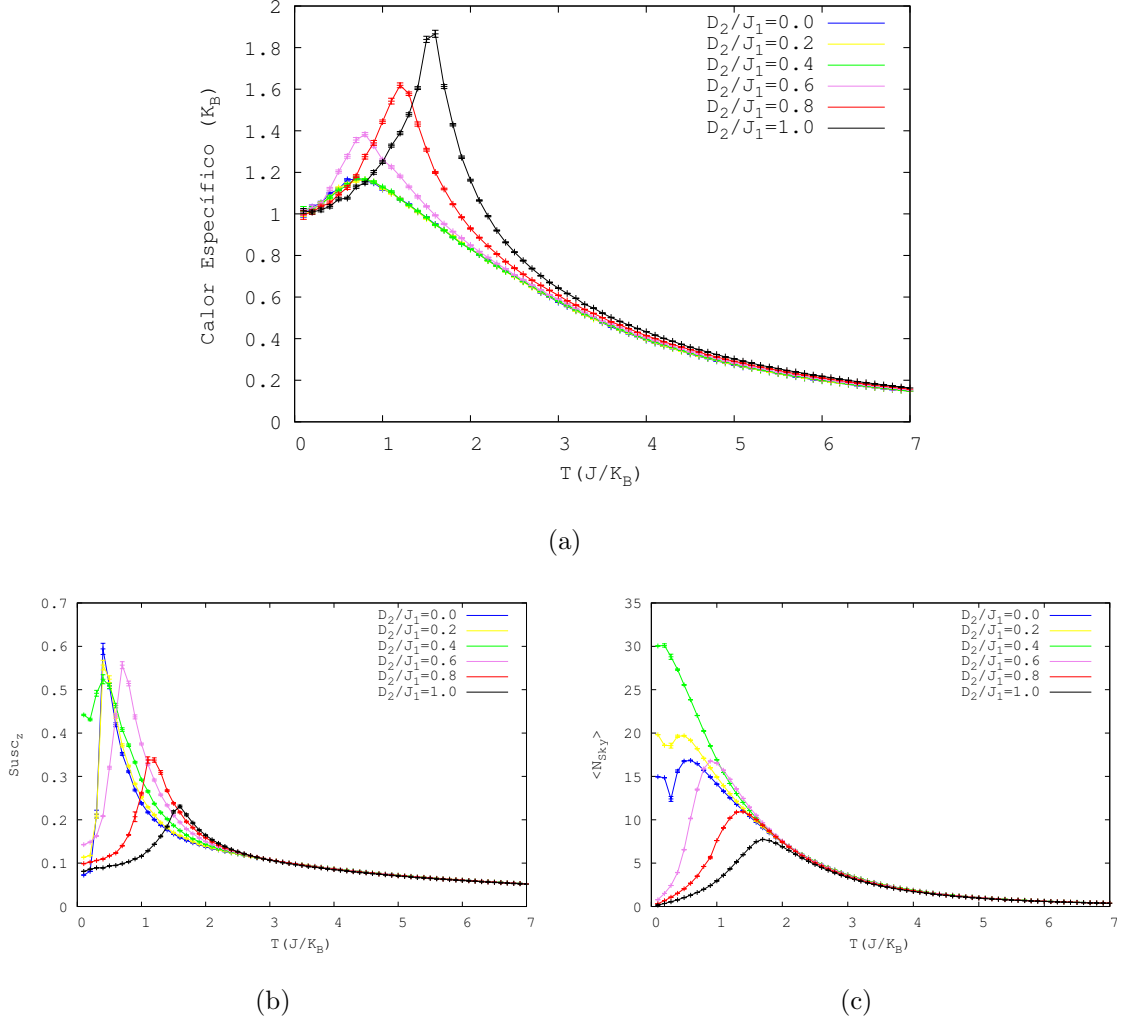


Figura 3.17: (a) Calor específico, (b) Susceptibilidade Magnética e (c) Número de skyrmions para diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos, sob campo magnético externo $B_z = 3.0$.

A diferença entre os estados de mais baixa energia pode ser verificada no comportamento das curvas do calor específico, figura 3.17(a), que mostram a diferença na natureza das transições de fase. As curvas cujo estado de mais baixa energia é helicoidal apresenta picos agudos no calor específico enquanto apresenta curvas suaves para estado skyrmiônico. Na susceptibilidade magnética, figura 3.17(b), também podemos perceber a diferença no comportamento de acordo com o estado de mais baixa energia. Na figura 3.17(c) fica claro que um aumento na interação DM entre segundos vizinhos

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

consegue excitar skyrmions na rede (curvas para $D_2/J_1 \leq 0.4$). No entanto, interações muito grandes destroem os skyrmions, levando o sistema para os estados helicais.

O diagrama de fases completo $D_2/J_1 \times B$ é apresentado na figura 3.18 para sistema com interação DM segundos vizinhos. Nele podemos perceber que quanto maior a interação DM entre segundos vizinhos, menor o intervalo de campo magnético em que aparecem redes de skyrmions. Indicando, que esta interação, dependendo da intensidade da interação, acaba por destruir tais skyrmions.

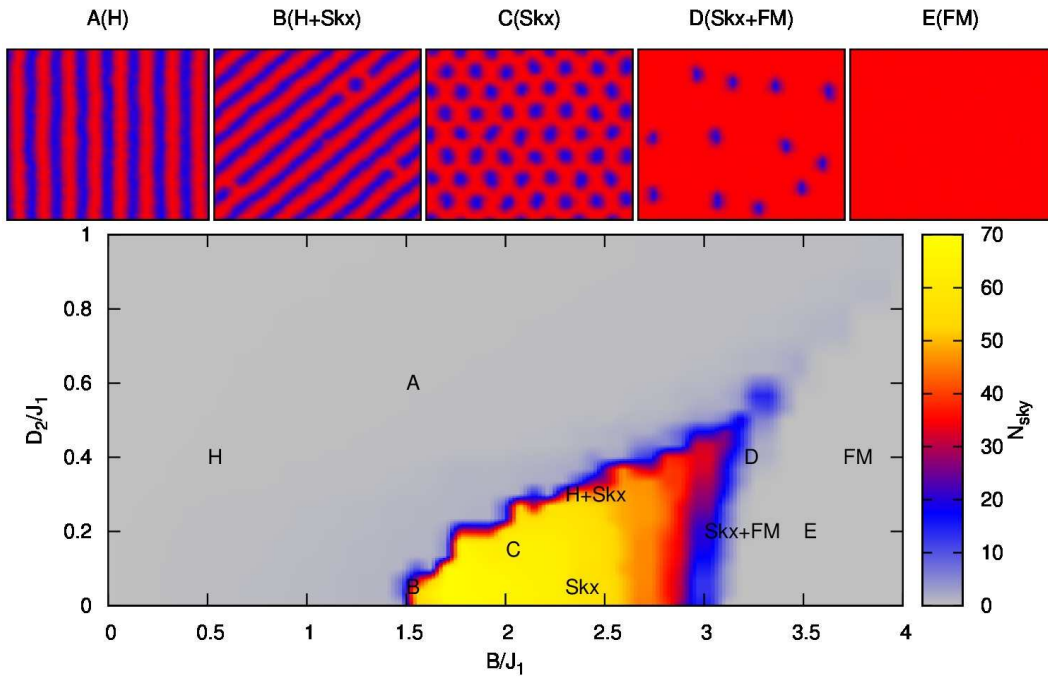


Figura 3.18: Diagrama de fases $(D_2/J_1) \times B$ para $J_2/J_1 = 0$ em $T = 0.1J/K_B$. Nas figuras menores, que mostram as redes em alguns pontos do diagrama, a cor “vermelha” indica a componente “z” (S_z) do spin com mesma direção e sentido do campo magnético externo e a cor “azul” indica componente “z” do spin com sentido contrário ao do campo externo aplicado.

3.3.3 Considerando interações de troca e DM entre segundos vizinhos

O diagrama de fases completo para dois casos em que ambas as interações, DM e de troca, entre segundos vizinhos é diferente de zero é apresentado na figura

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

3.19. Eles indicam que interações de troca antiferromagnéticas entre segundos vizinhos propicia a formação de redes de skyrmions numa região de campo maior do que as interações ferromagnéticas. No entanto, a interação DM entre segundos vizinhos tende a prejudicar a formação de tais redes. Nestes diagramas, nas figuras menores, que mostram as redes em alguns pontos do diagrama, a cor “vermelha” indica a componente “z” (S_z) do spin com mesma direção e sentido do campo magnético externo e a cor “azul” indica componente “z” do spin com sentido contrário ao do campo externo aplicado.

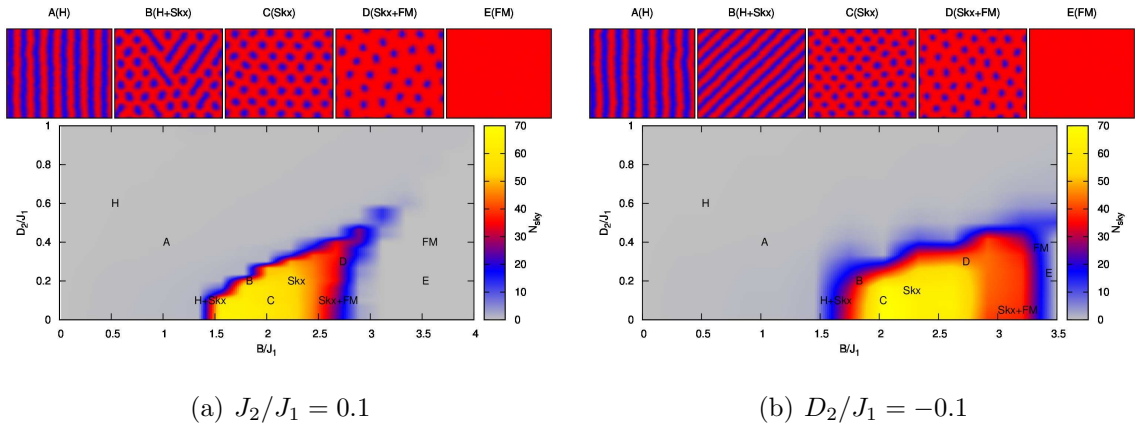


Figura 3.19: Diagrama de fases $(D_2/J_1) \times B$ para (a) $J_2/J_1 = 0.1$ e (b) $J_2/J_1 = -0.1$ em $T = 0.1J/K_B$.

3.4 Conclusões

Nossos resultados indicam que a interação de troca entre segundos vizinhos têm papel importante na termodinâmica de sistemas com interação quiral. O aumento de tal interação pode estimular a formação de redes hexagonais de skyrmions sob a ação de campos mais baixos e alterar o período helical das “*stripes*” de estados helicais. No entanto, este aumento nesta interação pode também levar a um derretimento da rede de skyrmions já formada para campos mais altos.

Para os casos em que só há interação de troca entre segundos vizinhos $D_2 = 0.0$, o aumento na interação de troca com segundos vizinhos provoca um aumento no período

3. Termodinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

helical. Para campos pequenos, o aumento em J_2 induz a formação de skyrmions, num papel semelhante ao da temperatura e para campos “ideais”, a baixas temperaturas, a interação com segundos vizinhos tende a reduzir o número de skyrmions formados, provocando um derretimento na rede.

Para os caso em que só há interação de Dzyaloshinskii-Moriya entre segundos vizinhos, $J_2 = 0.0$, para pequenos campos, o aumento na interação spin órbita quiral com segundos vizinhos provoca uma rotação na direção das stripes, passando por um estado intermediário em que as stripes se encontram retorcidas. Para campos intermediários e altos, a baixas temperaturas, a interação quiral com segundos vizinhos tendem a destruir a rede de skyrmions levando o sistema para um estado helical.

Finalmente, para casos intermediários, em que há os dois tipos de interação entre segundos vizinhos, para campos intermediários e altos, a baixas temperaturas, a interação quiral com segundos vizinhos tendem a destruir a rede de skyrmions levando o sistema para um estado helical.

3.5 Perspectivas

Seria interessante verificar o efeito de vacâncias e impurezas nestes sistemas, pelo menos para alguns casos em que a interação de Dzyaloshinskii-Moriya entre segundos vizinhos se mostrou importante na formação dos skyrmions.

Capítulo 4

Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

Neste capítulo analisamos, através da utilização do método Range-Kutta de 4ª ordem para resolução da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, a influência de segundos vizinhos na dinâmica de redes de skyrmions e avaliamos seu comportamento mediante a aplicação de correntes de spins, tanto na rede limpa quanto na presença de impurezas. Assim, neste capítulo apresentamos a Hamiltoniana utilizada neste estudo, bem como detalhes das técnicas computacionais, os resultados obtidos, com discussão, conclusão e perspectivas de continuação deste estudo.

4.1 Hamiltoniana Utilizada

Neste capítulo estamos considerando uma abordagem semiclássica para redes de spin, tamanhos $2L \times L$ e $L \times L$, separados de um parâmetro de rede a uns dos outros, com condições de contorno periódicas ao longo do comprimento (eixo x) e abertas na altura (eixo y), na presença de um campo magnético externo uniforme $\vec{B}$ perpendicular ao plano da rede, neste caso, paralelo ao eixo z . O fato de escolhermos fazer a abordagem semiclássica implica, primeiramente, em tratarmos o spin como um vetor. Para estudarmos o comportamento desta rede consideramos as mesmas

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

interações que no capítulo 3: interação de troca direta de Heisenberg, termo de zeeman e interação de Dzyaloshinskii-Moriya. Assim, a hamiltoniana utilizada é dada por:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{H_2} + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{DM_2} . \quad (4.1)$$

em que

$$\mathcal{H}_{H_2} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_1 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} J_2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j , \quad (4.2)$$

é a interação de troca de Heisenberg

$$\mathcal{H}_B = - \sum_i \vec{B} \cdot \vec{S}_i . \quad (4.3)$$

é o termo de Zeeman e

$$\mathcal{H}_{DM_2} = -D_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_j - D_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \vec{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_j , \quad (4.4)$$

é a interação de Dzyaloshinskii-Moriya. Além disso, $\langle i, j \rangle$ representam a soma sobre primeiros vizinhos e $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ representa a soma sobre segundos vizinhos. Como estamos considerando o sistema isotrópico, a constante de troca J_1 é a mesma para quaisquer pares de primeiros vizinhos, assim como J_2 é a mesma para quaisquer pares de segundos vizinhos. Estamos adotando uma abordagem semiclássica, de maneira que os operadores $\mathbf{S}_i$ podem ser identificados como vetores do tipo $\vec{S} = (\sin(\theta)\cos(\phi), \sin(\theta)\sin(\phi), \cos(\theta))$, onde θ e ϕ sendo os ângulos polar e azimutal, respectivamente. Conforme discutido ainda no capítulo 1, o vetor de Dzyaloshinskii-Moriya depende da simetria do material e sua direção é dada pelas regras apresentadas por Moriya [55]. Neste capítulo, assim como no capítulo 3, também assumimos materiais que tenham um vetor $\vec{D}$ do tipo $D\vec{r}_{ij}$, onde $\vec{r}_{ij}$ é o vetor posição do spin localizado no sítio j em relação ao spin do sítio i , e D é uma constante.

Para este estudo utilizamos unidades reduzidas $J_1 = 1$, $a = 1$, $K_B = 1$, $B_z = 2.0(J_1)$ e $D_1/J_1 = \sqrt{6}$, que, de acordo com a equação 2.15, para $A_2 = 0$, resulta numa rede de skyrmions com periodicidade aproximadamente $P = 9a$, no caso em que apenas primeiros vizinhos são considerados . Conforme resultado obtido no capítulo 3,

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

neste valor de campo as redes de skyrmions são cristalizadas para todas as interações de troca entre segundos vizinhos utilizadas aqui. Além disso, como o aumento da interação de Dzyaloshinskii-Moriya (DM) tende a diminuir a janela de campos magnéticos que favorecem a cristalização de redes de skyrmions, conforme resultado obtido no estudo da termodinâmica de tais redes - capítulo 3, e usualmente a interação DM é muito menor que a interação de troca, optamos por não considerar a interação de Dzyaloshinski-Moriya atuando até segundos, ou seja, utilizamos $D_2/J_1 = 0.0$ em todos os casos.

4.2 Métodos Utilizados

Primeiramente nossa rede de skyrmions foi obtida utilizando Método de Monte Carlo, algoritmo de Metropolis, cujos detalhes foram descritos no capítulo anterior. Basicamente, sorteamos uma configuração de spins aleatória inicial, a uma temperatura determinada, neste caso $\mathcal{T} = 7.0(J_1/K_B)$. Na medida em que as cadeias de Markov foram sendo geradas, as novas configurações foram sendo aceitas ou não, de acordo com a prescrição de Metropolis, e o sistema foi levado para o estado de equilíbrio de menor energia nesta temperatura, ou seja, foi feita a “termalização” da rede de spins. Utilizando uma dessas configurações no equilíbrio, a temperatura foi diminuída levemente, no caso $\delta\mathcal{T} = 0.01(J_1/K_B)$, e nova termalização foi realizada, que corresponde ao chamado “simulated annealing”. Estes processos foram repetidos até que a temperatura desejada fosse atingida, no caso, $\mathcal{T} = 0.01(J_1/K_B)$. Durante a termalização, nossa rede esteve submetida a um campo magnético externo $B = 2.0$ em unidades de J_1 . Após a obtenção das redes de skyrmions, a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert foi resolvida para tais redes utilizando o Método Range-Kutta de 4ª ordem para determinação de suas dinâmicas. Nas próximas seções apresentamos em detalhes a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert e do Método Runge-Kutta 4ª ordem.

4.2.1 A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert

Esta seção foi escrita baseada em um artigo de revisão bastante didático de Gilbert [86] sobre a teoria desenvolvida durante seu doutorado, cujos resultados foram

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

publicados pela primeira vez em 1955, e desde então vêm servindo como base na maioria dos estudos sobre dinâmica de materiais magnéticos.

O primeiro modelo dinâmico para o movimento de precessão da magnetização foi proposto por Landau e Lifshitz em 1935 [87]. Era baseado em uma equação de precessão contínua em que efeitos quânticos e anisotropias foram levados em conta através de um campo efetivo. Este modelo funcionava bem para amortecimento pequenos e muitos trabalhos foram publicados utilizando a equação de Landau-Lifshitz. Porém, para amortecimentos grandes, a equação falhava e Gilbert propôs introduzir uma espécie de força dissipativa, generalizando a equação que passou a se chamar “Equação de *Landau-Lifshitz-Gilbert*”. Vejamos resumidamente como obtê-la.

O movimento rotacional de corpos rígidos em mecânica clássica é regido pela seguinte expressão

$$\frac{\partial \vec{L}}{\partial t} = \vec{T}, \quad (4.5)$$

onde $\vec{L}$ é o momento angular do corpo e $\vec{T}$ é o torque atuando sobre ele. Esta equação permanece válida quando $\vec{L}$ e $\vec{T}$ são reinterpretados como operadores no espaço de Hilbert e pode ser usada como uma teoria clássica para um sistema de spin trocando-se operadores por valores esperados dos operadores usando estados quânticos apropriados ou matrizes densidade. Daí

$$\frac{\partial \vec{S}}{\partial t} = \vec{T}. \quad (4.6)$$

No entanto, quando as equações clássicas da formulação Lagrangeana são usadas para inserir amortecimento, surge um problema pois a Lagrangeana clássica introduz variáveis dinâmicas que não são definidas para o operador de spin da mecânica quântica. Este problema é contornado para campos magnéticos sem amortecimento convertendo a Eq. 4.6 em uma equação em que somente o momento magnético é uma variável dinâmica. Como o momento magnético, $(\vec{M})$, do elétron está relacionado ao seu momento angular associado ao spin do elétron, $(\vec{S})$, por

$$\vec{M} = \gamma \vec{S}, \quad (4.7)$$

onde γ é a razão giromagnética, a equação 4.7 permanece válida, tanto na mecânica

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

quântica quanto clássica, e não introduz variáveis indefinidas, portanto usar $\vec{M}$ é bem conveniente. O torque exercido em um momento $\vec{M}$ por um campo magnético $\vec{H}$ é

$$\vec{T} = \vec{M} \times \vec{H}, \quad (4.8)$$

Então, usando as Eq. 4.8 e 4.7 em 4.6, a equação de movimento para o momento magnético do elétron é dada por

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{H}, \quad (4.9)$$

A Eq. 4.9 não se limita a torques externos exercidos por campos magnéticos externos. Qualquer torque exercido sobre um momento magnético pode ser escrito na forma da Eq. 4.9 se for definido um campo magnético “efetivo”

$$\vec{H}^{ef} = - \left[\hat{i} \frac{\partial U(\vec{M})}{\partial M_x} + \hat{j} \frac{\partial U(\vec{M})}{\partial M_y} + \hat{k} \frac{\partial U(\vec{M})}{\partial M_z} \right] = - \frac{\partial U(\vec{M})}{\partial \vec{M}}, \quad (4.10)$$

onde $U(\vec{M})$ é a energia potencial do sistema com relação o trabalho exercido pelas forças na rotação dos momentos. A energia potencial para um momento $\vec{M}$ em um campo magnético externo $\vec{H}_e$, por exemplo, é dada por $U_e = -\vec{M} \cdot \vec{H}_e$. Para um conjunto de momentos discretos, $\vec{M}_i$, $i = 1, 2, \dots, n$, as equações de movimento de tornam

$$\frac{d\vec{M}_i}{dt} = \gamma \vec{M}_i \times \vec{H}_i^{ef}, \quad (4.11)$$

onde

$$\vec{H}_i^{ef} = - \frac{\partial U(\vec{M}_1, \vec{M}_2, \dots, \vec{M}_n)}{\partial \vec{M}_i}, \quad (4.12)$$

é o campo efetivo agindo no i -ésimo momento magnético e $U(\vec{M}_1, \vec{M}_2, \dots, \vec{M}_n)$ é a energia potencial generalizada. As Eq. 4.11 e 4.12 podem ser transformadas em equações clássicas de campos através da introdução de um campo contínuo $\vec{M}(\vec{r}) = \vec{M}_i / \Delta \vec{r}_i$, em que $\vec{r}_i$ é a localização da célula que contém o elétrons com spin desemparelhado e $\Delta \vec{r}_i$ é o volume dessa célula. Considerando o campo suave pode-se substituir $\vec{M}_i = \vec{M}(\vec{r}_i) \Delta \vec{r}_i$ nas Eq. 4.11 e 4.12 e tomando o limite de $\Delta \vec{r}_i \rightarrow 0$, momentos magnéticos discretos

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

se tornam um campo de magnetização contínuo, somas se tornam integrais, funções de um conjunto discreto de momentos, $F(\vec{M}_1, \vec{M}_2, \dots)$, se tornam funcionais de um campo contínuo, $F[\vec{M}(\vec{r})]$, e derivadas parciais se tornam derivadas funcionais. Isto leva a uma equação clássica de movimento para campos de magnetização sem amortecimento dada por

$$\frac{\partial \vec{M}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \gamma \vec{M}(\vec{r}, t) \times \vec{H}^{ef}(\vec{r}, t), \quad (4.13)$$

onde

$$\vec{H}^{ef}(\vec{r}, t) = -\frac{\delta U[\vec{M}(\vec{r}, t)]}{\delta \vec{M}(\vec{r}, t)}, \quad (4.14)$$

é o campo efetivo e $U[\vec{M}(\vec{r}, t)]$ é a energia potencial do campo de magnetização, comumente chamada de “*energia de domínio*”, que é composta por vários termos como energia de campo externo, energia de demagnetização, energia de troca, etc. Para introduzir um termo de amortecimento, é comum inserir nas equações de movimento da formulação Lagrangeana um termo que depende da velocidade chamado “*função de dissipação de Rayleigh*”. Para um ferromagneto, o termo adicionado na equação de movimento é $-\eta \partial \vec{M} / \partial t$, onde η é um parâmetro de amortecimento característico do material chamado “*parâmetro de damping*”. Adicionando este termo de amortecimento no campo efetivo da equação de movimento 4.13, temos uma equação de movimento válida para um campo de magnetização com amortecimento dada por

$$\frac{\partial \vec{M}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \gamma \vec{M}(\vec{r}, t) \times \left[\vec{H}(\vec{r}, t) - \eta \frac{\partial \vec{M}(\vec{r}, t)}{\partial t} \right], \quad (4.15)$$

que pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = \gamma \vec{M} \times \vec{H} - \frac{\alpha}{M} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t}, \quad (4.16)$$

que é a “Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert”, onde $\alpha = \eta \gamma M$ é o “*damping de Gilbert*” e $\vec{H}$ é o campo efetivo dado pela equação 4.14. Para se inserir corrente polarizada de spin acrescentamos dois termos na equação acima [38], que assume a seguinte forma

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = \gamma \vec{M} \times \vec{H} - \frac{\alpha}{M} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{pa^3}{2eM} (\vec{j} \cdot \vec{\nabla}) \vec{M} + \frac{pa^3 \beta}{2eM^2} [\vec{M} \times (\vec{j} \cdot \vec{\nabla}) \vec{M}], \quad (4.17)$$

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

onde p é a polarização de spin da corrente elétrica, a é o parâmetro de rede, α é o damping de Gilbert. O terceiro e quarto termos descrevem o acoplamento entre os spins e a corrente elétrica polarizada em spin $\vec{j}$. O terceiro termo, chamado termo de **“transferência de torque de spin**, é obtido assumindo que os spins dos elétrons são sempre paralelos aos momentos magnéticos locais devido à interação de troca (J_{sd}) e ao acoplamento de Hund (J_H) e, finalmente, o quarto termo, chamado termo “ β ”, descreve o acoplamento entre a corrente e a magnetização local devido a efeitos não adiabáticos [88,89].

Neste trabalho o termo de “damping” de Gilbert foi fixado em $\alpha = 0.04$, que é um valor típico para metais ferromagnéticos [38]. Com relação ao termo β , inicialmente testamos vários valores de β e verificamos que, conforme Iwazaki **et al** [38], a velocidade dos skyrmions na rede é independente de efeitos não adiabáticos. Assim, optamos por utilizar $\beta = \alpha$ em todas as nossas redes. As unidades naturais de tempo e densidade de corrente são $\tau = \hbar/J$ e $\kappa = \frac{2eMJ}{pa^2\hbar}$, que, para valores típicos como $J = 1\text{meV}$, $a = 5\text{\AA}$, $M = 1$ e $p = 0.2$, correspondem a $\tau = 6.5 \times 10^{-13}\text{s}$ e $\kappa = 1 \times 10^{13}\text{A/m}^2$. Estudamos ainda o efeito de vacâncias na rede inserindo, aleatoriamente, materiais não magnéticos em diferentes proporções, $0 \leq \rho \leq 5\%$, e efeitos da corrente polarizada de spins, variando a corrente polarizada de spin no intervalo $0.01\kappa \leq J_x \leq 0.07\kappa$, sendo a polarização ao longo do eixo x - mesma direção da corrente.

4.2.2 Equações de movimento

Façamos $S_{\vec{r}+\vec{r}_1}$ representar os quatro primeiros vizinhos, que corresponde a um do seguintes termos: $S_{\vec{r}+\hat{x}}$, $S_{\vec{r}-\hat{x}}$, $S_{\vec{r}-\hat{y}}$ ou $S_{\vec{r}+\hat{y}}$. Façamos também $S_{\vec{r}+\vec{r}_2}$ representa os quatro segundos vizinhos, que e corresponde a um dos seguintes termos: $S_{\vec{r}+\hat{x}-\hat{y}}$, $S_{\vec{r}+\hat{x}+\hat{y}}$, $S_{\vec{r}-\hat{x}-\hat{y}}$ ou $S_{\vec{r}-\hat{x}+\hat{y}}$.

Para encontrarmos a equação de movimento para cada partícula deste sistema na ausência de correntes de spin, Eq. 4.16, devemos determinar a Hamiltoniana efetiva de cada spin. Lembrando que a hamiltoniana efetiva é dada por

$$\vec{H}_i^{ef} = -\frac{\partial \mathcal{H}^i(\vec{S}_1, \vec{S}_2, \dots, \vec{S}_i, \dots, \vec{S}_n)}{\partial \vec{S}_i}. \quad (4.18)$$

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

No nosso caso

$$H_{eff_i}^j = \frac{dH_i}{dS_i^j}, \quad (4.19)$$

onde $j = x, y, z$.

Para a interação de Heisenberg entre os spins da rede e seus primeiros vizinhos temos que:

$$H_{1_i}^x = -J_1 \sum_r S_r^x (S_{r+x}^x + S_{r-x}^x + S_{r+y}^x + S_{r-y}^x) \quad (4.20)$$

$$H_{1_i}^y = -J_1 \sum_r S_r^y (S_{r+x}^y + S_{r-x}^y + S_{r+y}^y + S_{r-y}^y) \quad (4.21)$$

$$H_{1_i}^z = -J_1 \sum_r S_r^z (S_{r+x}^z + S_{r-x}^z + S_{r+y}^z + S_{r-y}^z) \quad (4.22)$$

Portanto,

$$H_{1_{eff_i}}^x = -J_1 \sum_r (S_{r+x}^x + S_{r-x}^x + S_{r+y}^x + S_{r-y}^x) \quad (4.23)$$

$$H_{1_{eff_i}}^y = -J_1 \sum_r (S_{r+x}^y + S_{r-x}^y + S_{r+y}^y + S_{r-y}^y) \quad (4.24)$$

$$H_{1_{eff_i}}^z = -J_1 \sum_r (S_{r+x}^z + S_{r-x}^z + S_{r+y}^z + S_{r-y}^z) \quad (4.25)$$

Analogamente, para a interação de Heisenberg entre os spins e seus segundos vizinhos temos:

$$H_{2_{ef}}^x = -J_2 \sum_r (S_{r+x+y}^x + S_{r-x+y}^x + S_{r+x-y}^x + S_{r-x-y}^x) \quad (4.26)$$

$$H_{2_{ef}}^y = -J_2 \sum_r (S_{r+x+y}^y + S_{r-x+y}^y + S_{r+x-y}^y + S_{r-x-y}^y) \quad (4.27)$$

$$H_{2_{ef}}^z = -J_2 \sum_r (S_{r+x+y}^z + S_{r-x+y}^z + S_{r+x-y}^z + S_{r-x-y}^z) \quad (4.28)$$

Já para a interação de Dzyaloshinskii–Moriya temos:

$$H_{DM_{ef}}^x = -D \sum_r (S_{r-y}^z + S_{r+y}^z) \quad (4.29)$$

$$H_{DM_{ef}}^y = -D \sum_r (S_{r+x}^z - S_{r-x}^z) \quad (4.30)$$

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

$$H_{DM_{ef}}^z = -D \sum_r (S_{r+y}^x - S_{r-y}^x + S_{r-x}^y + S_{r+x}^y) \quad (4.31)$$

Agora sim podemos voltar às equações de Landau–Lifshitz–Gilbert, que, sem os termos de corrente, adquirem a seguinte forma

$$\frac{dS^x}{dt} = -(S^y H_{eff}^z - S^z H_{eff}^y) + [S^y (S^x H_{eff}^y - S^y H_{eff}^x) - S^z (S^z H_{eff}^x - S^x H_{eff}^z)] \quad (4.32)$$

$$\frac{dS^y}{dt} = -(S^z H_{eff}^x - S^x H_{eff}^z) + [S^z (S^y H_{eff}^z - S^z H_{eff}^y) - S^x (S^x H_{eff}^y - S^y H_{eff}^x)] \quad (4.33)$$

$$\frac{dS^z}{dt} = -(S^x H_{eff}^y - S^y H_{eff}^x) + [S^x (S^z H_{eff}^x - S^x H_{eff}^y) - S^y (S^y H_{eff}^z - S^z H_{eff}^y)] \quad (4.34)$$

Como temos uma equação 4.17 para cada componente de cada spin da rede e, no hamiltoniano, aparecem os spins vizinhos, devemos resolver um sistema com $3N$ equações acopladas, sendo N o número total de spins na rede. Assim, para resolver este sistema de equações, utilizamos o método Runge-Kutta de 4ª ordem descrito na próxima seção.

4.2.3 O método Runge-Kutta de 4ª ordem

O método de Runge-Kutta é o método numérico mais utilizado na resolução de equações diferenciais ordinárias com valores iniciais. No método de Euler de passo h , a estimativa de y_{n+1} é realizada com os valores de y_n e sua derivada no ponto x_n . No método de Runge-Kutta a estimativa da derivada é melhorada fazendo uma avaliação da função em mais pontos no intervalo $[x_n, x_{n+1}]$.

Consideremos uma função $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ com um ponto conhecido $y = y_n$ quando $x = x_n$. O valor de y_{n+1} no ponto x_{n+1} , conforme a Figura 4.1, é dado por

$$y_{n+1} = y_n + \Delta y, \quad (4.35)$$

usando a seguinte aproximação

$$\frac{dy}{dx} = \frac{\Delta y}{\Delta x} \quad (4.36)$$

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

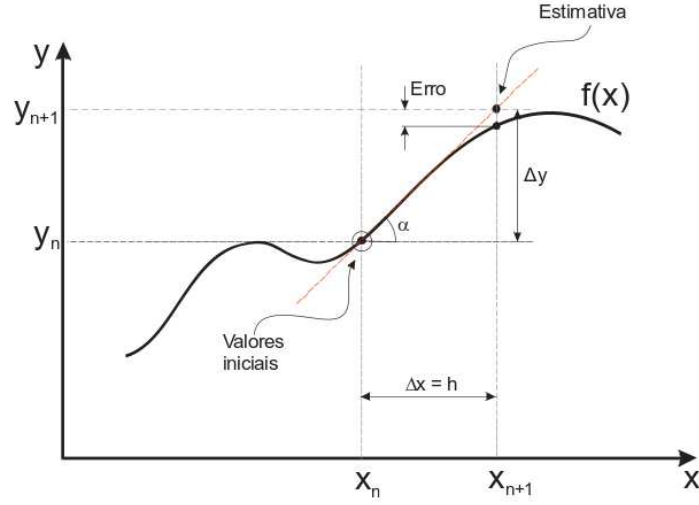


Figura 4.1: “Método de Euler”.

a equação 4.35 pode ser reescrita como

$$y_{n+1} = y_n + f(x_n, y_n)(x_{n+1} - x_n) , \quad (4.37)$$

definindo o “passo” $h = x_{n+1} - x_n$

$$x_{n+1} = x_n + h , \quad (4.38)$$

a equação 4.37 se torna

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) , \quad (4.39)$$

Assim, a resolução numérica da equação diferencial, através do método de Euler, consiste em utilizar as eq. 4.38 e 4.39 recursivamente, partindo dos valores iniciais x_0, y_0 . Claro que, quanto menor o passo, mais próxima da solução real é a solução numérica. No método de Runge-Kutta de quarta ordem mais popular, a fórmula recursiva é dada por

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) , \quad (4.40)$$

onde $k_1 = hf(x_n, y_n)$

$k_2 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1)$

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

$$k_3 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2)$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3)$$

A partir da configuração inicial dos spins obtidos por Monte Carlo e das equações 4.17, utilizamos o método Runge–Kutta de 4ª ordem para determinar a dinâmica da rede, ou seja, para determinar as novas configurações da rede ao longo do tempo no intervalo $0 \leq t \leq 200\tau$. Com as configurações, utilizamos o programa “ImageJ” para determinar a posição de cada skyrmion ao longo do tempo e com elas calculamos a velocidade de cada skyrmion na rede na presença de correntes polarizadas de spin. Conforme Everschor [77], tais correntes polarizadas podem ser obtidas com a aplicação uma corrente elétrica na amostra com um momento magnetico finito, mas existem outras maneiras como aplicação de um gradiente de temperaturas ou do gradiente de um campo magnético na amostra.

4.3 Resultados e Discussão

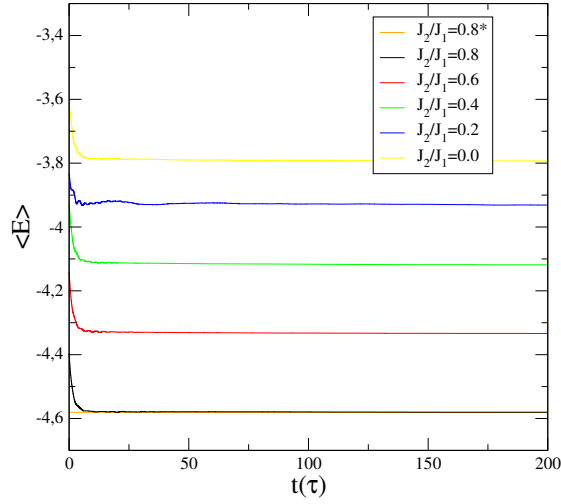


Figura 4.2: Energia por spin em função do tempo para redes com 40×80 spins na ausência de de vacância e de correntes polarizadas de spins. Em $J_2/J_1 = 0.8^*$ a evolução temporal foi feita tomando como configuração inicial a configuração obtida para $J_2/J_1 = 0.8$, depois de $t = 50\tau$, ou seja, tomando como configuração inicial o estado fundamental do sistema.

O termo de “damping”, nas equações de Landau-Lifshitz-Gilbert, é um termo de dissipação de energia. De maneira que, ao fazermos evolução temporal, este termo re-

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

tira energia do sistema correspondendo a um resfriamento do mesmo. Portanto, depois de algumas iterações de evolução temporal, ou seja, depois de um tempo de relaxação, a energia tende para um mínimo, conforme figura 4.2, correspondendo ao estado fundamental do sistema. Assim, fizemos a evolução temporal sem corrente polarizada de spin até atingir o estado fundamental e, somente a partir daí, acrescentamos a corrente elétrica.

4.3.1 Influência de vacâncias na rede

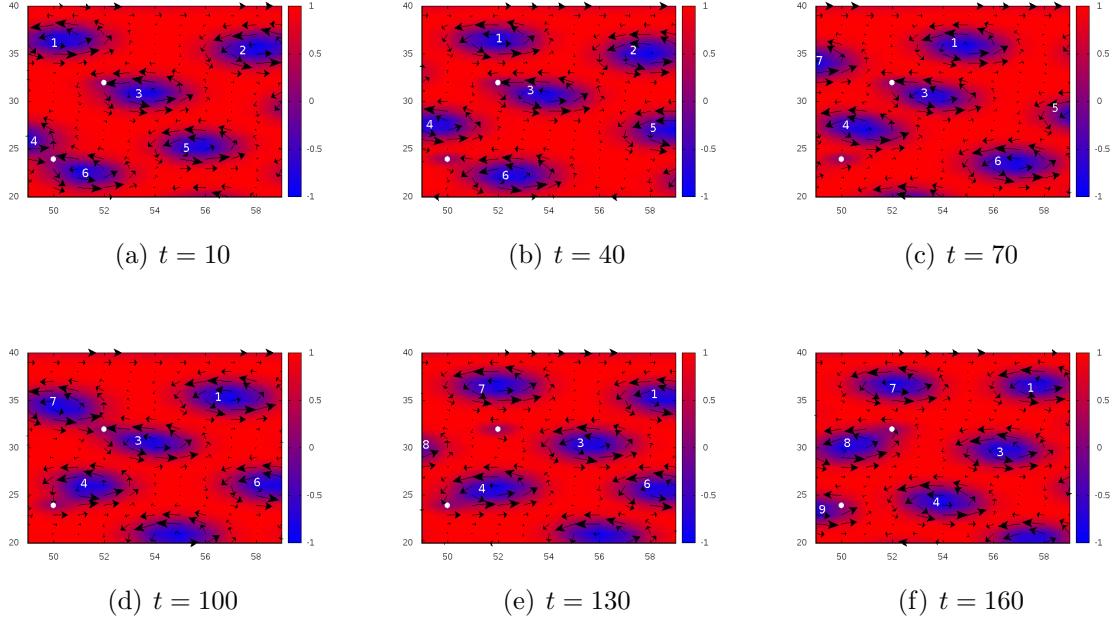


Figura 4.3: Zoom da configuração de spins no espaço real de uma rede com $J_2/J_1 = 0.2$ sob uma corrente $J_x = 0.03\kappa$ com um percentual de vacâncias $\rho = 1\%$ para diferentes instantes de tempo. As vacâncias estão representadas por pontos brancos que correspondem a elementos não magnéticos inseridos na rede aleatoriamente.

Nossos resultados indicam que as vacâncias atuam fortemente como forças de “pinning” dificultando a translação dos skyrmions pela rede, pois os skyrmions tendem a se fixar à elas, como pode ser visto na figura 4.3, que apresenta um “zoom” da configuração de spins no espaço real para uma rede com $J_2/J_1 = 0.2$ sob uma corrente $J_x = 0.03\kappa$ com um percentual de vacâncias $\rho = 1\%$ em uma temperatura

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

$\mathcal{T} = 0.01J/K_B$ para diferentes instantes de tempo. Podemos observar nesta figura que o skyrmion de número 1, por exemplo, que não se fixa a nenhuma vacância atravessa quase toda a largura da rede mostrada, enquanto o skyrmion de número 3 permanece ligado à vacância até $t = 100\tau$ (figura 4.3(d)). Como utilizamos concentrações muito altas de vacâncias, estas vacâncias acabaram por desestabilizar a rede de skyrmions, provocando sua destruição e formação ao longo do tempo.

O número médio de skyrmions presentes na rede com o passar do tempo é apresentado na figura 4.4, que confirma essa desestabilização da rede. Na figura 4.5 temos um “zoom” de uma outra parte da mesma rede anterior. Nela podemos observar a dificuldade de um skyrmion passar pelas vacâncias, assim como destruição de skyrmions, já que dois skyrmions podem se juntar, formando um único skyrmion como no caso dos skyrmions 1 e 3 que se acabaram se juntando devido a uma vacância formaram o skyrmion 1 – 3 (figura 4.5(d) em diante) e dos skyrmions 6 e 15 que formaram o skyrmion 6 – 15 na figura 4.5(f).

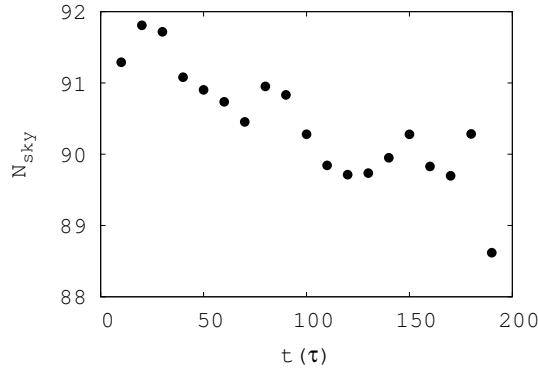


Figura 4.4: Número médio de skyrmions em função do tempo para uma rede com 40×80 spins e $J_2/J_1 = 0.2$, sob uma corrente $J_x = 0.03\kappa$ com um percentual de vacâncias $\rho = 1\%$

Ao calcularmos a velocidade média dos skyrmions ao longo do eixo x , direção da aplicação da corrente polarizada de spins, encontramos, por exemplo, que, sob uma corrente $J_x = 0.03\kappa$, a rede com $\rho = 1\%$ apresenta uma velocidade média por skyrmion $v_x = 3.9 \times 10^{-2}a/\tau \approx 30m/s$, para os valores típicos citados no início deste capítulo, enquanto a mesma rede sem vacâncias, ou seja, a rede limpa, nas mesmas condições, apresenta uma velocidade média $v_x = 5.3 \times 10^{-2}a/\tau \approx 40m/s$. Este é um resultado

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

diferente do apresentado por Iwazaki [38], no qual a rede, na presença de 0.1% de impurezas, não apresenta mudança na velocidade dos skyrmions em relação à rede limpa. Consideramos que esta diferença se deve ao fato de termos considerado uma concentração maior de impurezas, mas, considerando que as impurezas atuam como forças de “pinning”, esperamos que essas impurezas, de fato, alterem a velocidade dos skyrmions na rede. Uma outra diferença com relação ao resultado teórico obtido por eles consiste no fato de eles terem inserido as impurezas na forma de anisotropias, enquanto nós inserimos as impurezas substituindo o valor de parte dos spins da rede (cuja localização na rede foi sorteada aleatoriamente) por spin zero, representando partículas não magnéticas.

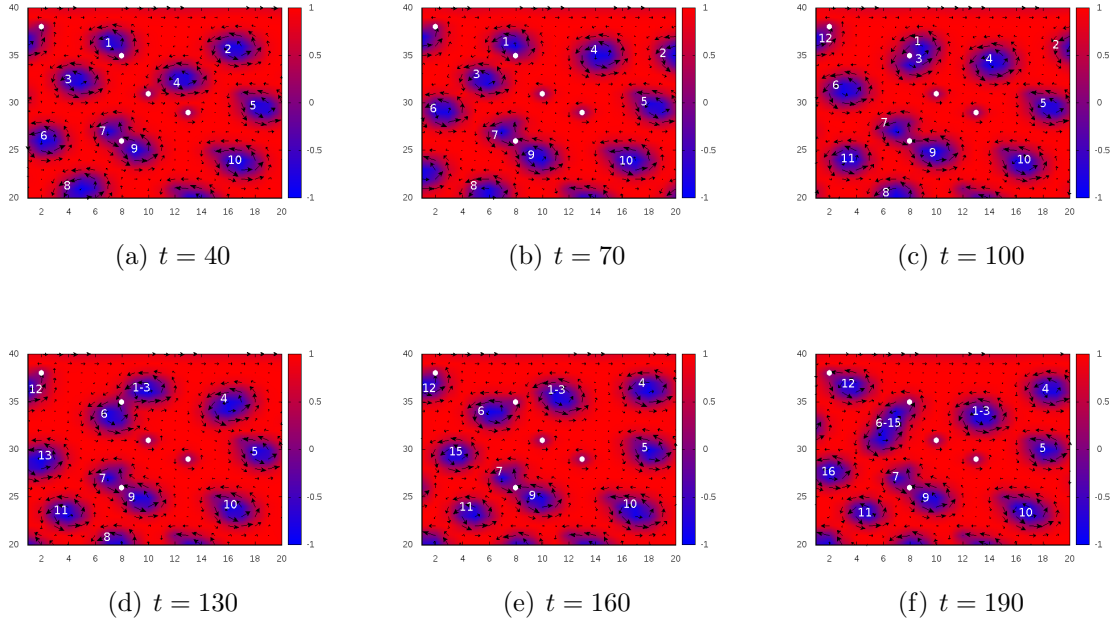


Figura 4.5: Zoom da configuração de spins no espaço real de uma rede com $J_2/J_1 = 0.2$ sob uma corrente $J_x = 0.03$ com um percentual de vacâncias $\rho = 1\%$ para diferentes instantes de tempo (em unidades de τ). As vacâncias estão representadas por pontos brancos que correspondem a elementos não magnéticos inseridos na rede aleatoriamente.

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

4.3.2 Dinâmica da rede livre de impurezas e vacâncias

Com relação à interação de troca entre segundos vizinhos, a princípio fizemos testes para a evolução temporal com diversos valores de correntes polarizadas de spins para redes com $-1.0 < J_2/J_1 < 1.0$. Vale lembrar que optamos por não considerar a interação DM entre segundos vizinhos. Verificamos que a rede de skyrmions, nos casos em que a interação de troca entre segundos vizinhos antiferromagnéticas é intensa, fica muito instável na presença de qualquer corrente forte o suficiente para mover os skyrmions. A rede de skyrmions, nos caso de interações antiferromagnéticas entre segundos vizinhos, é destruída para correntes polarizadas de spins muito menores, por exemplo, que as correntes necessárias para destruir as redes nos casos em que a interação é ferromagnética, pois no caso antiferromagnético o tamanho do skyrmion é menor quanto maior a interação e a rede mais densa. Assim, consideramos a interação de troca entre segundos vizinhos no seguinte intervalo $-0.2 < J_2/J_1 < 1.0$, ou seja, optamos por não trabalhar com interações antiferromagnéticas fortes entre segundos que, devido ao tamanho dos skyrmions gerados para este tipo de interação e à densidade de skyrmions na rede, não favorece o movimento dos skyrmions pela rede.

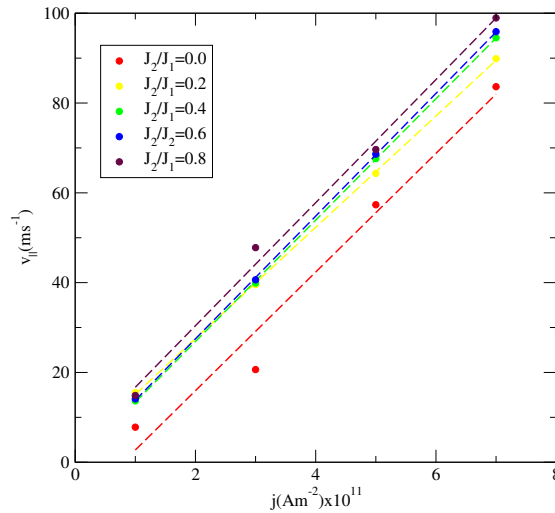


Figura 4.6: Velocidade média dos skyrmions paralela à corrente polarizada de spin em função da corrente aplicada para redes com diferentes interações entre segundos vizinhos livre de vacâncias, ou seja, $\rho = 0\%$, em $\mathcal{T} = 0.01(J/K_B)$ sob campo magnético externo $B = 2.0(J)$ perpendicular ao plano da rede.

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

A figura 4.6 nos mostra a relação entre a velocidade paralela à corrente elétrica aplicada polarizada de spins adquirida pelos skyrmions na rede, em função de tal corrente, para diferentes intensidades de interação de troca entre segundos vizinhos J_2/J_1 , tomadas após o tempo de relaxação do sistema. Todas as redes encontram-se em uma temperatura $\mathcal{T} = 0.01(J/K_B)$, sob campo magnético perpendicular à rede $B = 2.0(J)$. A velocidade paralela varia linearmente com a intensidade da corrente aplicada, como era esperado de acordo com Iwzaki *et al* [38] ($v_{\parallel} = \frac{pa^3j}{2eM}$, para interações apenas entre primeiros vizinhos), para todas as redes. A velocidade mostrada praticamente não sofre variações com a mudança nas interações ferromagnéticas entre segundos vizinhos. Apesar de não alterar o módulo da velocidade na faixa apresentada, durante a pesquisa, pudemos verificar que as redes com interações entre segundos vizinhos maiores, suporta a aplicação de correntes mais fortes sem destruir os skyrmions na rede. Nestas redes com interação maior entre segundos vizinhos, os skyrmions são maiores e, portanto, a rede é menos densa, o que pode ser verificado na figura 4.7. Nela apresentamos o raio médio dos skyrmions presentes na rede e o número de skyrmions para cada intensidade de interação ferromagnética estudada. Essa distância maior entre os skyrmions acaba favorecendo um movimento mais independente, de maneira que a rede não é destruída.

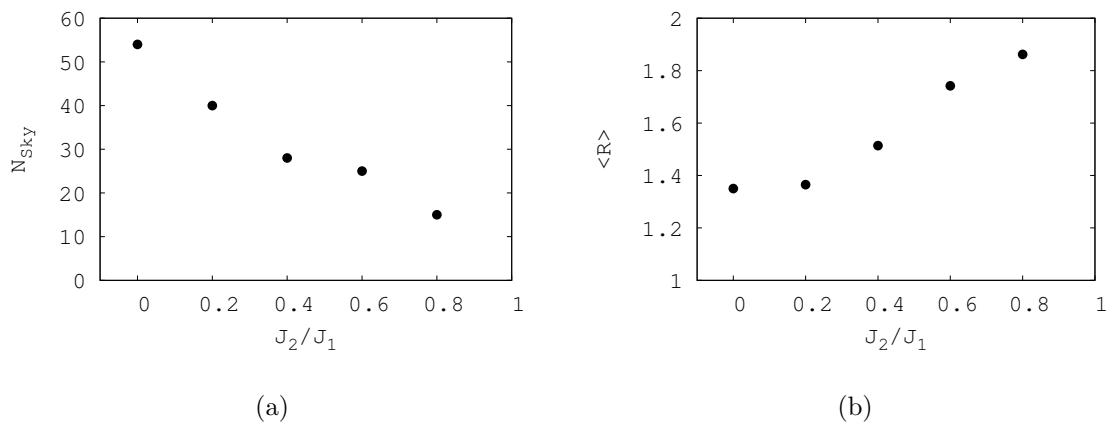


Figura 4.7: (a) Número e (b) raio médio dos skyrmions para redes com diferentes interações entre segundos vizinhos livre de vacâncias, ou seja, $\rho = 0\%$ em uma temperatura $\mathcal{T} = 0.01(J/K_B)$ sob campo magnético externo $B = 2.0(J)$ aplicado perpendicular à rede.

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

Os skyrmions em nossas redes apresentam ainda uma velocidade perpendicular à corrente polarizada de spins aplicada, que corresponde à força de Magnus, responsável pelo efeito Hall topológico, como discutimos no capítulo 2. Como nossa rede tem formato de fita, ou seja, as condições de contorno são abertas na direção perpendicular à aplicação da corrente, que é aplicada ao longo do comprimento, essa velocidade é difícil de ser detectada pois é bem menor que a velocidade paralela. Na figura 4.8 mostramos as velocidades encontradas.

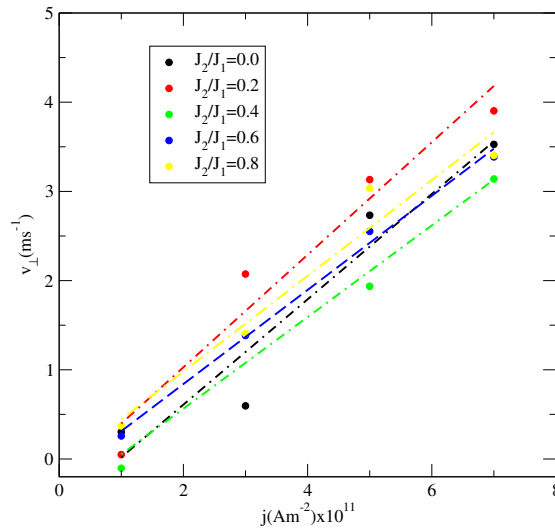


Figura 4.8: Velocidade média do skyrmions perpendicular à corrente polarizada de spins em função da corrente aplicada para redes com diferentes interações entre segundos vizinhos livre de vacâncias, ou seja, $\rho = 0\%$, em $\mathcal{T} = 0.01(J/K_B)$ sob campo magnético externo $B = 2.0(J)$ perpendicular ao plano da rede, tomadas após o tempo de relaxação do sistema.

4.4 Conclusões

Neste capítulo estudamos redes hexagonais de skyrmions na presença de correntes polarizadas de spins em sistema com condição de contorno periódica apenas ao longo do comprimento da rede, que é a mesma direção de aplicação de corrente elétrica, na presença de impurezas ou não. Nossos resultados indicam que sistemas com uma concentração grande de impurezas atrapalham o deslocamento das redes dos skyrmions sob aplicação de corrente polarizada de spins, pois os skyrmions, nestas condições, tendem a se fixar nas impurezas, de maneira que tais impurezas atuam como forças

4. Dinâmica de magnetos quirais com interações entre segundos vizinhos

de “pinning”, podendo ocorrer até mesmo a coalescência de skyrmions na tentativa de passar pela impureza, destruindo sua forma hexagonal original.

Além do movimento de translação ao longo da corrente aplicada (velocidade paralela à corrente polarizada), devido à força de “dissipação” da corrente, detectamos também em nossas redes uma velocidade transversal á corrente aplicada, devido à força de Magnus, que corresponde à uma contribuição de origem topológica ao efeito Hall. Essa velocidade é ligeiramente maior para os sistemas em que a interação com segundos vizinhos é maior, indicando que em tais sistemas possa ser mais fácil a detecção de tal efeito.

A interação de troca entre segundos vizinhos não influenciou, de maneira tão acentuada, a velocidade paralela à corrente elétrica. No entanto, redes com tais interações maiores, se mostraram mais estáveis frente a aplicação de correntes maiores e atribuímos isto ao tamanho dos skyrmions na rede que, por serem maiores quanto maior a interação entre segundos vizinhos, se tornaram mais estáveis.

4.5 Perspectivas

Seria muito interessante dar sequência a este estudo verificando, por exemplo, redes com um percentual menor de vacâncias e acrescentando uma análise mais profunda da influência dos segundos vizinhos no efeito Hall topológico, calculando o ângulo Hall, por exemplo. Além disso, é fundamental aumentar o número de pontos nas curvas das velocidades, incluindo cálculos para outras intensidades de correntes polarizadas de spins.

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho estudamos a influência de segundos vizinhos na termodinâmica e na dinâmica de sistemas magnéticos quirais. Tais sistemas têm sido amplamente estudados devido às suas possíveis aplicações tecnológicas, principalmente por terem sido identificadas redes de skyrmions em temperatura ambiente e estes skyrmions se moverem sobre a aplicação de correntes de ultra-baixa densidade. O movimento de skyrmions devido à aplicação de correntes elétricas de baixa densidade, por exemplo, já foi identificado através de estudos de espalhamento de neutrons, onde mostrou-se que tais correntes (da ordem de $10^2 A/cm^2$) podem provocar a rotação e a translação dos skyrmions através do material. No Brasil, no entanto, não temos pesquisadores experimentais desenvolvendo tais sistemas, pelo menos não se tem trabalhos publicado na área. Assim, seria muito interessante conseguir a fabricação e caracterização experimental destes sistemas no país, através de parcerias com pesquisadores experimentais. Nossos resultados apontam caminhos para se conseguir redes mais estáveis, através da fabricação de sistemas com interações com segundos vizinhos maiores.

Na termodinâmica mostramos que um aumento em tais interações, por exemplo, amplia a faixa de campos magnéticos em que tais redes aparecem. Essas interações podem fornecer ainda outras contribuições importantes, como alteração no período dos estados helicais e parâmetro de rede das redes de skyrmions, bem como influenciam diretamente o raio dos skyrmions. Como sequência do trabalho nesta parte de termodinâmica podemos, entre outras coisas, avaliar o sistema na presença de impurezas e vacâncias, aproximando nossas redes de sistemas reais. É importante também estudar outros mecanismos de geração e destruição de skyrmions.

No estudo da dinâmica analisamos redes hexagonais de skyrmions na presença de

Conclusões e Perspectivas

correntes polarizadas de spins em sistema com condição de contorno periódica apenas ao longo do comprimento da rede, que é a mesma direção de aplicação de corrente elétrica, na presença de impurezas ou não. Nossos resultados indicam que sistemas com uma concentração grande de impurezas 1% atrapalham o deslocamento das redes de dos skyrmions sob aplicação de corrente polarizada de spins. Os skyrmions, nestas condições, tendem a se fixar nas impurezas, de maneira que tais impurezas atuam como forças de “pinning”, podendo ocorrer até mesmo a coalescência de skyrmions na tentativa de passar pela impureza, destruindo sua forma hexagonal original.

Um outro resultado desta parte do trabalho é que, apesar de a interação de troca entre segundos vizinhos praticamente não influenciar a velocidade dos skyrmions paralela à corrente elétrica, redes com tais interações maiores, se mostraram mais estáveis frente a aplicação de correntes maiores. Detectamos também em nossas redes uma velocidade transversal à corrente aplicada, devido à força de Magnus, que corresponde à uma contribuição de origem topológica ao efeito Hall. Essa velocidade encontrada foi ligeiramente maior para os sistemas em que a interação com segundos vizinhos é maior, indicando que em tais sistemas possa ser mais fácil a detecção desse efeito. Como continuação imediata deste trabalho podemos verificar como estes segundos vizinhos influenciam no Efeito Hall, calculando o ângulo Hall, por exemplo. Além disso, podemos testar a rede com uma concentração menor de impurezas.

Apêndice A

Dedução da Interação de Troca de Heisenberg

Este apêndice foi escrito baseado no Capítulo 3 do livro do Aharoni [46]. Consideremos um sistema formado por N elétrons ligados a M átomos idênticos e isolados. Seja ainda uma autofunção de um elétron ligado ao átomo i dada por $\phi_j(\vec{\rho}_i)$, em que $\vec{\rho}_i$ contém as informações de espaço e de spin. Como os átomos são iguais e isolados, as autofunções de um átomo k diferem apenas na coordenada $\vec{\rho}_i$ em relação ao átomo i . Se os M átomos do cristal não estiverem muito próximos, a interação entre eles é pequena e as mudanças nos níveis atômicos em relação aos níveis de cada átomo isolado podem ser desprezadas, de maneira que as autofunções dos átomos isolados formam uma base ortonormal do sistema. Assim, as funções de onda do sistema podem ser escritas como uma combinação linear das autofunções dos átomos isolados

$$\int \phi_j^*(\vec{\rho}_i) \phi_k(\vec{\rho}_i) d\vec{\rho}_i = \delta_{j,k} \quad (\text{A. 1})$$

Observando o Princípio de Exclusão de Pauli, que afirma que num átomo nunca pode haver mais de um elétron ocupando o mesmo estado quântico, essa combinação tem que ser anti-simétrica na troca de coordenadas. Usando o determinante de Slater

Apêndice A: Dedução da Interação de Troca de Heisenberg

para construir essa função de onda

$$\Psi(\rho_1, \dots, \rho_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{\rho}_1) & \phi_1(\vec{\rho}_2) & \dots & \phi_1(\vec{\rho}_N) \\ \phi_2(\vec{\rho}_1) & \phi_2(\vec{\rho}_2) & \dots & \phi_2(\vec{\rho}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_N(\vec{\rho}_1) & \phi_N(\vec{\rho}_2) & \dots & \phi_N(\vec{\rho}_N) \end{vmatrix}. \quad (\text{A. 2})$$

O hamiltoniano que descreve um elétron ligado a um átomo isolado é dado por:

$$\mathcal{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + V(\vec{r}_i) \quad (\text{A. 3})$$

onde $V(\vec{r}_i)$ é o potencial de ligação. Como os elétrons das camadas internas estão muito fortemente ligados ao núcleo, pode-se considerar que estes elétrons juntamente com o núcleo atuam como um íon sobre os elétrons das camadas mais externas. Assim, o hamiltoniano do sistema pode ser

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} + \mathcal{H}_c \quad (\text{A. 4})$$

onde o primeiro termo na expressão acima corresponde à interação com o átomo a que pertence, equação (A. 3), o segundo termo à interação coulombiana com os outros elétrons das camadas mais externas e o último termo à interação com os íons do sistema.

A energia do sistema é

$$\varepsilon = \int \int \dots \int \Psi^* \mathcal{H} \Psi d\rho_1 d\rho_2 \dots d\rho_N \quad (\text{A. 5})$$

que pode ser escrita como uma soma de integrais visto que o operador $\mathcal{H}$ é linear. Portanto,

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \varepsilon_{ij} + \varepsilon_c \quad (\text{A. 6})$$

onde

$$\varepsilon_i = \int \int \dots \int \Psi^* \mathcal{H}_i \Psi d\rho_1 d\rho_2 \dots d\rho_N \quad (\text{A. 7})$$

$$\varepsilon_{ij} = \int \int \dots \int \Psi^* \frac{e^2}{r_{ij}} \Psi d\rho_1 d\rho_2 \dots d\rho_N \quad (\text{A. 8})$$

Apêndice A: Dedução da Interação de Troca de Heisenberg

$$\varepsilon_c = \int \int \dots \int \Psi^* \mathcal{H}_c \Psi d\rho_1 d\rho_2 \dots d\rho_N \quad (\text{A. 9})$$

Para modelos magnéticos, é uma boa aproximação considerar apenas os spins dos átomos. Assim, como a última integral envolve apenas íons, ela não será incluída no modelo. Já na primeira integral, aplicando $\mathcal{H}_i$ em Ψ , que possui $N!$ termos, sendo cada termo o produtos das N autofunções ϕ'_k s, ele opera somente na autofunção $\phi_k(\vec{\rho}_i)$. Multiplicando por Ψ^* e integrando, devido à base ser ortonormal, os termos cruzados serão nulos e os termos diretos são da forma

$$\int \phi_k^*(\rho_i) \mathcal{H}_i \phi_k(\rho_i) d\rho_i \quad (\text{A. 10})$$

Para um dado k e um i existem $(N - 1!)$ termos com $\phi_k(\rho_i)$ em Ψ . Assim,

$$\varepsilon_i = \frac{(N - 1)!}{N!} \sum_{k=1}^N \int \phi_k^*(\rho_i) \mathcal{H}_i \phi_k(\rho_i) d\rho_i \quad (\text{A. 11})$$

como a integral tem o mesmo valor, qualquer que seja o i , o termo acima pode ser reescrito como

$$\varepsilon_i = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \int \phi_k^*(\rho_1) \mathcal{H}_1 \phi_k(\rho_1) d\rho_1 \quad (\text{A. 12})$$

ou seja,

$$\sum_{i=1}^N \varepsilon_i = N \varepsilon_i = \sum_{k=1}^N \int \phi_k^*(\rho_1) \mathcal{H}_1 \phi_k(\rho_1) d\rho_1 = \sum_{k=1}^N E_k \quad (\text{A. 13})$$

onde os E'_k s são os autovalores de energia de cada elétron quando está separado, que também não inclui o spin. Assim, este termo também pode ser omitido no hamiltoniano.

Para o termo ε_{ij} , para cada termo Ψ^* , existem dois em Ψ com os quais a integral não se anula pela condição de ortonormalidade. Nestes termos não nulos aparecem $\phi_k(\vec{\rho}_i)$ e $\phi_{k'}(\vec{\rho}_j)$ e seus complexos conjugados. Os termos resultantes na integral ficam

Apêndice A: Dedução da Interação de Troca de Heisenberg

com a seguinte forma:

$$\int \int \phi_k^*(\rho_i) \phi_{k'}^*(\rho_j) \frac{e^2}{r_{ij}} \phi_k(\rho_i) \phi_{k'}(\rho_j) d\rho_i d\rho_j - \int \int \phi_k^*(\rho_i) \phi_{k'}^*(\rho_j) \frac{e^2}{r_{ij}} \phi_k(\rho_j) \phi_{k'}(\rho_i) d\rho_i d\rho_j \quad (\text{A. 14})$$

Esta integral também se repete $(N - 1)!$ vezes e também independem da escolha dos índices i e j . Assim

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{k,k'=1}^N \int \int |\phi_k(\vec{\rho}_1)|^2 \frac{e^2}{r_{ij}} |\phi_{k'}(\vec{\rho}_2)|^2 d\rho_1 d\rho_2 - \frac{1}{2} \sum_{k,k'=1}^N \int \int \phi_k^*(\rho_1) \phi_{k'}^*(\rho_2) \frac{e^2}{r_{ij}} \phi_k(\rho_2) \phi_{k'}(\rho_1) d\rho_1 d\rho_2 \quad (\text{A. 15})$$

O primeiro termo do lado direito na equação (A. 15) é a interação coulombiana entre os pares de elétrons e não será incluído no modelo pois não têm interação de spin. Já as integrais do segundo termo são chamadas de *integrais de troca* e sua soma é a *energia de troca*. Como as funções de spin são ortogonais, as integrais serão nulas para spins não paralelos. Assim, a integral de troca representa a diferença de energia entre o estado com spins paralelos e o estado com spins anti-paralelos. Essa interação de troca é usualmente substituída por um hamiltoniano efetivo que minimiza a energia para estados com spins paralelos ou anti-paralelos, dependendo do sinal da integral. Isso sugere uma expressão proporcional a $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ no hamiltoniano efetivo. Assim:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j=1}^N J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (\text{A. 16})$$

que é a forma mais comum da interação de troca de Heisenberg, onde

$$J_{ij} = 2 \int \phi_i^*(\vec{r}_1) \phi_j^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{r_{ij}} \phi_i(\vec{r}_2) \phi_j(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (\text{A. 17})$$

e $\vec{S}_i$ é o spin total do átomo no sítio i .

Apêndice B

Dedução da Interação de Dzyaloshinskii-Moriya

Este apêndice foi escrito baseado nos artigos de Anderson [53] e Moriya [54, 55]. Podemos expressar os estados localizados do elétron nos cátions por funções de Wannier, sendo que o Hamiltoniano de um elétron consiste na energia dos estados localizados e termos de transferências entre eles. Escrevamos as duas funções de onda degeneradas localizadas em uma posição R da seguinte maneira:

$$\Psi_{n\uparrow}(r - R), \Psi_{n\downarrow}(r - R)$$

onde $\uparrow$ e $\downarrow$ correspondem às diferentes configurações de spin, ou seja, spin quase “up” e spin quase “down” respectivamente. Ao se considerar o acoplamento spin-órbita, as funções de onda deixam de ser autofunções da componente z do spin, e passam a ser estados misturados de spin $+$ e $-$, ou seja, por causa do acoplamento spin-órbita os estados “spin up” e “spin down” são misturados nas funções de onda. Os termos de um

Apêndice B: Dedução da Interação de Dzyaloshinskii-Moriya

elétron no Hamiltoniano são então escritos como

$$\begin{aligned}
 \varepsilon = & \sum_R \sum_n \epsilon_n(R) \left[\alpha_{n\uparrow}^*(R) \alpha_{n\uparrow}(R) + \alpha_{n\downarrow}^*(R) \alpha_{n\downarrow}(R) \right] \\
 & + \sum_{R \neq R'} \sum_{n, n'} \left\{ \left[\int \Psi_{n\uparrow}^*(r - R') \mathcal{H}_1 \Psi_{n\uparrow}(r - R) d\tau \right] \left[\alpha_{n\uparrow}^*(R') \alpha_{n\uparrow}(R) \right] \right. \\
 & + \left[\int \Psi_{n\downarrow}^*(r - R') \mathcal{H}_1 \Psi_{n\downarrow}(r - R) d\tau \right] \left[\alpha_{n\downarrow}^*(R') \alpha_{n\downarrow}(R) \right] \\
 & + \left[\int \Psi_{n\uparrow}^*(r - R') \mathcal{H}_1 \Psi_{n\downarrow}(r - R) d\tau \right] \left[\alpha_{n\uparrow}^*(R') \alpha_{n\downarrow}(R) \right] \\
 & \left. + \left[\int \Psi_{n\downarrow}^*(r - R') \mathcal{H}_1 \Psi_{n\uparrow}(r - R) d\tau \right] \left[\alpha_{n\downarrow}^*(R') \alpha_{n\uparrow}(R) \right] \right\} \quad (\text{B. 1})
 \end{aligned}$$

com

$$\mathcal{H}_1 = \frac{p^2}{2m} + V(r) + \frac{\hbar}{2m^2 c^2} \vec{S} \cdot [\vec{\nabla} V(r) \times \vec{p}] \quad (\text{B. 2})$$

Note que, na equação (B. 2) o primeiro termo corresponde à energia cinética, o segundo à repulsão coulombiana e o último ao acoplamento spin-órbita. Fazendo

$$C_{n'n}^-(R' - R) = \int \Psi_{n\uparrow}^*(r - R') \mathcal{H}_1 \Psi_{n\downarrow}(r - R) d\tau$$

$$C_{n'n}^+(R' - R) = \int \Psi_{n\downarrow}^*(r - R') \mathcal{H}_1 \Psi_{n\uparrow}(r - R) d\tau$$

$$b_{n'n}(R' - R) + C_{n'n}^z(R' - R) = \int \Psi_{n\uparrow}^*(r - R') \mathcal{H}_1 \Psi_{n\uparrow}(r - R) d\tau$$

$$b_{n'n}(R' - R) - C_{n'n}^z(R' - R) = \int \Psi_{n\downarrow}^*(r - R') \mathcal{H}_1 \Psi_{n\downarrow}(r - R) d\tau$$

A equação (B. 1) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
 \varepsilon = & \sum_R \sum_n \epsilon_n(R) \left[\alpha_{n\uparrow}^*(R) \alpha_{n\uparrow}(R) + \alpha_{n\downarrow}^*(R) \alpha_{n\downarrow}(R) \right] \\
 & + \sum_{R \neq R'} \sum_{n, n'} \left\{ b_{n'n}(R' - R) \left[\alpha_{n\uparrow}^*(R') \alpha_{n\uparrow}(R) + \alpha_{n\downarrow}^*(R') \alpha_{n\downarrow}(R) \right] \right. \\
 & + C_{n'n}^z(R' - R) \left[\alpha_{n\uparrow}^*(R') \alpha_{n\uparrow}(R) - \alpha_{n\downarrow}^*(R') \alpha_{n\downarrow}(R) \right] \\
 & \left. + C_{n'n}^-(R' - R) \alpha_{n\uparrow}^*(R') \alpha_{n\uparrow}(R) + C_{n'n}^+(R' - R) \alpha_{n\downarrow}^*(R') \alpha_{n\downarrow}(R) \right\} \quad (\text{B. 3})
 \end{aligned}$$

Apêndice B: Dedução da Interação de Dzyaloshinskii-Moriya

onde

$$C_{n'n}^{\pm}(R' - R) = C_{n'n}^x(R' - R) \pm iC_{n'n}^y(R' - R)$$

sendo $\alpha_{n\uparrow}^*(R)$ e $\alpha_{n\uparrow}(R)$ operadores criação e destruição do estado representado por $\Psi_{n\uparrow}(r - R)$, etc. Por causa dos termos de transferências da equação (B. 3), as configurações de estados polares são os que mais contribuem para a supertroca. A perturbação de segunda ordem fornece não só o acoplamento isotrópico usual de supertroca (termos b^2) mas um acoplamento anisotrópico vindo dos termos bC , que têm a forma da equação (??), e o acoplamento pseudo-dipolar usual (termos C^2), que são muito menores que termos bC . Consideremos o caso de um elétron por átomo com estado orbital fundamental não degenerado e as seguintes relações:

$$\begin{aligned} \alpha_{n\uparrow}^*(R)\alpha_{n\uparrow}(R) - \alpha_{n\downarrow}^*(R)\alpha_{n\downarrow}(R) &= 2S_z^n(R) \\ \alpha_{n\uparrow}^*(R)\alpha_{n\uparrow}(R) + \alpha_{n\downarrow}^*(R)\alpha_{n\downarrow}(R) &= 1 \\ \alpha_{n\uparrow}^*(R)\alpha_{n\downarrow}(R) &= S_+^n(R) = S_x^n(R) + iS_y^n(R) \\ \alpha_{n\downarrow}^*(R)\alpha_{n\uparrow}(R) &= S_-^n(R) = S_x^n(R) - iS_y^n(R) \end{aligned} \quad (\text{B. 4})$$

onde os S^n 's são os spins das partículas no estado “ n ”. Observe que $n_R(+)=\alpha_{n\uparrow}^*(R)\alpha_{n\uparrow}(R)$ é um operador que conta o número de partículas $\uparrow$ na posição R . A repulsão entre os elétrons no mesmo íon impede a ocupação permanente de estados ionizados, o que torna as substâncias de bandas-d isolantes. Mas, por ocupações virtuais, troca de elétron entre estados fundamentais e estados ionizados através das integrais de transferência b,o sistema pode ganhar uma certa quantidade de energia. Neste caso, todos os estados degenerados nos múltiplos estados fundamentais têm um elétron por íon, enquanto todos os estados excitados têm uma energia U, Entre os quais os pares de íons à distância $R - R'$ há apenas um $b_{R-R'}$. Considerando uma perturbação de segunda ordem [90], na energia temos que:

$$\Delta E^{(2)} = \sum_{\sigma' \neq \sigma} \frac{|\langle \sigma'^{(0)} | E | \sigma^{(0)} \rangle|^2}{E_{\sigma}^{(0)} - E_{\sigma'}^{(0)}} \quad (\text{B. 5})$$

Contribuição dos termos b^2

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon_{b^2}^{(2)} = \frac{|b_{R-R'}|^2}{U} & \left[\alpha_{n_\uparrow}^*(R')\alpha_{n_\uparrow}(R)\alpha_{n_\uparrow}^*(R)\alpha_{n_\uparrow}(R') \right. \\ & - \alpha_{n_\uparrow}^*(R')\alpha_{n_\uparrow}(R)\alpha_{n_\downarrow}^*(R)\alpha_{n_\downarrow}(R') \\ & + \alpha_{n_\downarrow}^*(R')\alpha_{n_\downarrow}(R)\alpha_{n_\uparrow}^*(R)\alpha_{n_\uparrow}(R') \\ & \left. + \alpha_{n_\downarrow}^*(R')\alpha_{n_\downarrow}(R)\alpha_{n_\downarrow}^*(R)\alpha_{n_\downarrow}(R') \right] \quad (\text{B. 6}) \end{aligned}$$

Do primeiro e do último termo da equação acima temos

$$\begin{aligned} & \alpha_{n_\uparrow}^*(R')\alpha_{n_\uparrow}(R)\alpha_{n_\uparrow}^*(R)\alpha_{n_\uparrow}(R') \\ & + \alpha_{n_\downarrow}^*(R')\alpha_{n_\downarrow}(R)\alpha_{n_\downarrow}^*(R)\alpha_{n_\downarrow}(R') \\ & = n_{R'}(+)n_R(-) + n_{R'}(-)n_R(+) = n_R(-) \left[\frac{n_{R'}(+) + 1 - n_{R'}(+)}{2} \right] \\ & + n_R(+) \left[\frac{n_{R'}(-) + 1 - n_{R'}(-)}{2} \right] \\ & = \frac{1}{2} [1 - 2S_z(R)2S_z(R')] \quad (\text{B. 7}) \end{aligned}$$

Do segundo e o terceiro termo temos

$$\begin{aligned} & \alpha_{n_\uparrow}^*(R')\alpha_{n_\uparrow}(R)\alpha_{n_\downarrow}^*(R)\alpha_{n_\downarrow}(R') \\ & + \alpha_{n_\downarrow}^*(R')\alpha_{n_\downarrow}(R)\alpha_{n_\uparrow}^*(R)\alpha_{n_\uparrow}(R') \\ & = -[S_x(R) - iS_y(R)][S_x(R') + iS_y(R')] - [S_x(R) + iS_y(R)][S_x(R') - iS_y(R')] \\ & = -2S_x(R)S_x(R') - 2S_y(R)S_y(R') \quad (\text{B. 8}) \end{aligned}$$

Juntando os resultados acima na equação (B. 10) encontramos que o método perturbativo até segunda ordem fornece para os termos b^2

$$\Delta\varepsilon_{b^2}^{(2)} = cte + \sum_{R \neq R'} 2 \frac{|b_{R-R'}|^2}{U} \vec{S}(R) \cdot \vec{S}(R')$$

ou seja, obtemos o acoplamento isotrópico de supertroca, pois estamos trabalhando

Apêndice B: Dedução da Interação de Dzyaloshinskii-Moriya

com materiais cujas bandas não se superpõem. Esta expressão pode ser reescrita na forma de uma interação de troca

$$\Delta\varepsilon_{b^2}^{(2)} = cte + \sum_{R \neq R'} J_{R,R'} \vec{S}(R) \cdot \vec{S}(R') \quad (\text{B. 9})$$

Vejamos o próximo termo na perturbação em segunda ordem da energia.

Contribuição dos termos bc

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon_{bC}^{(2)} = & \frac{b_{R-R'} C_{R'-R}^z}{U} \left[\alpha_{n\uparrow}^*(R') \alpha_{n\uparrow}(R) + \alpha_{n\downarrow}^*(R') \alpha_{n\downarrow}(R) \right] \\ & \left[\alpha_{n\uparrow}^*(R) \alpha_{n\uparrow}(R') - \alpha_{n\downarrow}^*(R) \alpha_{n\downarrow}(R') \right] \\ & + \frac{b_{R-R'} C_{R'-R}^x}{U} \left[\alpha_{n\uparrow}^*(R') \alpha_{n\uparrow}(R) + \alpha_{n\downarrow}^*(R') \alpha_{n\downarrow}(R) \right] \\ & \left[\alpha_{n\uparrow}^*(R) \alpha_{n\uparrow}(R') + \alpha_{n\downarrow}^*(R) \alpha_{n\downarrow}(R') \right] \\ & - i \frac{b_{R-R'} C_{R'-R}^y}{U} \left[\alpha_{n\uparrow}^*(R') \alpha_{n\uparrow}(R) + \alpha_{n\downarrow}^*(R') \alpha_{n\downarrow}(R) \right] \\ & \left[-\alpha_{n\uparrow}^*(R) \alpha_{n\uparrow}(R') + \alpha_{n\downarrow}^*(R) \alpha_{n\downarrow}(R') \right] + \text{termos } C(R-R')b(R'-R) \quad (\text{B. 10}) \end{aligned}$$

Analogamente ao que foi feito para os termos b^2 , temos que

$$\Delta\varepsilon_{bC}^{(2)} = \sum_{R \neq R'} 2i \frac{b(R-R') \vec{C}(R'-R) - \vec{C}(R-R') b(R'-R)}{U} \cdot \vec{S}(R) \times \vec{S}(R') \quad (\text{B. 11})$$

Assim

$$\Delta\varepsilon_{bC}^2 = \sum_{R \neq R'} \vec{D}_{R,R'}^{(2)} \cdot \vec{S}(R) \times \vec{S}(R') \quad (\text{B. 12})$$

com

$$\vec{D}_{R-R'}^{(2)} = \frac{2i}{U} \left[b_{nn'}(R-R') \vec{C}_{n'n}(R'-R) - \vec{C}_{nn'}(R-R') b_{n'n}(R'-R) \right] \quad (\text{B. 13})$$

Apêndice B: Dedução da Interação de Dzyaloshinskii-Moriya

Como um todo, para interações entre spins em R e R' temos

$$\varepsilon_{R,R'(2)} = J_{R,R'(2)} S(\vec{R}) \cdot S(\vec{R}') + \vec{D}_{R,R'(2)} \cdot [S(\vec{R}) \times S(\vec{R}')] + S(\vec{R}) \cdot \Gamma_{R,R'(2)} \cdot S(\vec{R}') \quad (\text{B. 14})$$

onde o último termo corresponde às interações pseudo-dipolares e são muito menores que as anteriores, onde

$$\Gamma_{R,R'(2)} = \frac{4i}{U} \left[C_{n,n'}(R - R') C_{n',n}(\vec{R} - R') - C_{n,n'}(\vec{R} - R') C_{n',n}(R - R') \right] \quad (\text{B. 15})$$

A integral de transferência b e C foram calculadas por Moriya [54] usando um método de perturbação. Assumindo que a separação do nível orbital do íon é maior que o acoplamento spin-órbita, até primeira ordem, estes termos são dados por:

$$\vec{C}(R - R') = \frac{1}{2} \lambda \left\{ \sum_{m'} \frac{\vec{I}_{m'n'}^*(R')}{\epsilon_{m'}(R') - \epsilon_{n'}(R')} b_{m'n}(R' - R) + \sum_m \frac{\vec{I}_{mn}(R)}{\epsilon_m(R) - \epsilon_n(R)} b_{n'm}(R' - R) + \vec{c}(R' - R) \right\} \quad (\text{B. 16})$$

onde n' , n representam o orbital fundamental e m' , m o orbital excitado, $\vec{I}_{mn}(R)$ é o elemento de matriz do momento angular orbital do íon em R , λ é a constante de acoplamento spin-órbita e

$$\vec{c}(R' - R) = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \int \phi_{n'}^*(r - R') \left[\vec{\nabla} V(r) \times \vec{p} \right] \phi_n(r - R) d\vec{r} \quad (\text{B. 17})$$

sendo $\phi_n(r - R)$ a função de onda do orbital fundamental.

Todos os termos tratados que são lineares no acoplamento spin-órbita têm a forma da expressão (??), mas este acoplamento desaparece quando o cristal tem alta simetria. Por exemplo se houver dois íons magnéticos na célula unitária e um centro de inversão localizado no meio do caminho entre eles, o acoplamento desaparece.

Referências Bibliográficas

- [1] T. H. R. Skyrme. “*A unified field theory of mesons and baryons*”. Nuclear Physics. **31**, 556-569 (1962)
- [2] U. K. Röβler, A. N. Bogdanov e C. Pfleiderer. “*Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals*”. Nature. “**442**, 797-801 (2006)
- [3] A. A. Belavin e A. Polyakov. “*Metastable states of two dimensional isotropic ferromagnets*”. JETP Letters. “**22**, 245-247 (1975)
- [4] Dung-Hai Lee e C. L. Chane. “*Boson-Vortex-Skyrmion duality, spin-singlet fractional quantum Hall effect and spin-1/2 anyon superconductivity*”. Phy. Rev. Lett. **64**, 12, 1313-1317, Mar (1990)
- [5] L. S. Leslie **et al.** “*Creation and Detection of Skyrmions in a Bose-Einstein Condensate*”. Phys. Rev. Lett. 103, 250401 (2009)
- [6] T. Kawakami, T. Mizushima, M. Nitta e K. Machida. “**Stable skyrmions in SU(2) gauged Bose-Einstein condensates**”. Phys. Rev. Lett. **109**, 015301 (2012)
- [7] J. Choi **et al.** “*Imprinting skyrmion spin textures in spinor Bose-Einstein condensates*”. New J. Phys. **14**, 053013 (2012)
- [8] Al Khawaja e H. Stoof. “*Skyrmions in a ferromagnetic Bose-Einstein condensate*”. Nature **411**, 918–920 (2001)
- [9] R. A. Battye, N. R. Cooper e P. M. Sutcliffe. “*Stable Skyrmions in Two-Component Bose-Einstein Condensates*”. Phys. Rev. Lett. **88**, 080401 (2002)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [10] C. M. Savage e J. Ruostekoski. “*Energetically stable particlelike skyrmions in a trapped Bose-Einstein condensate*”. Phys Rev Lett. **91**, 1, 010403 Jul (2003)
- [11] J-y. Choi, W. J. Kwon e Y-I. Shin. “*Observation of topologically stable 2D Skyrmions in an antiferromagnetic spinor Bose-Einstein condensate*”. Phys. Rev. Lett. **108**, 035301 Jan (2012)
- [12] M. Kanász-Nagy, B. Dóra, E. A. Demler e G. Zaránd. “*Stabilizing the false vacuum: Mott skyrmions*”. Scientific Reports **5**, 7692 (2015)
- [13] A. N. Bogdanov, U. K. Röβler e A. A. Shestakov. “*Skyrmions in nematic liquid crystals*”. Phys. rev. E, **67**, 016602 (2003)
- [14] P. W. Anderson e G. Toulouse. “*Phase slippage without vortex cores: vortex textures in superfluid ^3He* ”. Phys. Rev. Lett. **38**, 9, 508-511, Feb (1977)
- [15] G. Yin, Y. Liu, Y. Barlas, J. Zang e R. K. Lake. “*Topological spin Hall effect resulting from magnetic skyrmions*”. Phys. Rev. B **92**, 024411, Jul (2015)
- [16] S. C. Zhang, T. H. Hanson e S. Kivelson. “*Effective-Field-Theory Model for the Fractional Quantum Hall Effect*”. Phys. Rev. Lett. **62**, 1, 82-85, Jan (1989)
- [17] S. Yi, S. Onoda, N. Nagaosa e J. H. Han. “*Skyrmions and anomalous Hall effect in a Dzyaloshinskii-Moriya spiral magnet*”. Phys. Rev. B **80**, 054416, Aug (2009)
- [18] T. Garel e S. Doniach. “*Phase transitions with spontaneous modulation - the dipolar Ising ferromagnet*”. Phys. Re. B **26**, 325-329 (1982)
- [19] I. Dzyaloshinskii. “*A thermodynamic theory of weak ferromagnetism of antiferromagnetics*”. J. Phys. Chem. Solids. **4**, 241-255 (1958)
- [20] T. Okubo, S. Chung e H. Kawamura. “*Multiple-q States and the Skyrmion Lattice of the Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet under Magnetic Fields*”. Phys. Rev. Lett. **108**, 017206 (2012)
- [21] S. Heinze. **et al.** “*Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions*”. Nature Physics **7**, 713-718 (2011)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [22] N. Nagaosa e Y. Tokura. “*Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions*”. Nat. Nanotechnology. **8**, 899-911 Dec (2013)
- [23] O. Nakanishi. **et al.** “*The origin of helical spin density wave in MnSi*”. Solid State Comm. **35**, 995-998 (1980)
- [24] A. N. Bogdanov e D. A. Yablonskii. “*Thermodynamically stable ”vortices” in magnetically ordered crystals. The mixed state of magnets*”. Sov. Phys. JETP. “**68**, 1, 101-103, Jan (1989)
- [25] A. Fert, V. Cros e J. Sampaio. “*Skyrmions on the track*”. Nature Nanotechnology. **8**, 152-156 Mar (2013)
- [26] V. E. Dmitrienko **et al.** “*Measuring Dzyaloshinskii-Moriya interaction in a weak ferromagnet*”. Nat. Physics. **10**, 202-206, Mar (2014)
- [27] D. Lamago **et al.** “*Magnetic-field induced instability surrounding the A-phase of MnSi: Bulk and SANS measurements*”. Physica **B**, 38-387 (2006)
- [28] S. M. Stishov **et al.** “*Magnetic phase transition in the itinerant helimagnet MnSi: Thermodynamic and transport properties*”. Phys. Rev. B. **76**, 5, 052405, Aug (2007)
- [29] W. Münzer **et al.** “*Skyrmion lattice in the doped semiconductor $Fe_{1-x}Co_xSi$* ”. Phys. Rev. B **81**, 041203 (2010)
- [30] M. Uchida, Y. Onose, Y. Matsui e Y. Tokura. “*Real-space observation of helical spin order*”. Science **311**, 359-361 (2006)
- [31] S. Mühlbauer **et al.** “*Skyrmion Lattice in a Chiral Magnet*”. Science **323**, 915 (2009)
- [32] S. Buhrandt e L. Fritz. “*The skyrmion lattice phase in three dimensional chiral magnets from Monte Carlo simulations*”. Phys. Rev. B **88**, 195137, Nov (2013)
- [33] X. Z. Yu **et al.** “*Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal*”. Nat. Lett. **465**, 17, 901-904, Jun (2010)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [34] J. H. Han **et al.** “*Skyrmion lattice in a two-dimensional chiral magnet*”. Phys. Rev. B **82**, 094429 (2010)
- [35] X. Z. Yu **et al.** “*Near room—temperature formation of a skyrmion crystal in thin-films of the helimagnet FeGe*”. Nature Materials, “**10**, 106-109, Feb (2011)
- [36] N. Nagaosa e W. Koshibae. “*Creation of skyrmions and antiskyrmions by local heating*”. Nat. Commun. **5**, 5148 Out (2014). Doi: 10.1038/ncomms6148
- [37] X. Z. Yu **et al.** “*Skyrmion flow near room temperature in an ultralow current density*”. Nat. Commun. **3**, 998 (2012)
- [38] J. Iwasaki, M. Mochizuki e N. Nagaosa. “*Universal current-velocity relation of skyrmion motion in chiral magnets*”. Nat. Commun. “**4**, 1463, Feb (2013).
- [39] J. Sampaio **et al.** “*Nucleation, stability and current-induced motion of isolated magnetic skyrmions in nanostructures*”. Nature Nanotechnology. **8**, 839-844, Nov (2013)
- [40] F. Jonietz. **et al.** “*Spin transfer torque in MnSi at ultra-low current densities*”. Science **330**, 6011, 1648-51. Dec (2010)
- [41] V. V. Mazurenko e V. I. Anisimov. “*Weak ferromagnetism in antiferromagnets: $\alpha - Fe_2O_3$ and La_2CuO_4* ”. Phys. Rev. B **71**, 184434 (2005)
- [42] T. Kimura. “*Spiral Magnets as Magnetoelectrics*”. Annu. Rev. Mater. Res. **37**, 387–413 (2007)
- [43] J. J. Sakurai, J. Napolitano “*Mecânica Quântica Moderna*”, Bookman, Porto Alegre, Segunda Edição (2013)
- [44] N. W. Ashcroft, N. D. Mermim “*Solid State Physics*”, Harcourt, (1976)
- [45] D. J. Griffiths, “*Mecânica Quântica*”, Pearson Prentice Hall, São Paulo, (2011)
- [46] A. Aharoni, “*Introduction to the Theory of Ferromagnetism*”, Oxford Science Publications, Second Edition (1999)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [47] M. Getzlaff, “*Fundamentals of Magnetism*”, Springer-Verlag, Berlin (2008)
- [48] L. M. da Costa; “*O Modelo DE Ising 2D*”; USP, São Paulo (2012)
- [49] N. A. Spaldin, “*Magnetic Materials: Fundamentals and Applications*”; Cambridge University Press, New York (2010)
- [50] C. Kittel. “*Introduction to Solid State Physics*”, John Wiley Sons, 14th Edition (2005)
- [51] E. Brézin; “*Introduction to Statistical Field Theory*”; Cambridge University Press, New York (2010)
- [52] E. Pavarini, E. Koch, F. Anders e M. Jarrell. *Correlated Electrons: From Models to Materials Modeling and Simulation*. Vol. 2 Verlag des Forschungszentrum Jülich, (2012)
- [53] P. W. Anderson. “*New approach to the theory of superexchange interactions*”. Phys. Rev. **115**, 2 (1959)
- [54] T. Moriya. “*New mechanism of anisotropic superexchange interaction*”. Phys. Rev. **1**, **120**, 91-98, Oct (1960)
- [55] T. Moriya. “*Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism*”. Phys. Rev. **1**, **120**, 91-98, Oct (1960)
- [56] R. Janoschek. “*Chirality - From Weak Bosons to the α -Helix*”. Springer-Verlag, New York (1991)
- [57] M. Lezaic. “*Applications of Multiferroics: from elementary Particles to new Memory Devices*”. Inside, **9**, 1 (2011)
- [58] J. M. Hopkinson e H. Kee. “*Origin and consequences of unpinned helical order: Application to MnSi under pressure*”. Phys. Rev. B, **t79**, 014421 (2009)
- [59] P. M. Levy e A. Fert. “*Role of anisotropic exchange interactions in determining the properties of spin-glasses*”. Phys. Rev. Lett. **44**, 23, 1538-1541, Jun (1981)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [60] P. M. Levy e A. Fert. “*Anisotropy induced by nonmagnetic impurities in Cu Mn spin-glass alloys*”. Phys. Rev. B **23**, 4667-4690, May (1981)
- [61] M. C. Ambrose e R. L. Stamps. “*Melting of hexagonal Skyrmion states in chiral magnets*. New Journal of Physics. **15**, 5, 053003 (2013)
- [62] R.L. Silva *et al.* “*Emergence of skyrmion lattices and bimerons in chiral magnetic thin films with nonmagnetic impurities*”. Phys. Rev. B. **89**, 54434 (2014)
- [63] R. Rajaraman. “*Solitons and Instantons: An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory*”. North-Holland Publishing Company. Amsterdam (1982)
- [64] Y. Yang. “*Solitons in field theory and nonlinear analysis*”. Springer-Verlag. New York (2001)
- [65] A. Bogdanov e A. Hubert. “*The stability of vortex-like structures in uniaxial ferromagnets*”. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **195**, 182-192 (1999)
- [66] I. Kézsmárki *et al.* “*Néel-type skyrmion lattice with confined orientation in the polar magnetic semiconductor GaV₄S₈*”. Nature Material, **14**, 1116-1122 (2015)
- [67] Y. S. Lin, P. J. Grundy e E. A. Giess. Bubble domains in magnetostatically coupled garnet films. Applied Physics Letters, **23**, 8, 485–487 (1973)
- [68] A. Abanov e V. L. Pokrovsky, “*Skyrmion in a real magnetic film*”. Phys. Rev. B **58**, 14, R8889–R8892 (1998)
- [69] A. Rosch. “*Extra twist in magnetic bubbles*”. Proceedings of the National Academy of Sciences, **109**, 23, 8793–8794 (2012)
- [70] P. Bak e M. H. Jensen. “*Theory of helical magnetic structures and phase transitions in MnSi and FeGe*”. J. Phys. C: Solid State Phys. **13** L881 (1980)
- [71] C. Pfleiderer. “*Skyrmion lattices in metallic and semiconducting B20 transition metal compounds*”. J. Phys.:Condens. Matter **22**, 164207 (2010).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [72] J. Seidel. *Topological structures in ferroic materials: domain walls, vortices and skyrmions*. Springer, Switzerland (2016)
- [73] A. Neubauer *et al.* “Topological Hall Effect in the A Phase of MnSi”. Phys. Rev. Lett. **102**, 186602 (2009)
- [74] S. Seki e M. Mochisuki. “*Skyrmions in magnetic materials*”. Springer, New York (2016)
- [75] S. Brazovskii. “Phase transition of an isotropic system to a nonuniform state”. Sov. Phys. JETP, **41**, 1, 85-89 (1975)
- [76] M. Janoschek *et al.* “Fluctuation-induced first-order phase transition in Dzyaloshinskii-Moriya helimagnets. Phys. Rev. B **87**, 134407 (2013)
- [77] K. Everschor-Sitte e M. Sitte. “Real-space Berry phases: Skyrmion soccer (invited)”. Journal of Applied Physics. **115**, 172602 (2014)
- [78] M. Lee, W. Kang, Y. Onose, Y. Tokura e N. P. Ong. “Unusual Hall Effect Anomaly in MnSi under Pressure”. Phys. Rev. Lett. **102**, 186601 (2009)
- [79] K. Everschor *et al.* “Rotating skyrmion lattices by spin torques and field or temperature gradients”. Phys. Rev. B **86**, 054432 (2012)
- [80] J. M. Yeomans. “Statistical Mechanics of Phase Transitions”. Oxford University Press, 1st Edition, New York (1992)
- [81] D. P. Landau e K. Binder. “A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics”. Cambridge (2005)
- [82] S. R. A. Salinas. “Introdução a Física Estatística”, Ed. da Universidade de São Paulo, São Paulo (1999)
- [83] R. K. Pathria e P. D. Beale. “Statistical Mechanics”. Elsevier. Third Edition (2011)
- [84] M. Ezawa. “Compact merons and skyrmions in thin chiral magnetic films”. Phys. Rev. B, **83**, 100408 (2011)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [85] S. A. Brazovskii, I. E. Dzyaloshinskii e B. G. Kukharev. “*First-order magnetic phase transitions and fluctuations*”. Sov. Phys. JETP, **43**, 6, 1178-1183, June (1976)
- [86] T. L. Gilbert. “*A Phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials*”. IEEE Transactions on magnetics, **40**, 6, 3443-3449, Nov (2004)
- [87] L. Landau e E. Lifshitz. “*ON the theory of dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies*”. Phys. Zeitsch. der Sow. 8, pp. 153–169 (1935)
- [88] Ya. B. Bazaliy, B. A. Jones e Shou-Cheng Zhang. “*Modification of the Landau-Lifshitz equation in the presence of a spin-polarized current in colossal- and giant-magnetoresistive materials*”. Phys. Rev. B, **57**, 6, 3213 (1998)
- [89] J. Zang, M. Mostovoy, J. H. Han e N. Nagaosa. “*Dynamics of Skyrmion Crystals in Metallic Thin Films*”. Phys. Rev. Lett. **107**, 136804 (2011)
- [90] L. E. Ballentine. “*Quantum Mechanics, A Modern Developmen*”. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2000)