

RODRIGO DA COSTA SILVA

CONTRIBUIÇÕES AO ESTUDO DE SISTEMAS
MAGNÉTICOS FRUSTRADOS: EFEITOS
TERMODINÂMICOS E DE DEFEITOS ESTRUTURAIS
EM GELOS DE SPIN ARTIFICIAIS

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

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2014

**Ficha catalográfica preparada pela Seção de Catalogação e
Classificação da Biblioteca Central da UFV**

T

S586c
2014

Silva, Rodrigo da Costa, 1987-
Contribuições ao estudo de sistemas magnéticos frustrados :
efeitos termodinâmicos e de defeitos estruturais em gelos de spin
artificiais / Rodrigo da Costa Silva. – Viçosa, MG, 2014.
xii, 107f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Inclui apêndices.

Orientador: Afrânio Rodrigues Pereira.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f.95-107.

1. Monopoles magnéticos. 2. Frustração geométrica.
3. Nanomagnetismo. 4. Gelos de spin. I. Universidade Federal de
Viçosa. Departamento de Física. Programa de Pós-graduação em
Física. II. Título.

CDD 22. ed. 530.141

RODRIGO DA COSTA SILVA

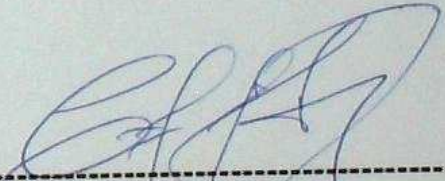
CONTRIBUIÇÕES AO ESTUDO DE SISTEMAS MAGNÉTICOS FRUSTRADOS:
EFEITOS TERMODINÂMICOS E DE DEFEITOS ESTRUTURAIS EM GELOS
DE SPIN ARTIFICIAIS

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

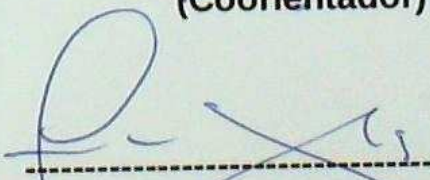
APROVADA: 18 de março de 2014.



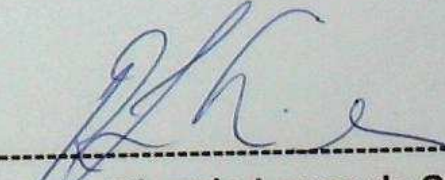
Winder Alexander de M. Melo
(Coorientador)



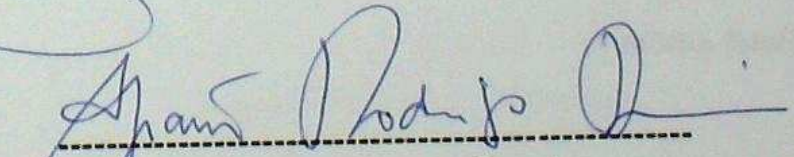
Clodoaldo Irineu L. Araújo



Flávio Garcia



Ricardo Lopes da Silva



Afrânio Rodrigues Pereira
(Orientador)

À minha família e meus amigos.

“There is Plenty of Room at the Bottom.”

Richard Feynman (1918-1988)

AGRADECIMENTOS

A toda minha família que sempre me apoiou e torceu durante toda essa caminhada.

A minha companheira e amiga Raniella e meu amado filho Arthur, que suportaram pacientemente as longas horas de ausência de um esposo/ pai que estava em casa, mas quase nunca com tempo para eles e, mesmo assim, nunca deixaram de incentivar, torcer e vibrar comigo. Esta conquista não seria possível sem vocês.

Ao professor Afranio pela excelente orientação, apoio, incentivo, paciência, humildade e oportunidades dadas durante o doutorado. Por mostrar novas maneiras de se enxergar a Natureza e pelas inúmeras discussões e conversas excepcionais.

Aos meus co-orientadores, professores Lucas A. S. Mól e Winder A. Moura Melo por suas contribuições dadas para a realização deste trabalho.

Aos professores do departamento de Física pelas discussões, trabalhos, troca de idéias e cursos.

Aos colegas da pós-graduação, em especial à turma da sala 212, pelas conversas, almoços, pela ajuda para entendermos física, pelos ótimos momentos de descontração e boa convivência durante todos estes anos.

A todos amigos (tanto os que sempre estiveram em Viçosa quanto os que tiveram que partir) que, por medo de me esquecer de algum, prefiro não citar nomes.

Aos secretários do departamento de Física da UFV.

A todos os funcionários da UFV que, direta e indiretamente, me auxiliaram.

A Universidade Federal de Viçosa.

Ao CNPq, FAPEMIG e CAPES pelo apoio financeiro.

A todos, meus mais sinceros agradecimentos.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	viii
RESUMO	ix
ABSTRACT	xi
1 Introdução	1
2 Considerações Gerais sobre Magnetismo	6
2.1 Nanomagnetismo	6
2.2 Interação de Troca e o hamiltoniano de Heisenberg	7
2.3 Interação Dipolar	11
2.4 Anisotropia de Forma	12
2.5 Superparamagnetismo	14
3 Gelos de Spin	16
3.1 Frustração Geométrica	16
3.2 Rede piroclórica ou tetraédrica	18
3.3 A frustração no gelo da água	19
3.4 Gelos de Spin cristalinos	21
3.5 Gelos de Spin Artificiais	25
3.5.1 Gelos de spin na geometria quadrada	27
3.5.2 Protocolos de Desmagnetização e Estado Fundamental	29
3.5.3 Monopolos Magnéticos em gelos de spin na rede quadrada	34

4	Métodos Numéricos	41
4.1	O Método de Monte Carlo	41
4.1.1	Análise de dados e Medidas termodinâmicas	45
4.2	Técnicas de Repesagem ou Histograma	47
4.3	Soma de Ewald	49
4.4	Problemas de Atribuição	52
4.4.1	Método Húngaro	53
5	Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais	57
5.1	Modelo	57
5.2	Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais	58
6	Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais	68
	Conclusões e Perspectivas	81
A	Processos de Fabricação e Caracterização dos Gelos de Spin Artificiais	84
B	Dedução da Soma de Ewald em duas dimensões	88
B.1	Transformada de Fourier para soma de Ewald	91
C	Lista de Trabalhos	94
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	95

LISTA DE FIGURAS

3.1	Rede de spins acoplados antiferromagneticamente.	16
3.2	Degenerescência do estado fundamental na rede triangular	17
3.3	Estrutura pirocloro.	18
3.4	Spins arranjados sobre dois tetraedros adjacentes.	21
3.5	Estados excitados do gelo de spin cristalino.	24
3.6	Gelo de spin artificial.	28
3.7	Configurações favoráveis e desfavoráveis entre pares de spin nos GSA.	28
3.8	Configurações possíveis de spins sobre um vértice.	29
3.9	Estatística da percentagem dos diferentes tipos de configurações como função do parâmetro de rede.	30
3.10	Protocolos de desmagnetização.	31
3.11	Magnetização remanente total versus parâmetro de rede.	32
3.12	Transição entre os vértices $T_2 \rightarrow T_1$	32
3.13	Configurações do GSA com diferentes bordas.	33
3.14	Estado fundamental e primeiro estado excitado do GSA.	34
3.15	Processo de separação de cargas nos GSA.	35
3.16	Potencial de interação de cargas.	36
3.17	Observação experimental dos GSA na rede quadrada.	39
3.18	Imagens de MFM das monopolos magnéticos observadas no GSA.	40
4.1	Inversão de um <i>loop</i> fechado de spins.	44
4.2	Termalização da energia e magnetização.	46
4.3	Distribuição de probabilidade $P(E)$ como função da energia.	49

4.4	Problemas de atribuição.	53
5.1	Calor específico versus temperatura.	59
5.2	C_{max} como função do tamanho da rede (L).	60
5.3	Densidade de monopolos versus temperatura.	61
5.4	r_M versus temperatura.	62
5.5	d_{max} versus tamanho do sistema.	63
5.6	Distribuição de separação de cargas como função da separação média.	64
5.7	Configurações particulares em temperaturas diferentes.	65
6.1	Imagem de MEV de uma amostra de GSA.	69
6.2	Estado fundamental para uma rede com defeito estrutural.	70
6.3	Processo de separação de cargas em uma rede com um defeito estrutural.	71
6.4	Potencial de interação entre um par de cargas numa rede com defeito.	72
6.5	Δ versus r para $\delta = 5a$	73
6.6	K_1 versus tamanho do momento de dipolo da ilha defeituosa.	75
6.7	Mudança de posição das cargas induzidas pelo defeito estrutural.	76
6.8	Δ versus r para $\delta = 1a$	77
6.9	Processo de movimento de um loop 4O ao longo do sistema.	78
6.10	Potencial de interação entre o loop 4O e as cargas induzidas.	78
6.11	K_2 versus δ	79
A.1	Esquema do processo de fabricação de nanopartículas por EBL.	85
A.2	Imagens feitas por MEV de amostras de GSA.	86

RESUMO

SILVA, Rodrigo da Costa, D. Sc., Universidade Federal de Viçosa, março de 2014
Contribuições ao estudo de sistemas magnéticos frustrados: efeitos termodinâmicos e de defeitos estruturais em gelos de spin artificiais. Orientador: Afranio Rodrigues Pereira. Coorientadores: Lucas Alvares de Silva Mól e Winder Alexander de Moura Melo.

Nesta tese são estudados efeitos termodinâmicos e de defeitos estruturais nos materiais conhecidos como gelos de spin artificiais, por meio de simulações computacionais em redes quadradas. No caso da termodinâmica, damos ênfase aos efeitos da temperatura sobre as excitações elementares: os monopolos magnéticos de Nambu e suas cordas. Usando técnicas de Monte Carlo foram obtidas quantidades termodinâmicas como calor específico, densidade de cargas e a separação média entre pares de carga como função da temperatura. Nossos cálculos mostram que o calor específico e a separação média entre pares de cargas exibem, respectivamente, um pico acentuado e um máximo global na mesma temperatura $T_c \approx 7,2 D/k_B$, em que D é a constante de interação dipolar e k_B a constante de Boltzmann. Analisando a dependência dessas quantidades com o tamanho do sistema verificamos um crescimento logarítmico das amplitudes máximas do calor específico, C_{\max} , e da separação média entre pares, d_{\max} , com o aumento do tamanho do sistema. Dessa forma, nossos resultados indicam que monopolos completamente isolados seriam encontrados apenas no limite termodinâmico. Entretanto, os resultados também sugerem que para temperaturas $T \geq T_c$, o sistema exibe uma fase com monopolos separados, apesar de d_{\max} não ser maior que poucos parâmetros de rede para sistemas reais. Na segunda parte desta tese, nós estudamos o caso em que a rede é construída com um defeito estrutural como, por exemplo, uma ilha deformada. Isto

é feito considerando um arranjo quadrado de nanoilhas contendo apenas uma única ilha diferente das demais. Esta diferença é incorporada no momento magnético (spin) da ilha defeituosa, sendo muitos casos estudados, inclusive o caso especial no qual a ilha está ausente (vacância). Nós mostramos que sobre os vértices adjacentes da nanoilha “malformada” existe um par de cargas magnéticas opostas. Também obtivemos o potencial interação efetivo entre as excitações elementares (um par de monopolos de Nambu e suas cordas) com a ilha defeituosa, sendo um problema envolvendo quatro cargas magnéticas (dois pares de polos opostos) e uma corda.

ABSTRACT

SILVA, Rodrigo da Costa, D. Sc., Universidade Federal de Viçosa, March, 2014
Contributions to the study of frustrated magnetic systems: thermodynamics and structural defects effects in artificial spin ice. Adviser: Afranio Rodrigues Pereira. Co-advisers: Lucas Alvares de Silva Mól and Winder Alexander Moura Melo.

In this thesis, we study the thermodynamics and structural defects effects in artificial spin ice systems, by mean of computer simulations in square lattices. In the case of thermodynamics, we give emphasis to the effects of temperature on elementary excitations: the Nambu magnetic monopoles and their strings. By using Monte Carlo techniques, we obtain the specific heat, the density of charges and the average separation of a pair of charges as a function of temperature. Our calculations show that the specific heat and average separation of a pair of charges exhibit a sharp peak and global maximum, respectively, at the same temperature $T_c = 7,2D/k_B$, where D is the strength of the dipolar interaction and k_B is the Boltzmann constant. Analysing the dependence of these quantities with the size of the system, we verify a logarithmic growth of the maximum amplitude of the specific heat, C_{\max} and the avarege separation, d_{\max} , with the increasing of system's size. Then, our results suggest that completely isolated charges could be found only at thermodynamic limit. However, for temperatures $T \geq T_c$ the system exhibits a phase with separated monopoles despite of the maximun separation, d_{\max} , not exceed a few lattice spacings for viable artificial materials. In the second part of this thesis, we study the case where the lattice is building with a structural defect such as a defective island. This is done by considering a square array of islands containing only one island different from all others. This difference is incorporated in

the magnetic moment (spin) of the “imperfect” island and several cases are studied, including the special situation in which this distinct spin is zero (vacancy). We show that the two extreme points of a defective island behave like two opposite magnetic charges. Then, the effective interaction between the elementary excitations (a pair of Nambu monopoles and their string) with the defective island is a problem involving four magnetic charges (two pairs of opposite poles) and a string.

Capítulo 1

Introdução

Nos últimos anos a Física da Matéria Condensada (FMC) tornou-se um dos ramos mais promissores da Física. Com o notável desenvolvimento da nanofísica e nanotecnologia, em geral, a possibilidade de elaboração de novos materiais juntamente com a capacidade de construir de forma controlada estruturas em escala nanométrica vêm tornando-se sempre mais ampla. De fato, inúmeros avanços científicos e tecnológicos foram obtidos no estudo desses materiais e suas propriedades. Algumas vezes, esses sistemas possuem uma série de resultados muito interessantes, evidenciando uma maior proximidade, muitas vezes inesperadas, com outras áreas da Física como, por exemplo, o Modelo Padrão da Física de Partículas e seus desdobramentos.

Na pesquisa de novos materiais destacam-se o grafeno, um arranjo bidimensional de átomos de carbono, cujas características prometem revolucionar a eletrônica, possibilitando desde processadores informáticos mais rápidos a uma forma mais eficiente de conduzir o calor. Os metamateriais que representam uma mudança de paradigma no desenvolvimento tecnológico, afirmando-se cada vez mais como candidatos às próximas revoluções óptico-eletrônicas. Os gelos de spin, que foram estudados nessa tese, são sistemas em que se observa corrente de cargas magnéticas, abrindo portas para o desenvolvimento da *magnetronica* - tecnologia operando com correntes magnéticas. Pode-se destacar ainda os isolantes topológicos, materiais com a interessante propriedade de se comportarem como isolantes em seu interior e condutores em sua superfície, possuindo uma enorme aplicabilidade em eletrônica.

1. Introdução

No estudo desses novos sistemas conceitos como emergência, fracionalização e frustração geométrica tornaram-se muito importantes na descrição de suas propriedades. Enquanto num ponto de vista reducionista o interesse encontra-se nos constituintes fundamentais do sistema, numa visão ligada ao conceito de emergência o destaque é dado aos fenômenos coletivos. Como consequência observa-se que as leis que governam fenômenos em “larga-escala” são, em geral, diferentes das leis que governam os entes fundamentais. É como se o grande número de constituintes e suas interações conspirassem para o aparecimento de quasi-partículas que, em alguns casos, muito se assemelham aos constituintes fundamentais do material. De fato, muitos tipos de quasi-partículas são encontradas em modelos de FMC, incluindo fônons (ondas vibracionais em sólidos ou superfluidos) e mágnons (ondas de spin) em sistemas magnéticos [1]. Há também diversas excitações topológicas que se comportam como partículas, como são o caso de vórtices [2,3] (em materiais magnéticos bidimensionais, superfluidos e supercondutores), skyrmions e sólitons [4], etc. Como, em geral, essas quasi-partículas não estão presentes na hamiltoniana que descreve o sistema fala-se, portanto, que elas são *emergentes*.

Por outro lado, o surgimento destas excitações coletivas pode dar origem ao fenômeno de fracionalização. A ocorrência da fracionalização reside no fato de que, em alguns sistemas, surgem quasi-partículas que carregam apenas uma fração das propriedades de seus constituintes fundamentais (átomos e elétrons). Estes fenômenos são muito comuns em sistemas unidimensionais e estão, em geral, ligados a defeitos topológicos [5]. Um exemplo interessante é o comportamento de elétrons em um nanofio (como um sistema unidimensional). Neste caso, o elétron se comporta como uma partícula divisível, sendo “quebrado” em spinons e holons. O spinon é uma quasi-partícula de carga nula que carrega o spin do elétron e o holon é uma quasi-partícula que carrega apenas a carga do elétron. Este efeito de fracionalização ocorre quando um grande número de elétrons estão competindo por um espaço não muito grande [6]. Em duas dimensões espaciais, o único caso confirmado de fracionalização é o aparecimento de quasi-partículas com um terço da carga do elétron no efeito Hall quântico fracionário em grandes campos magnéticos [7–9].

1. Introdução

Efeitos muito interessantes também surgem em sistemas sujeitos à frustração geométrica. Este fenômeno ocorre quando, devido a efeitos de natureza geométrica, as interações entre pares não podem ser minimizadas simultaneamente para todos constituintes do sistema. No caso de materiais magnéticos, o avanço da nanotecnologia em litografia, microscopia em escala atômica e crescimento de filmes finos vêm nos ofertando a possibilidade de construir sistemas frustrados artificiais. Esse campo tem sido chamado de *magnetismo artificialmente frustrado*, tendo seu enfoque inicial sobre a física de sistemas com interações competitivas. Ele abriu uma nova janela para uma melhor compreensão do comportamento coletivo, manifestado em propriedades termodinâmicas e dinâmicas do sistema, tanto dentro como principalmente fora do equilíbrio. Sistemas que exibem este fenômeno apresentam, em geral, o estado fundamental altamente degenerado [10], transições de fase não convencionais [11,12], correlações de longo alcance na fase de Coulomb [13,14] e dinâmica muito lenta [15,16].

Um material que vem atraindo muita atenção nos últimos anos são os *gelos de spin* (ou “*spin ice*”, na denominação em Inglês). Os gelos de spin são sólidos cristalinos que têm a estrutura do tipo pirocloro. Os exemplos mais comuns são o titanato de hólmio ($H_o_2Ti_2O_7$) e o titanato de disprósio ($Dy_2Ti_2O_7$), sendo estes encontrados na natureza. Esses sistemas estão sujeitos à frustração geométrica, o que abre as portas para o surgimento de interessantes fenômenos, como a observação do primeiro caso de fracionalização em três dimensões espaciais. Em um recente trabalho teórico Castelnovo e colaboradores [17] mostraram que as primeiras excitações que surgem nos gelos de spin acima de seu estado fundamental frustrado se comportam como monopolos magnéticos, uma fração dos dipolos magnéticos que constituem o sistema. Essas quasi-partículas, sob certas condições, podem ser tratadas como um gás de monopolos livres existindo, até mesmo, uma transição de fase, na qual uma camada fina desse gás de monopolos se condensa em um estado líquido. Estas idéias foram confirmadas posteriormente, por um interessante trabalho experimental feito por Bramwell *et al* [18] e, depois por outros estudos experimentais [19–22] que também foram capazes de medir a carga magnética e também a corrente dessas excitações.

Do ponto de vista tecnológico seria de suma importância a possibilidade de

1. Introdução

arquitetar sistemas onde cargas magnéticas isoladas surgissem, e pudessem ter algumas de suas propriedades controladas. Isto abriria as portas para se explorar de forma controlada circuitos baseados em cargas magnéticas ao invés de cargas elétricas, o que vem sendo chamado de *magnetricidade*, podendo resultar em um grande avanço tecnológico. Neste sentido, em um trabalho recente Wang *et al* [23] propuseram a construção de um sistema de nanoilhas magnéticas que em muito se assemelha aos gelos de spin, sendo chamados de *gelos de spin artificiais*. No sistema proposto, nanoilhas de Permalloy (uma liga de níquel e ferro), com uma forma alongada, foram dispostas nas ligações entre os sítios de uma rede quadrada. Devido à forma e ao tamanho das ilhas e à baixa anisotropia do Permalloy, espera-se que estas ilhas alongadas sejam monodomínios que se comportam como um spin tipo Ising, orientados ao longo da direção do eixo maior da ilha. Uma grande vantagem de se trabalhar em um sistema artificial é a possibilidade de construir arranjos nas mais variadas geometrias como kagome [24], brickwork [25], hexagonal [26] além, é claro, da quadrada. Isto possibilita ter o controle direto da simetria e topologia da rede, permitindo uma investigação teórica e experimental dos efeitos da frustração em diferentes geometrias, do nível de desordem nas redes e do tipo de excitações que surgem no sistema.

Inicialmente, esses sistemas artificiais foram construídos apenas com a intenção de imitar o comportamento frustrado dos gelos de spin naturais e corroborar modelos bidimensionais célebres da Mecânica Estatística, os quais forneceriam uma descrição para os novos fenômenos que aparecem nesses materiais. No entanto, o entendimento desses materiais tem exigido conceitos de diversas áreas da Física como a bem conhecida área dos modelos clássicos de spin, sistemas desordenados, meios granulares e micromagnetismo. Refletindo sua natureza interdisciplinar, o estudo dos gelos de spin artificiais tem atraído muitos físicos, químicos e engenheiros de diversas áreas e, o trabalho nesse campo tem evoluído com estreitas ligações entre teoria e experimento.

Os objetivos desse estudo foram: (i) obter algumas propriedades termodinâmicas e (ii) estudar os efeitos da inclusão de defeitos de rede sobre as excitações magnéticas que surgem nos gelos de spin artificiais (GSA) na geometria quadrada, via simulações numéricas.

1. Introdução

No que segue, esta tese se encontra dividida da seguinte forma: no capítulo 2 foi feita uma breve revisão sobre as principais interações e anisotropias magnéticas em materiais magnéticos, que são responsáveis pelas propriedades magnéticas dos GSA. No capítulo 3 foi feita uma revisão dos principais trabalhos existentes na literatura sobre os gelos de spin, sendo abordado, tanto o cristal encontrado na natureza, quanto o sistema artificial. No capítulo 4 foi feita uma descrição das técnicas numéricas utilizadas, necessárias para o estudo computacional desses materiais. Nos capítulos 5 e 6 serão apresentados os resultados obtidos na pesquisa. Por fim, são apresentadas as conclusões e perspectivas do trabalho e três apêndices: no apêndice A é feita uma breve revisão sobre os processos de fabricação e caracterização dos gelos de spin artificiais. No apêndice B são feitas as deduções de algumas expressões importantes, utilizadas no capítulo 4 e, por último, no apêndice C é feita uma lista com os trabalhos publicados e submetidos.

Capítulo 2

Considerações Gerais sobre Magnetismo

Nas seções a seguir, serão feitas revisões sobre as interações magnéticas que ocorrem nos materiais magnéticos macroscópicos, do efeito de anisotropia de forma, e do fenômeno do superparamagnetismo.

2.1 Nanomagnetismo

O nanomagnetismo é a área de pesquisa em Física que trata das propriedades magnéticas dos objetos na escala nanoscópica e mesoscópica. Ele engloba o estudo das propriedades e aplicações do magnetismo de nanopartículas isoladas, nanofios, filmes finos e multicamadas e amostras magnéticas volumosas que incorporam partículas nanoscópicas. Materiais que contêm partículas, filmes e outras estruturas em escala nanoscópica são frequentemente classificados como materiais nanoestruturados. Durante os últimos vinte anos, houve um grande avanço nas técnicas de fabricação de várias estruturas em nanoescala, bem como o desenvolvimento de novas tecnologias capazes de explorar as propriedades físicas desses objetos.

O nanomagnetismo tem muitas aplicações práticas, da geologia à gravação magnética, dos ferrofluidos ao transporte de drogas que podem ser direcionadas a órgãos ou tecidos específicos [27]. Esses materiais podem ser encontrados na natureza ou produzidos artificialmente. Na natureza, o exemplo mais comum é a magnetita

2. Considerações Gerais sobre Magnetismo

(Fe_3O_4), encontradas em bactérias, insetos e alguns animais e servem como sistema de orientação espacial [28]. Por outro lado, quando fabricados artificialmente, as nanoestruturas podem ser modeladas nas mais variadas formas geométricas, sendo que suas propriedades magnéticas são altamente dependentes da sua forma.

Aplicações no âmbito nanométrico requerem alto grau de sofisticação em técnicas experimentais. A evolução tecnológica dessas aplicações foi possível devida ao aperfeiçoamento das técnicas de preparação de amostras em escalas nanométricas, além de técnicas de imagem em alta resolução. A compreensão desses materiais somente é possível entendendo as interações magnéticas e anisotropias que serão apresentadas posteriormente.

O avanço nas técnicas de produção de nanomateriais também permite construir novos materiais com propriedades magnéticas pré-estabelecidas, além de controlar a geometria, o tamanho e simetria da rede de spins, bem como o nível de desordem nesses materiais em escala microscópica. Como exemplo, pode-se citar a fabricação de um material análogo ao gelo de spin tridimensional, construído por Wang e colaboradores [23], que utilizaram nanopartículas ferromagnéticas dispostas em uma rede com uma geometria particular, permitindo estudar e entender melhor a física de sistemas frustrados.

2.2 Interação de Troca e o hamiltoniano de Heisenberg

As propriedades magnéticas de materiais com momentos magnéticos localizados deve-se à interação de troca. Será considerado aqui um modelo bem simples, que consiste de dois elétrons localizados pelos vetores posição \vec{r}_1 e \vec{r}_2 . A função de onda total é composta pelo produto de estado de um único elétron $\psi_1(\vec{r}_1)$ e $\psi_2(\vec{r}_2)$. Como os elétrons são férmions, obedecem ao princípio da exclusão de Pauli, o qual afirma que num átomo nunca pode haver mais de um elétron ocupando o mesmo estado quântico. A consequência imediata de tal princípio é que a autofunção de onda total (espacial \oplus spin) para o elétron deve ser antissimétrica. Existem quatro possíveis combinações

2. Considerações Gerais sobre Magnetismo

para os spins, que serão representadas por [29,30]:

$$|\uparrow\uparrow\rangle, \quad |\uparrow\downarrow\rangle, \quad |\downarrow\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\downarrow\rangle$$

em que a seta para cima representa o estado de spin up ($S_z = +\hbar/2$), e a seta para baixo representa o estado de spin down ($S_z = -\hbar/2$). A partir destas combinações pode-se construir três autofunções de spin simétricas (χ_S) e uma antissimétrica (χ_A):

$$\chi_S = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (2.1)$$

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle]. \quad (2.2)$$

A equação 2.1 representa o caso em que os spins se encontram “paralelos”, chamado de estado *triplete*, enquanto a situação descrita pela equação 2.2 denota o caso em que os spins se encontram “antiparalelos”, chamado de estado *singlete*.

Da mesma maneira, as funções de onda espaciais podem ser simétricas e antissimétricas:

$$\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) + \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)], \quad (2.3)$$

$$\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)]. \quad (2.4)$$

Observe que ao se fazer $\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_2$, $\psi_S \rightarrow \sqrt{2}\psi_1\psi_2$, enquanto que $\psi_A \rightarrow 0$. A função de onda total, como dito anteriormente, necessariamente deve ser antissimétrica, sendo obtida pelo produto da função de onda espacial pela de spin. Assim, se a autofunção espacial for simétrica, a autofunção de spin deve ser antissimétrica e vice-versa. Desta forma, obtém-se:

$$\Psi_{total} = \begin{cases} \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \otimes \chi_A \\ \psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \otimes \chi_S. \end{cases} \quad (2.5)$$

2. Considerações Gerais sobre Magnetismo

Observe que a situação com spins paralelos tende a se afastar, enquanto a situação com spins antiparalelos tendem a se aproximar. Desse modo, pode-se dizer que o estado de spin está correlacionado com o movimento orbital, uma consequência imediata do princípio da exclusão.

Considerando, agora, a interação coulombiana entre dois elétrons:

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}, \quad (2.6)$$

em que $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ é a distância entre os elétrons. Calculando, agora, a energia média do sistema, utilizando somente as funções de onda espaciais (equações 2.3 e 2.4), uma vez que a interação eletrostática independe dos spins:

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3 r_1 d^3 r_2. \quad (2.7)$$

Como $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) \pm \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1))$, obtém-se:

$$\langle U \rangle = E \pm J, \quad (2.8)$$

em que

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi_1^*(\vec{r}_1)\psi_2^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (2.9)$$

e

$$J = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi_1^*(\vec{r}_2)\psi_2^*(\vec{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1) d^3 r_1 d^3 r_2. \quad (2.10)$$

A equação 2.9 representa a energia coulombiana média do sistema. Observe que este seria o único termo presente se o princípio da exclusão de Pauli não fosse levado em consideração. A imposição desse princípio leva ao surgimento do segundo termo (equação 2.10), chamado de energia de troca, que corresponde a diferença de energia entre os estados de singleto e tripleto. O sinal \pm da expressão 2.8 depende do estado de spin (singleto ou tripleto). Observe que embora a interação entre os elétrons não depende do estado de spin, a energia média dependerá. Dessa forma é razoável pensar que a energia do sistema possa ser escrita em termos de variáveis de spin. Para tanto, pode-se reescrever $\langle U \rangle$ da seguinte forma:

2. Considerações Gerais sobre Magnetismo

$$\langle U \rangle = E \pm J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (2.11)$$

e, devida à sua conveniência, S_i será considerado como sendo as projeções dos momentos angulares de spin. Assim, quando os dois spin forem paralelos têm-se $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = 1$ e $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = -1$ corresponde aos spins estarem antiparalelos.

Werner Heisenberg foi o primeiro a notar, em 1928, a importância da energia de troca para explicar a ordem magnética nos materiais. A hamiltoniana de Heisenberg é dada por:

$$\mathcal{H} = \pm 2J_{12} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \quad (2.12)$$

em que a constante J_{12} , conhecida como constante de troca, está associada com os elétrons 1 e 2.

Conforme dito anteriormente, a situação descrita aqui envolve apenas dois elétrons. No entanto, os sistemas magnéticos possuem um número enorme de elétrons, de tal forma que resolver a equação de Schrödinger para estes sistemas se torna impraticável. Entretanto a interação de troca tem origem na superposição de funções de ondas, o que leva a supor que esta interação seja relevante apenas em pequenas distâncias [31], isto é, em uma rede cristalina apenas as partículas magnéticas mais próximas estão acopladas por esta interação. Essa consideração leva ao modelo de Heisenberg:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.13)$$

em que J_{ij} é a constante de troca entre os spins localizados nos sítios i e j e a notação $\langle ., . \rangle$ indica que a soma é realizada apenas entre primeiros vizinhos. Note que o fator 2 em 2.13 é incluído no somatório, pois cada interação é contada duas vezes. Observe ainda que o sinal \pm presente em 2.12 desapareceu, pois foi incluso em J_{ij} , podendo ser positivo, $J_{ij} > 0$, ou negativo $J_{ij} < 0$. Uma simples análise da equação 2.13 revela que a configuração de menor energia para $J_{ij} > 0$ é tal que $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j > 0$, de tal

2. Considerações Gerais sobre Magnetismo

forma que configurações com spins paralelos são privilegiadas (ordem ferromagnética). Por outro lado, a configuração de menor energia para $J_{ij} < 0$ é tal que $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j < 0$, ocorrendo o alinhamento antiparalelo entre os spins (e o estabelecimento de uma ordem antiferromagnética).

2.3 Interação Dipolar

A interação dipolar tem origem puramente eletromagnética, surgindo da interação entre os dipolos que compõem o material. Pode-se mostrar que o campo magnético devido a um dipolo magnético \vec{m} em um ponto \vec{r} é dado por [32,33]:

$$\vec{B}_{dip}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{r^3} [3(\vec{m} \cdot \hat{r})\hat{r} - \vec{m}], \quad (2.14)$$

em que \hat{r} é o vetor unitário que une o dipolo e o local onde se pretende calcular o campo, μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo. Sabe-se também que a energia de um dipolo magnético \vec{m}' colocado em uma região com um campo magnético \vec{B} é dado por $E = -\vec{m}' \cdot \vec{B}$. Assim, supondo que o material seja composto de momentos magnéticos localizados, a energia resultante desta interação é, então, dada por:

$$E_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i>j} \left[\frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j) - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right]. \quad (2.15)$$

Observe que a energia depende da distância e orientação relativa entre os momentos de dipolos. Uma estimativa desta energia pode ser feita considerando o sistema composto por dois dipolos separados de uma distância \vec{r} e assumindo valores típicos, como $|\vec{\mu}_1| = |\vec{\mu}_2| = 1\mu_B$ e $|\vec{r}| = 2\text{Å}$. Supondo ainda que $\vec{\mu}_1$ seja paralelo a $\vec{\mu}_2$ e ainda paralelo a \vec{r} , a energia é:

$$E = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{2\pi r^3} = 2,1 \cdot 10^{-24} J, \quad (2.16)$$

em que μ_B é o magneton de Bohr. A temperatura correspondente ($E = k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann) a esse valor de energia é um pouco menor que $1K$. Entretanto, a temperatura de ordenamento em ferromagnetos (temperatura de Curie) atinge algumas centenas de Kelvins. Sendo assim, essa energia não consegue causar o

2. Considerações Gerais sobre Magnetismo

ordenamento ferromagnético.

2.4 Anisotropia de Forma

A anisotropia de forma tem sua principal origem na interação clássica entre os dipolos que compoem o material. Está associada com a facilidade de se magnetizar uma dada amostra em uma direção específica. O comportamento isotrópico é observado apenas para formas esféricas, pois para amostras que não são esféricas podem ocorrer uma ou mais direções preferenciais. Tais direções representam os chamados eixos fáceis de magnetização, que são causados unicamente pela forma da amostra [34].

Como já foi mostrado anteriormente, a energia dipolar, descrita na equação 2.15, decai com o cubo da distância entre os dipolos. Assim, a, energia dipolar total em sistema magnético diverge se o sistema for infinito, sendo fisicamente aceitável apenas em sistemas finitos:

$$E_{dip} \propto \int_V \frac{d^3r}{r^3} = \int dr \frac{1}{r}. \quad (2.17)$$

Amostras finitas exibem polos em sua superfície, levando a formação de um “campo perdido” (*stray field*) fora da amostra. Por sua vez, este campo é responsável pelo surgimento de um campo no interior da amostra, conhecido como campo de desmagnetização, \vec{H}_d , produzido pela distribuição da magnetização. Da lei de Ampère aplicada em materiais magnéticos, tem-se:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H}_d = 0. \quad (2.18)$$

A solução de 2.18 é bem definida, sendo \vec{H}_d escrito como o gradiente de um potencial escalar ϕ :

$$\vec{H}_d = -\vec{\nabla}\phi. \quad (2.19)$$

2. Considerações Gerais sobre Magnetismo

Por outro lado, outra equação de Maxwell é:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.20)$$

em que $\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$ é o vetor de indução magnética. Substituindo a equação 2.19 em 2.20 e utilizando a definição de \vec{B} , obtém-se a equação:

$$\nabla^2 \phi_{int} = \vec{\nabla} \cdot \vec{M}, \quad (2.21)$$

válida no interior do material ferromagnético [35].

Comparando 2.21 com a eletrostática, pode-se identificar:

$$\rho_M = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M}. \quad (2.22)$$

A solução geral para ϕ é dado por [33]:

$$\phi_{int}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\vec{\nabla}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r', \quad (2.23)$$

em que V é o volume ocupado pelo material, \vec{r} representa a posição no espaço onde se deseja calcular o potencial e \vec{r}' é a posição de uma porção infinitesimal do material.

Na região externa ao material, $\vec{M} = 0$, e, dessa forma,

$$\nabla^2 \phi_{fora} = 0. \quad (2.24)$$

A densidade superficial de cargas é obtida a partir de 2.22, aplicando-se o teorema da divergência e assim:

$$\sigma_M = \vec{M} \cdot \hat{n}. \quad (2.25)$$

Assim é possível expressar o potencial de modo mais realístico, num caso que envolva condições de contorno superficiais, sendo dado por:

$$\phi(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\vec{\nabla}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' + \frac{1}{4\pi} \oint_S \frac{\hat{n}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS'. \quad (2.26)$$

2. Considerações Gerais sobre Magnetismo

A energia magnetostática devido ao seu próprio campo é dado por:

$$E_{mag} = \frac{1}{2} \int \mu_0 \vec{M} \cdot \vec{H}_d d^3r. \quad (2.27)$$

Como pode ser notado da equação 2.27, a energia magnetostática é minimizada quando o material não exhibe polos, isto é, $\vec{\nabla} \cdot \vec{M} = 0$ e $\hat{n} \cdot \vec{M} = 0$.

2.5 Superparamagnetismo

A teoria do superparamagnetismo foi desenvolvida em 1950 por Bean e Livingston [36] por meio de analogias com sistemas paramagnéticos. A primeira hipótese feita pela teoria é supor que os momentos magnéticos no interior de uma partícula se movessem coerentemente, isto é, que o momento magnético total possa ser representado por um único vetor clássico, dado por $\mu = \mu_{at}N$, em que μ_{at} é o momento magnético atômico e N é o número de átomos magnéticos da partícula [37,38].

Um fato interessante nessas partículas é que elas possuem um tempo de relaxação, τ , que basicamente é o tempo médio necessário para inverter o momento magnético de um estado de equilíbrio de uma dada partícula para outro. Esse tempo é determinado por uma frequência de tentativas de saltos, que é da ordem de $\nu_0 = 10^{10}$ Hz, e pelo fator de Boltzmann, $\exp(\Delta E/k_B T)$, ou seja:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right), \quad (2.28)$$

em que $\tau_0 = 1/\nu_0$, $\Delta E = -K_a V$ é a barreira de energia que separa os dois estados de equilíbrio, V é o volume da partícula, K_a é a constante de anisotropia, T é a temperatura e k_B a constante de Boltzmann. A frequência de saltos de uma configuração em equilíbrio para outra pode, então, ser facilmente obtida a partir de 2.28:

$$\nu = \nu_0 \exp\left(\frac{-\Delta E}{k_B T}\right). \quad (2.29)$$

As equações 2.28 e 2.29 mostram que para baixas temperaturas (ou grandes volumes) $k_B T \ll \Delta E$, de forma que τ é muito grande e a partícula mantém seu momento

2. Considerações Gerais sobre Magnetismo

magnético em sua configuração de equilíbrio inicial. Num regime de altas temperaturas (ou pequenos volumes) $k_B T \gg \Delta E$ e o tempo de relaxação τ se torna muito pequeno, fazendo com que o momento magnético da partícula mude muito rapidamente.

A mudança do momento magnético de uma partícula pode ser observado por diferentes instrumentos como, por exemplo, a espectroscopia Mossbauer. Cada instrumento possui um tempo característico (t_m) para efetuar essa medida (por exemplo, o tempo característico da espectroscopia Mossbauer é $t_m = 10^{-8}s$). Quando $t_m \gg \tau$ não é possível medir o momento magnético em um único estado de equilíbrio. Assim, pode-se afirmar que uma partícula se encontra no estado *superparamagnético* se, a uma certa temperatura, o seu tempo de relaxação for menor que o tempo necessário para se realizar a medida. Caso contrário, para $t_m \ll \tau$, a magnetização da partícula encontra-se aparentemente “presa” em um dado estado de equilíbrio e fala-se, agora, que a partícula encontra-se em um *estado bloqueado*.

Uma revisão mais detalhada sobre as interações e anisotropias magnéticas bem como o fenômeno do superparamagnetismo é encontrada nas referências [1,34,35,41–43].

Capítulo 3

Gelos de Spin

Neste capítulo será feita uma pequena revisão sobre o conceito de frustração geométrica, muito importante para se começar a estudar os gelos de spin. Também será feita uma revisão sobre esses materiais em três e duas dimensões espaciais, da sua interação, do surgimento das excitações do tipo monopolo magnético e de sua estrutura cristalina.

3.1 Frustração Geométrica

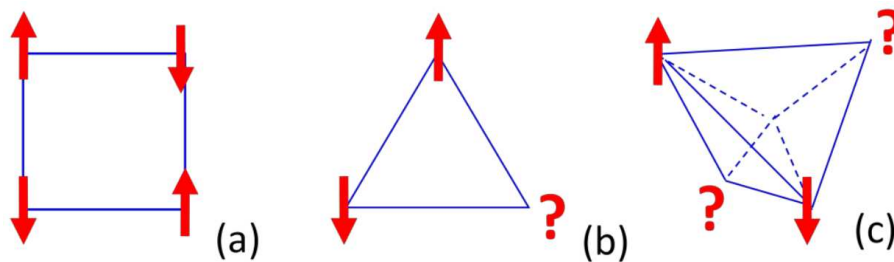


Figura 3.1: Exemplos de redes com geometrias diferentes, nas quais são dispostos spins do tipo Ising, acoplados antiferromagneticamente.

O conceito de frustração geométrica está associado à incapacidade do sistema de minimizar simultaneamente todas as interações entre pares. Quando essa incapacidade é resultado direto da geometria da rede, ela é denominada *frustração de origem geométrica*, ou simplesmente, *frustração geométrica* [44–48]. Para ilustrar esse conceito, a figura 3.1 mostra três redes de spin com diferentes geometrias: quadrada, triangular

3. Gelos de Spin

e tetraédrica. Para mostrar os efeitos da frustração geométrica, considere spins do tipo Ising (spins com orientação restrita a apenas uma direção) arranjados nestas redes, sujeitos à interação antiferromagnética (essa interação faz com que os spins prefiram se alinhar antiparalelamente uns aos outros).

Analisando a figura 3.1, observa-se que é possível posicionar todos os spins satisfazendo todas as interações entre pares simultaneamente no quadrado (figura 3.1.a), entretanto, o mesmo não é possível nas outras duas geometrias: o triângulo apresenta pelo menos uma interação frustrada e, no tetraedro, pelo menos duas interações não são satisfeitas.

O conceito de frustração geométrica é bastante amplo, não ficando restrito a sistemas de matéria condensada, onde é relacionado com uma grande variedade de fenômenos que vão desde a supercondutividade em altas temperaturas [49] ao comportamento de ferritas utilizadas em diversas aplicações em microeletrônica [50]. A frustração geométrica é um fenômeno importante na área de estudo de sistemas neurais, e um fator crucial em diferentes processos biológicos, como o enovelamento de proteínas, processo necessário para que elas assumam as mais diversas funcionalidades [51,52]. Contudo, este fenômeno é melhor visualizado e estudado em sistemas de spins devido à relativa simplicidade dos modelos magnéticos.

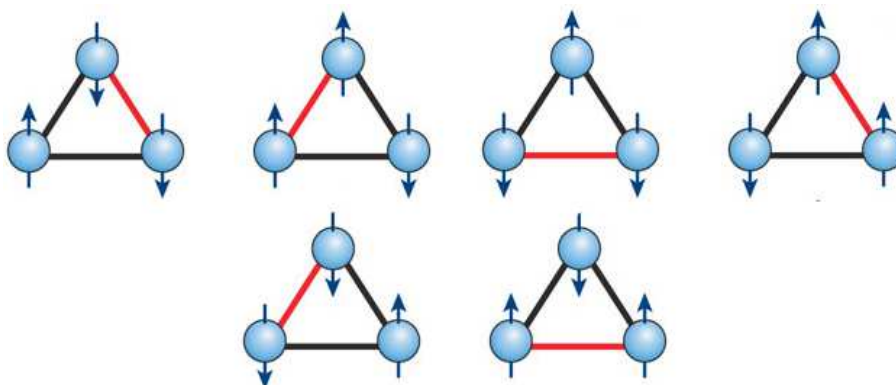


Figura 3.2: Degenerescência do estado fundamental para uma rede triangular de spins do tipo Ising acoplados antiferromagneticamente [48].

Em geral, materiais magnéticos formados por estruturas frustradas, como as ilustradas na figura 3.1, apresentam um número grande de estados fundamentais degenerados. O triângulo, por exemplo, quando considerado isoladamente possui seis

3. Gelos de Spin

estados fundamentais degenerados, no caso de spins do tipo Ising (ver Figura 3.2). Uma rede macroscópica formada por uma estrutura de spins arranjados em uma geometria triangular possui uma extensa multiplicidade de estados fundamentais, o que impede o estabelecimento de uma ordem magnética de longo alcance em temperaturas muito inferiores à escala de energia das interações entre spins.

3.2 Rede piroclórica ou tetraédrica

Os óxidos magnéticos de pirocloro $A_2B_2O_7$ formam uma ampla família de materiais que exibem uma grande variedade de fenômenos magnéticos e uma rica termodinâmica, embora grande parte destes fenômenos ainda não são bem compreendidos. Nestes óxidos, ambos íons, trivalentes A^{3+} , sendo A um elemento de terra-rara como Gd , Tb , Dy , Ho ou o Y , e os íons tetravalentes B^{4+} ($B = Ti, Sn, Mo, Mn$) residem sobre duas subredes independentes e interpenetradas de pirocloro [53]. A figura 3.3 mostra apenas uma dessas subredes, a subrede A , por exemplo. No $A_2B_2O_7$ ou pode-se ter as subredes A ou B ocupadas por apenas um único íon magnético, como é observado no $Tb_2Ti_2O_7$ e $Y_2Mn_2O_7$, ou ambas redes podem ser ocupadas por íons magnéticos, como no $Tb_2Mo_2O_7$.

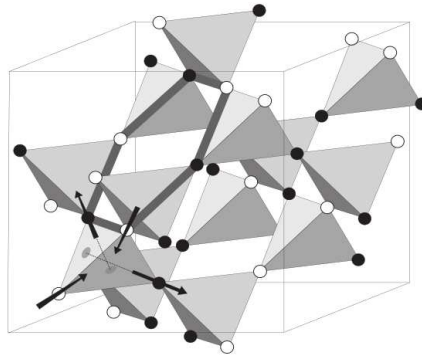


Figura 3.3: Rede de pirocloro, sendo ocupada por íons de Dy^{3+} e Ho^{3+} nos materiais $Dy_2Ti_2O_7$, $Ho_2Ti_2O_7$ [53].

Como discutido por Villain *et al*, há aproximadamente trinta anos [54], a rede de pirocloro é altamente frustrada quando os íons possuem spin isotrópico de Heisenberg, interagindo com seus primeiros vizinhos acoplados antiferromagneticamente. Os óxidos

3. Gelos de Spin

de pirocloro podem ser metálicos (como o $Nd_2Mo_2O_7$ que exibe o fenômeno do efeito Hall anômalo) ou isolantes, como no caso das séries $A_2Ti_2O_7$ e $A_2Sn_2O_7$. Será abordado daqui em diante apenas as séries isolantes, com Dy ou Ho sendo os íons magnéticos representados por A . Ti^{4+} e Sn^{4+} são íons não-magnéticos, de forma que, a rede de pirocloro possui apenas um íon magnético.

A rede de pirocloro pode ser convenientemente descrita como uma rede cúbica de face centrada (FCC), com uma célula base tetraédrica de quatro sítios, podendo estar orientada para cima ou para baixo. Essa estrutura possui ainda uma simetria trigonal em relação a qualquer uma de suas quatro direções $\langle 111 \rangle$, isto é, as diagonais da célula cúbica da figura 3.3.

3.3 A frustração no gelo da água

Outro problema com consequências importantes, que deve ser discutido, é o problema da desordem do próton no gelo da água, que culminou no estabelecimento da regra do gelo “*two-in, two-out*”, também observada nos gelos de spin.

O gelo da água é um exemplo de um sistema fortemente correlacionado em física da matéria condensada, violando a terceira lei da termodinâmica. No início da década de 1930, numa série de notáveis experimentos que envolviam a medição do calor específico, feito por Willian Giauque e colaboradores [55,56], foi observado que mesmo em baixas temperaturas, os estados do gelo da água são caracterizados por uma entropia residual $S_0 = 0,82 \pm 0,05$ Cal/deg · mol, que difere de zero, em contraste com a terceira lei. Em um famoso artigo em 1935, Linus Pauling [57] mostrou que devido a uma desordem configuracional do próton no gelo da água, esta possui uma entropia finita estimada em $0,81$ Cal/deg · mol, muito próxima do valor experimental obtido.

O problema do gelo é um exemplo clássico de como a separação das escalas de energia em sistemas interagentes pode levar a alguns graus de liberdade efetivos em baixas energias, consequência de um sistema altamente frustrado, isto é, incapaz de minimizar sua energia em baixas temperaturas via processos dinâmicos locais. A energia de ligação química da molécula de água é 221 Kcal/mol, de forma que sua estrutura

3. Gelos de Spin

química é praticamente inalterada na fase sólida. Assim, o estado fundamental do gelo não pode minimizar a energia eletrostática de um ensemble neutro de íons O^{2-} e H^+ . Em baixas temperaturas e pressão o gelo da água exibe uma fase conhecida como gelo hexagonal I_h de tal forma que os átomos de oxigênio estão arranjados sobre uma rede hexagonal, de forma que cada oxigênio possui quatro átomos de hidrogênio vizinhos. Bernal, Fowler [58] e Pauli foram os primeiros a propor que os átomos de hidrogênio (prótons) da estrutura hexagonal do gelo da água não estão arranjados periodicamente, estando desordenados. Os átomos de hidrogênio sobre a ligação $O - O$ não estão posicionados no ponto central entre dois átomos de oxigênio, mas para cada íon O^{2-} , dois íons H^+ estarão mais próximos e dois mais afastados, sendo esta regra conhecida mais tarde como regra do gelo “*two-in, two-out*”.

Uma consequência dessa estrutura, que obedece a regra do gelo, é a não existência de um único estado de mais baixa energia. De fato, existe uma enorme quantidade de estados degenerados de baixa energia que satisfazem a regra do gelo e, sendo a verdadeira degenerescência, o gelo da água exibiria uma entropia residual mesmo no zero absoluto (chamada de entropia de ponto zero). Em 1935, Pauling conseguiu estimar o valor da entropia residual por átomo de hidrogênio, $S \approx k_B/2 \ln(3/2)$, em que k_B é a constante de Boltzmann. Em seu modelo, Pauling considerou um mol de gelo contendo N_0 íons de O^{2-} e, portanto, $2N_0$ ligações $O - O$ para a estrutura hexagonal do gelo, de forma que não se podia ter dois prótons ocupando uma mesma ligação $O - O$. Assim, todas as ligações obedecem à primeira regra do gelo. Cada ligação entre oxigênios possui duas possíveis posições para o próton, levando a 2^{2N_0} configurações possíveis para o hidrogênio na rede como um todo. Existem ainda dezesseis possíveis arranjos para a posição do oxigênio na célula tetraédrica, entretanto dez delas são energeticamente desfavoráveis: a configuração OH_4^{2+} , 4 configurações OH_3^+ , 4 configurações OH^- e a configuração O^{2-} . Dessa forma, apenas 6 configurações satisfazem a regra do gelo, podendo agora calcular um limite superior para o número de estados fundamentais, Ω_0 :

$$\Omega_0 \leq 2^{2N_0} \left(\frac{6}{16}\right)^{N_0} = \left(\frac{3}{2}\right)^{N_0}, \quad (3.1)$$

3. Gelos de Spin

e assim, através da equação de Boltzmann, pode-se fazer uma estimativa da entropia residual:

$$S_0 = k_b \ln(\Omega_0) = N_0 k_B \ln\left(\frac{3}{2}\right) = 0,81 \text{ Cal/deg} \cdot \text{mol}. \quad (3.2)$$

3.4 Gelos de Spin cristalinos

“Gelos de spin” é um estado de spins observado em temperaturas baixas encontrados em materiais compostos por óxidos de terras-raras como $H_{0.2}Ti_2O_7$ [59,60], $Dy_2Ti_2O_7$ [61] e $H_{0.2}Sn_2O_7$ [62,63], exibindo um comportamento exótico em baixas temperaturas. Esses materiais apresentam um estado fundamental altamente degenerado, resultando em uma entropia não-nula, mesmo quando $T \rightarrow 0$. São caracterizados, ainda, pela presença de momentos magnéticos $\vec{\mu}_i$ residindo sobre os sítios i de uma rede de pirocloro. Um aspecto importante dos gelos de spin é a existência de uma forte anisotropia devido ao campo cristalino, fazendo com que os spins se alinhem na direção do centro de cada tetraedro, como pode ser visto na figura 3.4.

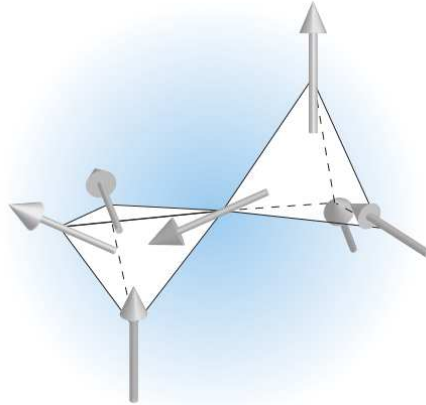


Figura 3.4: Spins arranjados sobre dois tetraedros adjacentes, satisfazendo a regra do gelo “two-in, two-out” [64].

Esse fato, aliado com uma interação ferromagnética entre spins, resulta na frustração das interações entre spins num tetraedro. A interação ferromagnética requer que para quaisquer dois pares de spins no tetraedro, um esteja apontando para seu centro e o outro para fora. Dessa forma, é impossível posicionar os spins no tetraedro

3. Gelos de Spin

satisfazendo essa condição em todos pares. Somente quatro das seis interações ferromagnéticas entre pares de spin podem ser satisfeitas simultaneamente, falando-se então que essa interação no tetraedro é frustrada.

Pode-se fazer agora uma analogia entre a estrutura do gelo da água comum e o posicionamento dos spins no tetraedro na rede de pirocloro magnética. Esta analogia ficou ainda mais completa após a descoberta de que o valor da entropia residual dos compostos $Dy_2Ti_2O_7$, $Ho_2Ti_2O_7$ é aproximadamente igual ao valor encontrado para o gelo da água, resultando na nomeação de gelos de spin para estes materiais. Pode-se utilizar o mesmo argumento de Pauling para calcular a entropia residual destes materiais em baixas temperaturas: assumindo que os tetraedros são independentes, pode-se calcular a entropia residual a partir do número de diferentes configurações que obedecem à regra do gelo. Devido a anisotropia cristalina, cada spin possui apenas duas configurações possíveis, apontando para dentro ou para fora de cada tetraedro. Assim, em cada tetraedro tem-se dezesseis configurações, das quais apenas seis satisfazem a regra do gelo. Portanto, a razão de configurações estáveis é 6/16 em cada tetraedro, de forma que, se o material é composto por N spins, existem $N/2$ tetraedros e o número de configurações que respeitam a regra do gelo é $2^N(6/16)^{N/2}$. Utilizando a relação de Boltzmann, $S = k_B \ln \Omega$, a entropia residual é dada por:

$$S_0 = k_b \ln \left[2^N \left(\frac{3}{8} \right)^{\frac{N}{2}} \right] = \frac{R}{2} \ln \left(\frac{3}{2} \right), \quad (3.3)$$

em que $R = Nk_B$ é a constante molar dos gases, N é o número de Avogadro e k_B é a constante de Boltzmann. O valor experimental da entropia residual encontrada para $Dy_2Ti_2O_7$ foi feita por Ramirez e colaboradores, em um experimento similar ao de Giauque, medindo o calor específico deste composto [61]. A variação da entropia magnética entre duas temperaturas, é obtida a partir da seguinte equação:

$$\Delta S = S(T_2) - S(T_1) = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C(T)}{T} dT. \quad (3.4)$$

No regime paramagnético, em altas temperaturas, a entropia esperada por molécula vale $S(T_2) = R \ln(2)$, uma vez que cada spin possui somente duas con-

3. Gelos de Spin

figurações. Dessa forma, a entropia residual $S(T_1)$ é obtida a partir da subtração entre esse valor e o resultado da integração do calor específico. O valor obtido por Ramirez *et al.* para uma amostra na forma de pó do material $Dy_2Ti_2O_7$ foi $S(T_1 = 0,3\text{ K}) = 1,86\text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$, estando de acordo com a estimativa de Pauling, $1,68\text{ mol}^{-1}\text{K}^{-1}$.

Um dos trabalhos teóricos que motivou o presente estudo foi feito por Castelnovo, Moessner e Sondhi. Em seu trabalho, Castelnovo e colaboradores [17] argumentaram sobre a existência de mais um caso do fenômeno de fracionalização em três dimensões, mostrando que monopolos magnéticos emergem naturalmente através do comportamento coletivo dos momentos magnéticos interagentes nos gelos de spin. Os gelos de spin apresentam momentos magnéticos $\vec{\mu}_i$, com magnitude de aproximadamente dez magnetons de Bohr contribuindo para uma razoável energia magnetostática dipolar. Ao mesmo tempo, a interação de troca entre os elementos terras-raras é pequena, devido ao fato de que os orbitais $4f$ semipreenchidos são fortemente blindados pelos orbitais $5s$, $5p$ e $5d$. Por isso, ao contrário do que ocorre na maioria dos metais de transição magnéticos, a interação dipolo-dipolo não pode ser tratada perturbativamente, devendo ser incluída no hamiltoniano para descrever as interações entre os momentos de dipolo magnéticos nesses materiais. Desta forma, o hamiltoniano é dado por:

$$H = \frac{J}{3} \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) + Da^3 \sum_{i,j} \left[\frac{\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j}{|\vec{r}_{ij}|^3} - 3 \frac{(\hat{e}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\hat{e}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^5} \right] S_i S_j, \quad (3.5)$$

em que $D = \mu_0 \mu^2 / 4\pi a^3$ é a constante de interação dipolar, $a \approx 3,54\text{ \AA}$, é o espaçamento de rede e \vec{r}_{ij} indica a posição dos spins na rede. Observe que os momentos magnéticos estão vinculados a apontar ao longo de seus respectivos eixos locais \hat{e}_i , podendo ser modelados como spins do tipo Ising, $\vec{S}_i = S\hat{e}_i$.

Castelnovo *et al* [17] mostraram que os elusivos monopolos magnéticos poderiam surgir como partículas emergentes nos gelos de spin. Estes autores perceberam que as excitações sobre o estado fundamental degenerado destes materiais, advindos

3. Gelos de Spin

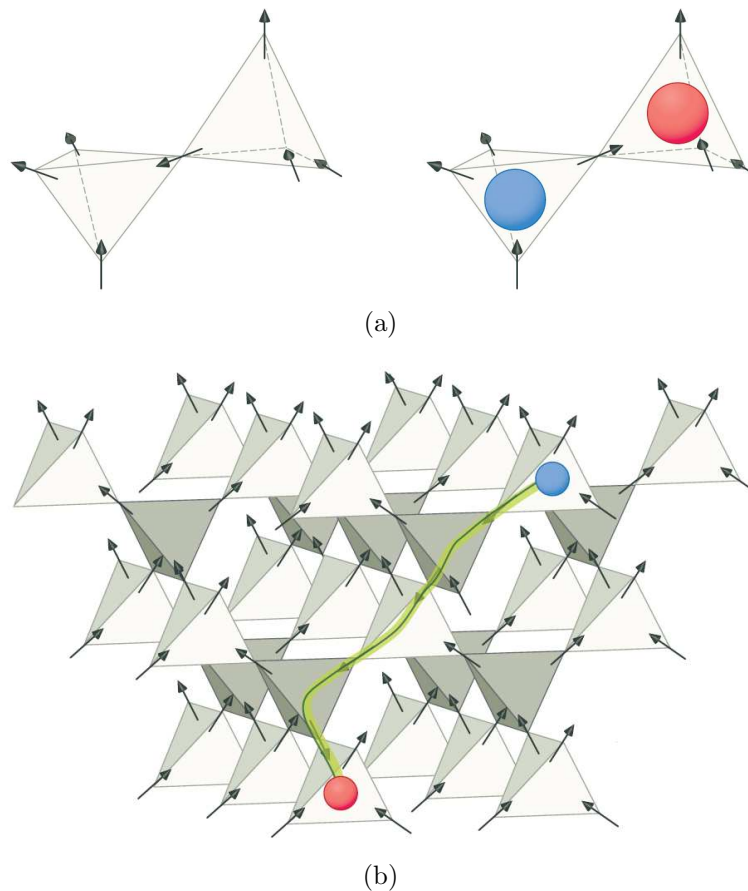


Figura 3.5: a) Primeiro estado excitado do sistema: uma simples inversão de um dipolo leva a criação de um par de cargas magnéticas. A esfera azul representa uma carga magnética positiva, enquanto, a vermelha representa uma carga magnética negativa. b) Esquema ilustrativo da separação de um par de cargas através de uma inversão sucessiva de dipolos. Observe a existência de uma corda ligando o par de cargas [65].

de violações da regra do gelo, levariam ao aparecimento de duas excitações que carregam cargas magnéticas opostas, como um par monopolo-antimonopolo magnético. Além disso, eles perceberam que estas excitações poderiam ser separadas sem maiores violações da regra do gelo, simplesmente invertendo uma cadeia de spins adjacentes. A Figura 3.5(a) ilustra o processo de inversão de um momento de dipolo e a consequente criação de um par de cargas magnéticas opostas nos gelos de spin. Neste processo, uma corda (“*string*”) de spins ligando a carga positiva à negativa seria criada. A figura 3.5(b) mostra um par de cargas separados pelo processo descrito acima. A cadeia de dipolos invertidos (corda de Dirac) encontra-se destacada. Um fato importante relacionado a esta corda é que, neste caso, sua tensão é nula, ou seja, a corda em si não

3. Gelos de Spin

carrega energia. Dessa forma, os monopolos estão essencialmente livres no material, isto é, interagem apenas por um termo coulombiano:

$$V(\vec{r}_{ij}) = \begin{cases} \frac{\mu_0 q_i q_j}{4\pi |\vec{r}_{ij}|} & , i \neq j \\ \mathcal{V}_0 q_i^2 & , i = j. \end{cases} \quad (3.6)$$

Em 2009 foram realizados vários experimentos que culminaram com a observação destas quasi-partículas nos gelos de spin, confirmando, dessa forma, mais um caso do fenômeno de fracionalização em três dimensões espaciais [18]. Posteriormente, outros estudos experimentais [19–22] foram capazes de medir a carga e até mesmo correntes dessas excitações.

3.5 Gelos de Spin Artificiais

Do ponto de vista tecnológico, um trabalho de grande importância seria o de construir sistemas em que cargas magnéticas isoladas surgissem, preferencialmente de forma que fosse possível controlar algumas de suas propriedades. Para melhorar a compreensão destes fenômenos exóticos que surgem em materiais magnéticos frustrados é interessante, ainda, ter controle completo da geometria da rede, tamanho, simetria além do nível e tipo de desordem nesses sistemas em escala microscópica. Isto abriria as portas para se explorar de maneira controlada circuitos baseados em cargas magnéticas ao invés de cargas elétricas, o que vem sendo chamado de *magnetricidade*, podendo resultar em um grande avanço tecnológico. Uma maneira de obter este controle encontra-se no uso de sistemas artificiais, construídos a partir de técnicas litográficas. Neste sentido, foram construídos sistemas de nanoilhas magnéticas em que muito se assemelha aos gelos de spin, sendo chamados de gelos de spin artificiais (GSA). Esses sistemas podem ser fabricados em diversas geometrias, como redes quadradas [23], “brickwork” (parede de tijolos) [24], “honeycomb” ou kagome [25,67], triangular [68], “shakti”, “pinwheel”, santa fé, tetris [69,70]. Todas essas redes são objetos de um estudo intenso experimental e teórico, na tentativa de entender quais os efeitos da frustração sobre as excitações emergentes que aparecem nessas diferentes geometrias. Para maiores informações sobre

3. Gelos de Spin

os processos de fabricação e caracterização de amostras de GSA ver apêndice A.

Em todos experimentos, os gelos de spin foram contruídos a partir de ilhas ferromagnéticas com dimensões suficientemente pequenas, de tal forma que os spins eletrônicos são alinhados ferromagneticamente em um monodomínio. Em geral, o material mais utilizado para sua fabricação é o *permalloy*, uma liga de ferro e níquel ($Ni_{0,81}Fe_{0,19}$). Na maioria dos experimentos reportados na literatura, os GSA são sistemas atêrmicos, ou seja, não possuem dinâmica devido à ativação térmica. Por exemplo, tomando por base o tamanho das nanoilhas no trabalho feito por Wang e colaboradores [23] (que estudaram os GSA em uma rede quadrada) em que as dimensões das ilhas são $(80 \times 220 \times 25)$ nm, o momento magnético, que é proporcional ao volume da ilha, vale $\mu \approx 3 \times 10^7 \mu_B$, em que μ_B é o magneton de Bohr. Assim, a escala de energia térmica necessária para inverter a magnetização de cada ilha é da ordem de 10^5 K, sendo que a temperatura de Curie para o permalloy é $T_C \approx 853$ K. Em outras palavras, para $T > T_C$, as nanoilhas não podem ser consideradas ferromagnéticas e, como toda a descrição do sistema é embasada nessa hipótese, o material se encontra em um regime diferente dos gelos de spin. Entretanto, essa estabilidade do sistema em temperatura ambiente permite obter uma série de informações como, por exemplo, a população de vértices, minimização de energia, estatística das configurações e adesão local da regra do gelo que podem ser facilmente obtidos utilizando um microscópio de força magnética (MFM). De fato, existem uma série de trabalhos na literatura que estudam a termodinâmica e dinâmica fora do equilíbrio desses sistemas por meio da aplicação de campos magnéticos externos, resultando no desenvolvimento de novos protocolos de desmagnetização e o levantamento de curvas de histerese [25,26,66,71,73–77].

Existem, ainda, trabalhos que investigam o uso de novos materiais para a fabricação das nanoilhas, como o estudo feito por Kapaklis *et al* [78], em que o grupo construiu um GSA numa rede quadrada utilizando a técnica “ δ -doped” em paládio dopado com ferro [Pd(Fe)]. Essa técnica consiste, primeiramente, em crescer paládio, em um substrato qualquer (silício, por exemplo); em seguida, interrompe-se (ou apenas diminui-se) o fluxo de Pd e injeta-se um fluxo de ferro por um tempo muito pequeno. Em seguida, o fluxo de ferro é interrompido concomitantemente com o aumento do

3. Gelos de Spin

fluxo de paládio até acabar o crescimento da amostra. Dessa forma, consegue-se inserir uma camada muito fina (δ) de ferro no filme de paládio. O interessante é que a temperatura de Curie do Pd(Fe) pode ser controlada variando a espessura da camada de ferro [79,80]. No trabalho de Kapalis e colaboradores $T_C = 230$ K, obtido crescendo 1,2 monocamadas de Fe entre dois filmes de Pd com 10 monocamadas cada filme. As ilhas possuem área (750×250) nm², com o momento magnético da cada ilha $\mu \approx 1,19 \times 10^7 \mu_B$. O grupo verificou que os GSA construídos dessa forma apresentam uma termodinâmica real, na faixa de temperaturas $160\text{K} < T < T_C$. Muito recentemente outros trabalhos também reportam a obtenção de efeitos térmicos reais nos GSA. Por exemplo, no trabalho de J. M. Porro *et al* [81], os autores alteraram a concentração de ferro e níquel da liga NiFe ($\text{Ni}_{0,87}\text{Fe}_{0,13}$), obtendo uma temperatura de Curie 100 K abaixo da temperatura do permalloy usual.

3.5.1 Gelos de spin na geometria quadrada

Em 2006, um grupo da Universidade do Estado da Pensylvania foi pioneiro ao fabricar o gelo de spin artificial [23]. O material consiste de nanoilhas de permalloy arranjados em uma rede quadrada. As ilhas são alongadas, com seu eixo maior alternando sua orientação com os eixos principais do sistema (x e y).

O sistema possui parâmetro de rede variando entre 320 nm e 880 nm, com tamanho da ilha fixo (80 nm \times 220 nm \times 25 nm), o momento magnético de cada ilha vale aproximadamente $3 \cdot 10^7 \mu_B$, o que leva uma energia de interação entre nanoilhas da ordem de 10^{-19} J. Na figura 3.6(a) é mostrada uma imagem topográfica obtida por um microscópio de força atômica (AFM) de uma rede construída dessas partículas. Por outro lado, a identificação da direção dos momentos magnéticos individuais de cada ilha pode ser feito com o uso de um microscópio de força magnética (MFM), permitindo o estudo da influência da geometria da rede na interação magnética entre as nanoilhas, conforme é mostrado na figura 3.6(b).

A frustração é intrínseca ao sistema, sendo muito similar àquela do gelo de spin tridimensional. Esse efeito pode ser melhor visualizado ao se considerar um vértice contendo quatro ilhas. É fácil verificar que, neste caso, as configurações de pares de

3. Gelos de Spin

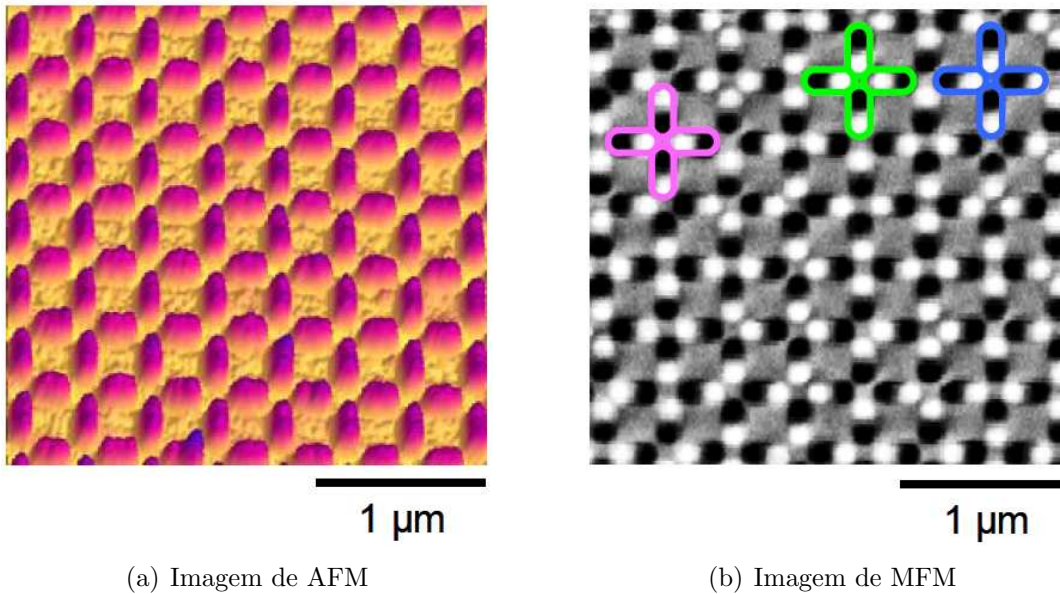


Figura 3.6: Imagens do gelo de spin produzido por Wang *et al* [23].

spins em que um aponta para o centro e o outro para fora possuem uma energia dipolar menor do que as configurações em que os dois spins apontam para dentro ou para fora do vértice, como ilustra a figura 3.7.

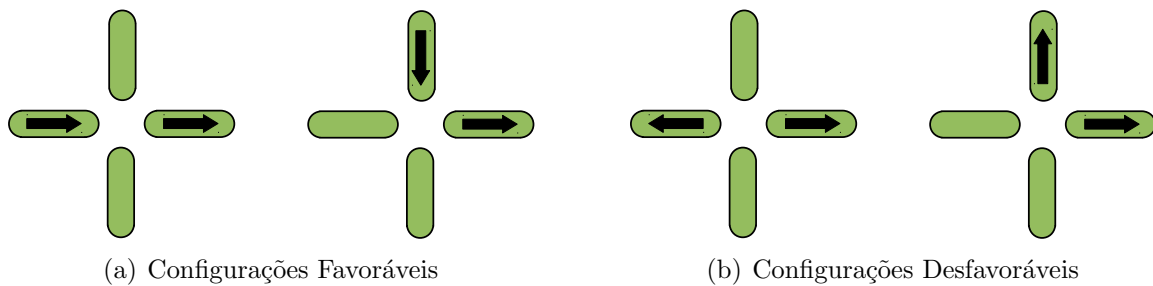


Figura 3.7: Configurações favoráveis e desfavoráveis do ponto de vista energético entre pares de spin.

Como é impossível orientar todos os momentos, de forma que todos pares de um dado vértice tenham uma configuração favorável, nota-se claramente que o sistema é frustrado: dos seis pares possíveis de spins que podem ser formados, apenas quatro podem ser minimizados simultaneamente, mostrando que a geometria da rede não acomoda a interação dipolar existente no sistema. Assim, a rede é naturalmente frustrada.

3. Gelos de Spin

Wang e colaboradores ainda classificaram as possíveis configurações de spin sobre um dado vértice de acordo com a energia dipolar e a percentagem esperada de cada ocorrência de cada configuração, supondo uma distribuição aleatória de spins (ver figura 3.8).

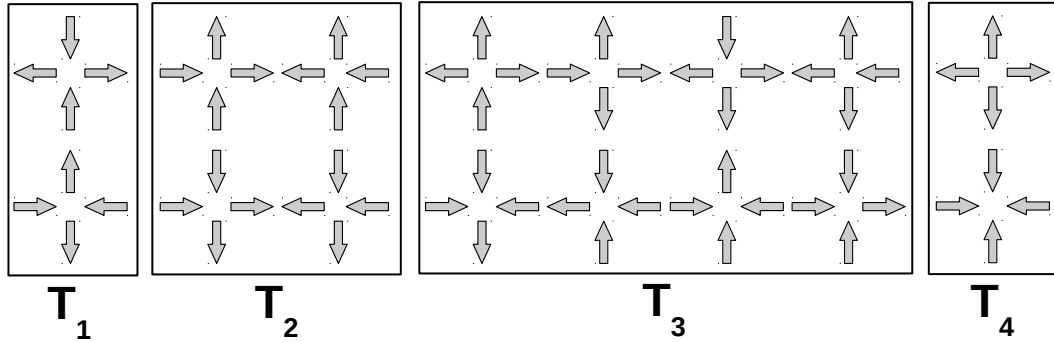


Figura 3.8: 16 possíveis configurações de momentos magnéticos sobre um vértice com quatro ilhas.

Em seguida, foram construídas redes com diferentes espaçamentos de rede entre as nanoilhas, sendo feita uma estatística do número de ocorrência para cada tipo de configuração, como pode ser observado na figura 3.9. Dessa forma, quando as partículas estão mais próximas, mais de 70% das configurações observadas são aquelas que obedecem à regra do gelo, tipos I e II. Com o aumento do espaçamento de rede, as interações entre as nanoilhas tornam-se mais fracas, e a percentagem de cada tipo tende para o valor esperado, supondo orientações aleatórias dos momentos de dipolo magnético.

3.5.2 Protocolos de Desmagnetização e Estado Fundamental

O primeiro passo para se tentar compreender a física de sistemas com frustração geométrica consiste em obter, se possível, o estado fundamental (EF) que, em analogia à teoria, pode ser considerado como o estado de vácuo do sistema. Dessa forma, o próximo passo seria estudar as excitações que surgem em cima do EF. A maioria dos trabalhos experimentais com este objetivo foram feitos por pesquisadores da Universidade do Estado da Pennsylvania, investigando protocolos de desmagnetização principalmente para redes com geometria quadrada [66,71–73]. A seguir será feita uma breve descrição do processo de desmagnetização e de suas implicações. Uma descrição

3. Gelos de Spin

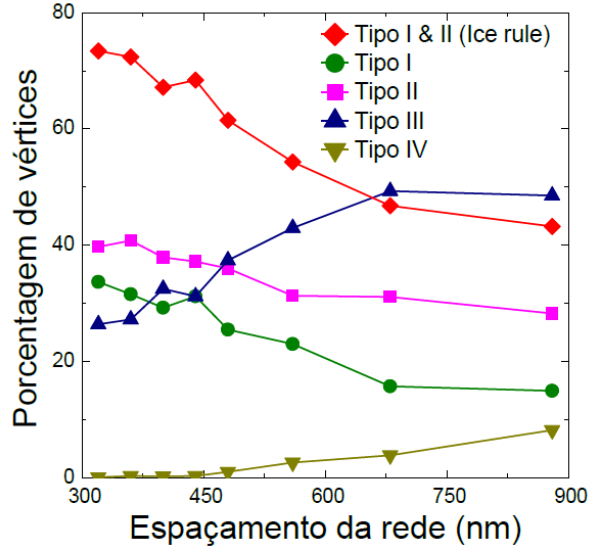


Figura 3.9: Estatística da porcentagem observada dos diferentes tipos de configurações como função do parâmetro de rede [23].

mais geral do assunto é feita nas referências [71,73] e nos trabalhos ali citados.

O protocolo de desmagnetização é feito, em geral, colocando a amostra em um suporte que gira, em relação ao referencial do laboratório. A este suporte é aplicado um campo magnético externo com amplitude decrescente. O protocolo de desmagnetização mais efetivo para os GSA com geometria quadrada foi reportado por Wang e colaboradores [71], em que a frequência de giro do suporte foi de ~ 17 Hz e a amplitude máxima do campo magnético aplicado $H_a \sim 1300$ Oe, bem acima do campo coercivo do sistema ($H_c \sim 770$ Oe). As ilhas utilizadas foram fabricadas com permalloy, com dimensões ($220 \times 80 \times 25$) nm e espaçamento de rede variando entre 320 nm a 880 nm. As figuras 3.10 ilustram o processo de desmagnetização estudado no trabalho de Wang *et al* [71].

No protocolo 1 o campo magnético é aplicado por um certo intervalo de tempo, em seguida, tem sua polarização invertida (em relação ao laboratório) a uma taxa ~ 10 kOe/s e sua magnitude é diminuída de $\Delta H \sim 10$ Oe a cada meio período de oscilação (~ 1 s). Observe, ainda na figura 3.10(b), outros dois protocolos distintos: o protocolo 2 (P_2) em que o campo magnético é reduzido linearmente até zero e o protocolo 3 (P_3) em que o campo é reduzido por passos; no entanto, em ambos casos não houve mudança

3. Gelos de Spin

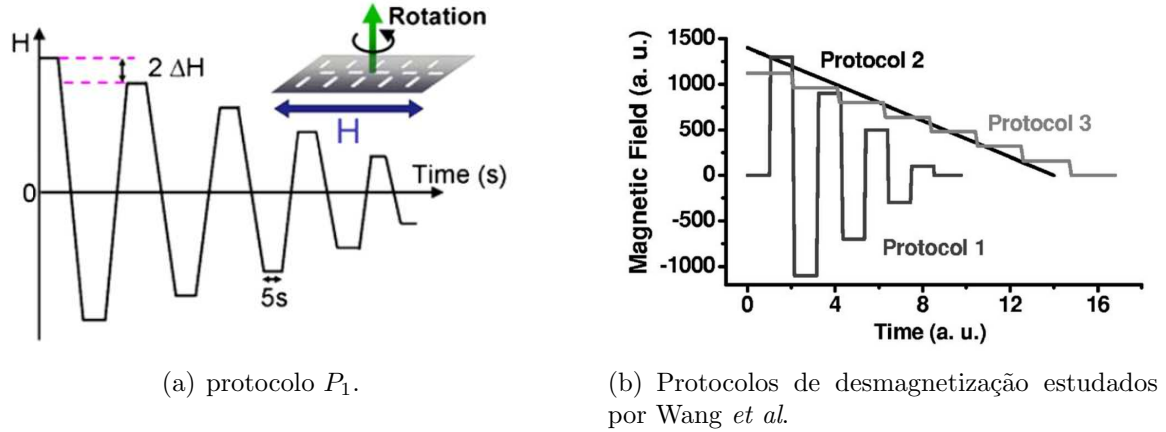


Figura 3.10: Protocolos de desmagnetização [71,73].

na polaridade do campo. A eficiência de cada protocolo foi caracterizada utilizando a magnetização remanente:

$$m_x = \frac{N_x - N_{-x}}{N_x + N_{-x}}, \quad (3.7)$$

$$m_y = \frac{N_y - N_{-y}}{N_y + N_{-y}},$$

em que N_i , $i = x, y$ representa o número de dipolos que apontam na direção $+x$ ou $+y$, N_{-i} , $i = x, y$ indica o número de dipolos que apontam no sentido negativo de x ou y e a magnetização remanente total é dada por:

$$m_{tot} = \sqrt{\frac{m_x^2 + m_y^2}{2}}. \quad (3.8)$$

Os resultados obtidos por Wang *et al* sugerem que P_1 é o protocolo de desmagnetização mais eficiente, obtendo os menores valores da magnetização remanente para os GSA com diversos parâmetros de redes, com grandes porções do sistema com vértices que estão na topologia T_1 e ainda com uma excelente reprodutibilidade. Os resultados da magnetização remanente total como função do parâmetro de rede dos GSA podem ser observados na figura 3.11.

Contudo, no trabalho feito por X. Ke *et al* [73], os autores mostraram que o processo de desmagnetização sozinho não consegue acessar o estado fundamental,

3. Gelos de Spin

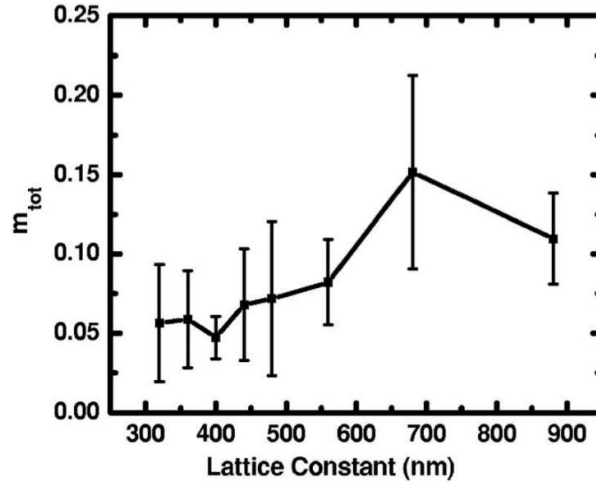


Figura 3.11: Magnetização remanente total como função do parâmetro de rede [71].

mesmo no caso em que magnetização remanente total seja minimizada em todo sistema. Isso está associado com a geometria do sistema: na rede quadrada não é possível fazer uma transição direta dos vértices que estão na topologia T_2 para topologia T_1 (ver figura 3.8), sendo necessário a inversão de dois momentos de dipolo, passando pela topologia T_3 , ou seja, a transição $T_2 \rightarrow T_1$ passa por T_3 existindo uma barreira de energia muito grande para se acessar o EF. Para os gelos de spin construídos sobre a rede kagome, a transição entre estados com maior e menor energia é direta [24,67]. A figura 3.12 ilustra como deve ser feita a transição $T_2 \rightarrow T_1$, bem como as energias de cada vértice.

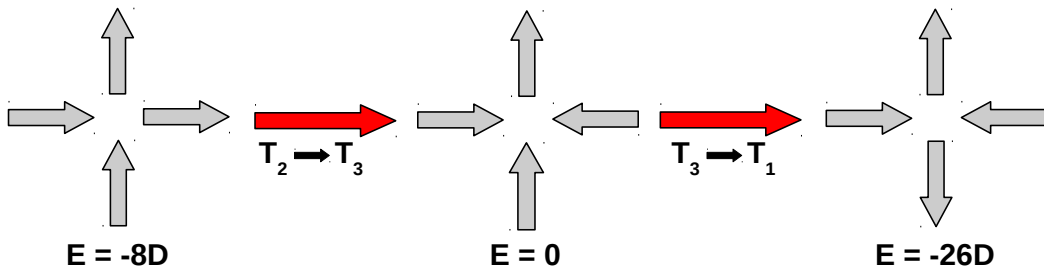


Figura 3.12: Esquema ilustrativo da transição entre os vértices na topologia T_2 para a topologia T_1 via T_3 .

Existem ainda trabalhos teóricos propondo novos protocolos de desmagnetização bem mais simples e com resultados bastante satisfatórios. Z. Budrikis *et al* [74] fizeram simulações numéricas nos GSA, colocados sobre um campo magnético constante que

3. Gelos de Spin

rotaciona a amostra. A inversão de um dado momento de dipolo é obtido se a seguinte condição é satisfeita:

$$-(\vec{h} + \vec{h}_i^d) \cdot \vec{S}_i > h_c, \quad (3.9)$$

em que \vec{h} é o campo magnético aplicado, \vec{h}_i^d é o campo dipolar total, criado pelos outros dipolos da rede atuando sobre o momento de dipolo \vec{S}_i do sistema e h_c é o campo crítico de reversão. Os autores aplicaram este método para duas configurações de rede quadrada: com bordas fechadas 3.13(a) e abertas 3.13(b).

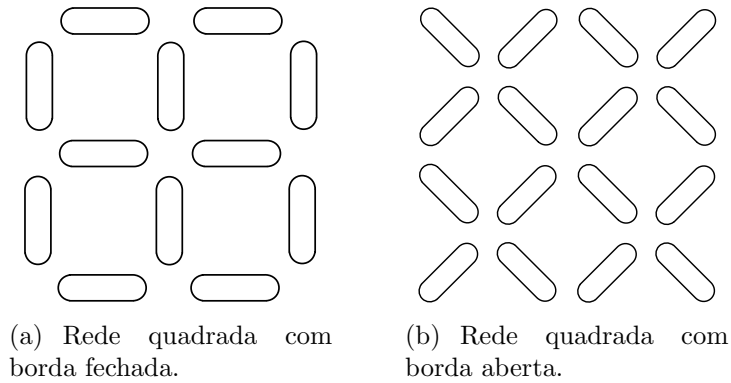


Figura 3.13: Configurações do GSA com diferentes bordas.

No trabalho, Z. Budrikis e colaboradores notaram que o comportamento do sistema e o estado final obtido dependem fortemente da forma da borda (se é aberta ou fechada) e do valor do campo magnético aplicado. Foi observado, para o sistema com bordas abertas e utilizando um valor apropriado de $h = |\vec{h}|$, estados finais com aproximadamente 90% dos vértices na topologia T_1 , isto é, a maior parte do sistema estando no EF.

Em um segundo trabalho, Z. Budrikis *et al* [75] estudaram o efeito da desordem no tamanho das ilhas e no campo de inversão dos dipolos h_c na obtenção do EF. Foi verificado que a desordem em h_c , bem como no tamanho das nanoilhas, introduzem uma nova dinâmica ao sistema, em que transições que não eram observadas no sistema perfeito (ou seja, sem desordem), agora são. Contudo, encontrar o sistema no EF utilizando o protocolo com campo constante não foi possível, embora seja conhecido agora o efeito da desordem no sistema, que é remover vínculos (por exemplo, diminuindo

3. Gelos de Spin

a barreira de energia entre duas configurações) através da adição de novas transições acessíveis. Dessa forma, com um protocolo de desmagnetização apropriado, bem como nível de desordem no sistema controlado, seria possível acessar corretamente certas configurações que resultariam num estado final em que a maioria dos vértices estariam na topologia T_1 , ou seja, grande parte do sistema estaria no EF.

3.5.3 Monopolos Magnéticos em gelos de spin na rede quadrada

O primeiro trabalho teórico que observou, através de simulações computacionais, que as excitações magnéticas nos GSA na rede quadrada se comportavam como monopolos magnéticos foi feito por um grupo da Universidade Federal de Viçosa [82]. No trabalho de L. Mól *et al* foi considerado uma rede similar a construída por Wang e colaboradores (ver figura 3.6), de tal forma que o momento magnético de cada ilha foi trocado por um dipolo pontual do tipo Ising (que pode apontar apenas em uma direção), localizado no centro da nanoilha (como pode ser visto na figura 3.14) e que estes interagem apenas através de interações dipolares.

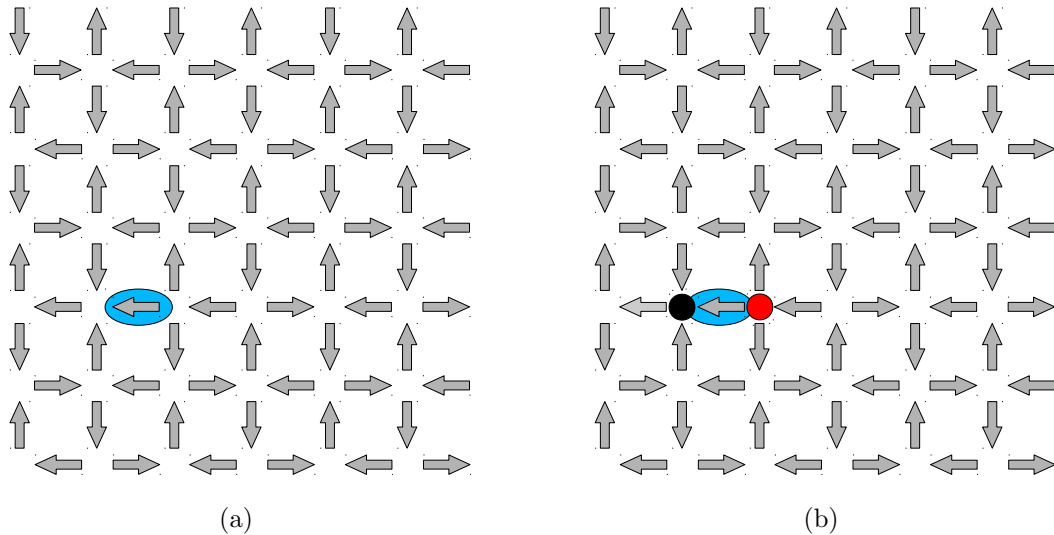


Figura 3.14: (a) Estado fundamental e (b) primeiro estado excitado dos Gelos de spin artificiais.

Foram feitas simulações utilizando o método “*simulated annealing*”, para ta-

3. Gelos de Spin

manho de rede variando no intervalo $6a < L < 120a$, para verificar/obter o estado fundamental do sistema. A variável L está associado com o tamanho do sistema, de forma que uma rede de área L^2 possui $2L^2$ spins, enquanto a é o parâmetro de rede. O estado final obtido desse processo possui todos os vértices na topologia T_1 , como pode ser visto na figura 3.14(a). Feito isso, o primeiro estado excitado do sistema consiste em inverter um dado dipolo, como o destacado em 3.14(a) gerando dois vértices que se encontram na topologia T_3 , como mostra a figura 3.14(b). Em seguida, os autores constataram que os vértices que estão na topologia T_3 podem ser separados, de maneira análoga ao que acontece no gelo de spin cristalino, simplesmente invertendo uma cadeia de dipolos adjacentes, conforme ilustra a figura 3.15

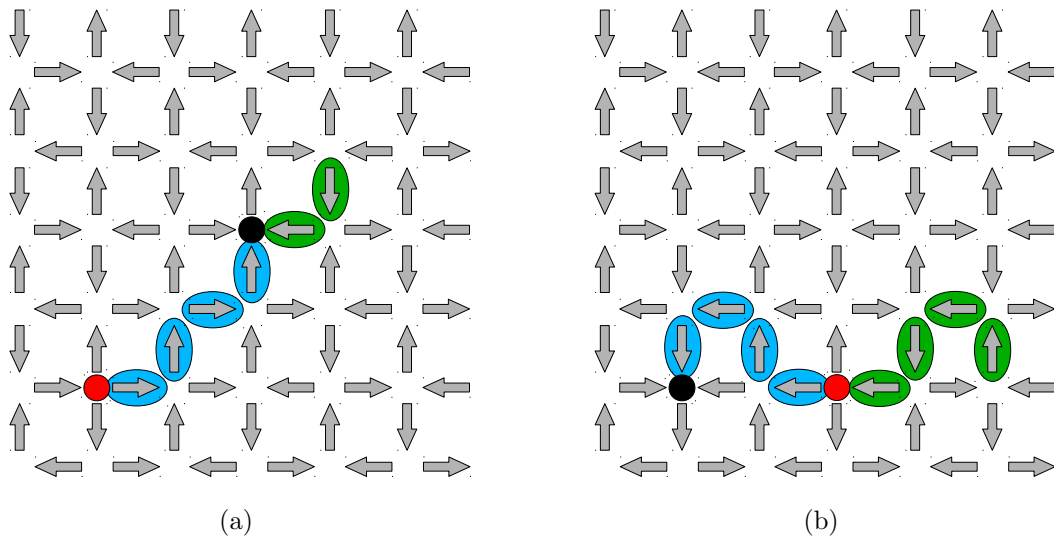
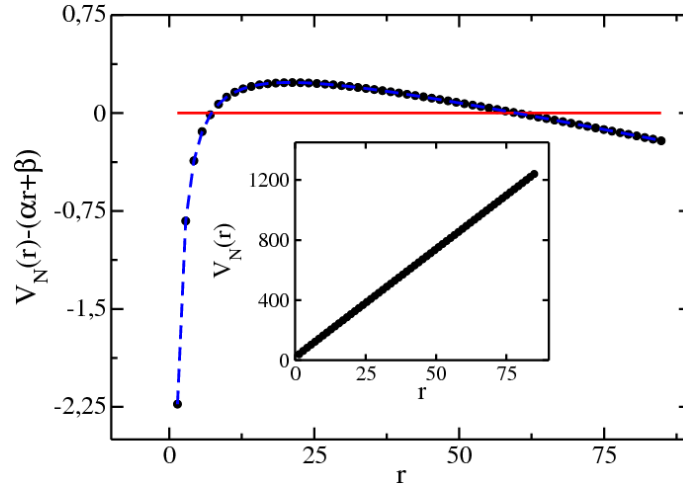


Figura 3.15: Processo de separação de cargas para uma rede de $L = 6a$. Em (a) as cargas são separadas usando cordas do tipo I enquanto em (b) foram usadas cordas do tipo II.

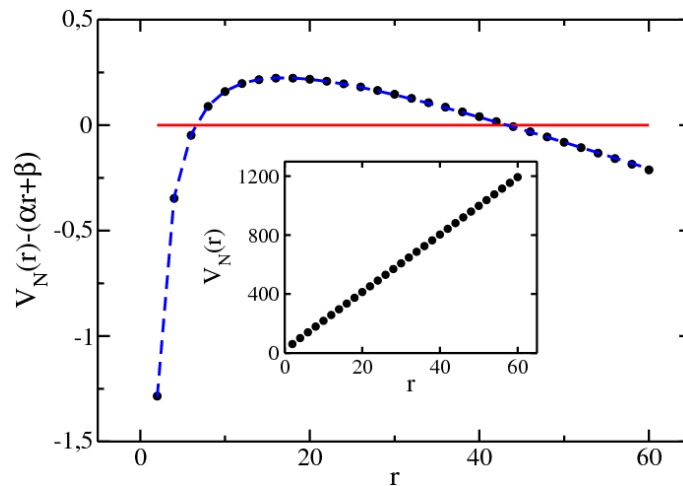
Na figura 3.15, a separação dos vértices T_3 foi feita utilizando duas geometrias distintas: corda I (3.15(a)) e corda II (3.15(b)). Os spins destacados em azul indicam os locais por onde uma das excitações passou. Os momentos de dipolos destacados em verde indicam o próximo passo do processo. Dessa forma, é possível verificar se as excitações do sistema são interagentes. Partindo do estado fundamental, as excitações são criadas e separadas repetindo o mesmo padrão das cordas I ou II. A energia de cada passo é então calculada e em seguida subtraída da energia do estado fundamental, restando apenas a energia potencial de interação de cada configuração como função da

3. Gelos de Spin

separação linear entre o par de cargas, R . O potencial $V_N(r)$, como função de $r = R/a$ (observe que r é uma grandeza adimensional, também associada com a separação linear entre o par de cargas magnéticas), é mostrado na figura 3.16, obtido para uma rede de tamanho $L = 120a$. O comportamento de $V_N(r)$ é aparentemente linear, como pode ser visto no inset das figuras 3.16(a) e 3.16(b). No gráfico, as constantes α e β são parâmetros que foram obtidos por meio de uma regressão linear feita nos pontos obtidos via simulação. Contudo, uma regressão não linear com a função $f_q(R) = q/R + b'R + c$ (linha tracejada em azul) também foi feita, se mostrando mais adequada para descrever o comportamento do potencial de interação do sistema.



(a) Potencial seguindo uma corda do tipo I .



(b) Potencial seguindo uma corda do tipo II .

Figura 3.16: Potencial de interação entre um par de cargas magnéticas como função $r = R/a$.

3. Gelos de Spin

Desse modo, no modelo proposto, o custo energético total para separar um par de cargas é dado pelo potencial coulombiano adicionado a um potencial confinante linear. Assim, se R é a separação linear entre os pares, o potencial de interação é dado por:

$$V(R) = \frac{q}{R} + bX(R) + c, \quad (3.10)$$

ficando claro que os vértices que estão na topologia T_3 se comportam como monopolos magnéticos do tipo Nambu, pois estão conectados por uma corda energética.

Na equação 3.10, $q \approx -4Da$ está associado com o potencial coulombiano atrativo entre o par de cargas. O termo $b \approx 10D/a$. $X(R)$ é o comprimento da corda, ou seja, o número de dipolos invertidos durante o processo de separação. Normalmente, $X(R) \propto R$. Observe que na região por onde uma das cargas passou, os vértices se encontram na topologia T_2 , que embora satisfaça a regra do gelo, tem aproximadamente uma energia 3 vezes maior que a energia de T_1 (ver figura 3.15). Fica claro, portanto, que a regra do gelo não é degenerada na geometria quadrada. Dessa forma, durante o processo de separação do par de cargas surge uma *corda energética* ligando essas cargas. Essa corda é basicamente formada por vértices T_2 . Assim, é possível dar uma interpretação para a constante b da equação 3.10, estando relacionada com a tensão da corda. Aqui se tem uma notável diferença entre os GSA e os gelos de spin cristalinos: neste último, embora exista uma corda observável que conecta os pares de cargas em três dimensões espaciais, ela não transporta energia; ao passo que nos gelos de spin artificiais esta corda possui energia. Esse termo sugere que o possível desligamento dos pares, de forma a se ter monopolos livres, pode não ser tão fácil em duas dimensões espaciais. Por fim, a constante $c \approx 23,4D$ está associada com a energia de criação de um par monopolo-antimonopolo.

O grupo propõe ainda, baseando-se em argumentos do tipo ordem-desordem (muitos semelhantes aos argumentos de Kosterlitz-Thouless [83]), que a corda possui uma entropia configuracional. Isto acontece devido ao grande número de caminhos existentes que uma corda de tamanho $X(R)$ pode ter para conectar um par de cargas

3. Gelos de Spin

separados por uma distância R . Dessa forma, devido a efeitos entrópicos, foi possível estimar a temperatura na qual a tensão da corda se anula sendo $T \approx 9,1 D/k_B$.

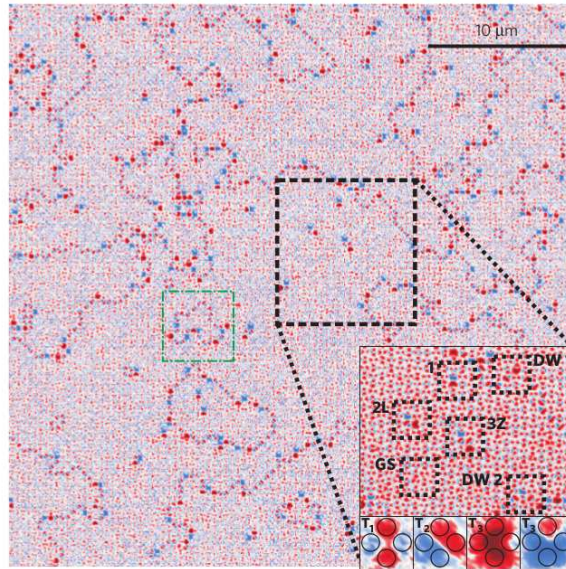
Embora o primeiro trabalho teórico mostrando que as excitações nos GSA se comportam como monopolos magnéticos data de 2009, até 2011 tais excitações só foram observadas experimentalmente na rede kagome [25,26,77]. Em 2011, J. P. Morgan *et al* [84] conseguiram alguns feitos que se mostravam muito difíceis do ponto de vista experimental: (i) obtiveram o estado fundamental em regiões muito grandes, $\sim 10 \mu m^2$, nos GSA na rede quadrada e (ii) identificaram as excitações acima do EF: os monopolos e suas cordas.

O EF foi observado utilizando microscopia de força magnética (MFM) durante os estagios iniciais do crescimento das nanoilhas. A figura 3.17 mostra uma imagem feita por MFM. Observando essa figura, nota-se claramente as regiões que se encontram no estado fundamental separadas por “paredes de domínio” formada por vértices nas topologias T_2 e T_3 . Não foram observados vértices na topologia T_4 .

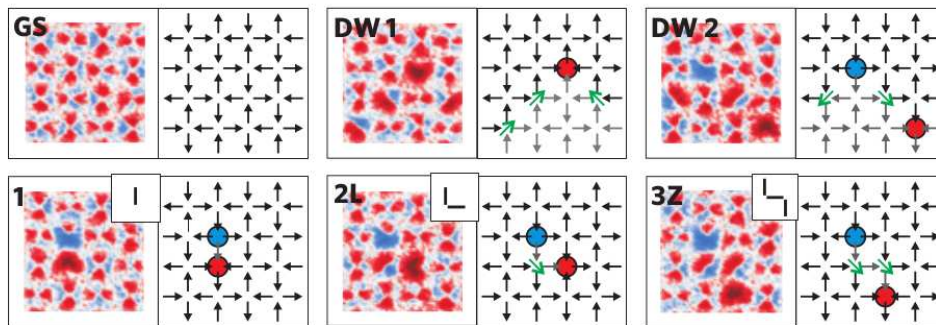
Ainda no trabalho, Morgan e colaboradores observaram cargas magnéticas separadas por várias distâncias e as catalogaram de acordo com os diferentes tipos de cordas que ligavam esses pares. As excitações foram classificadas levando em conta o número de inversões a partir do EF para se chegar em tal configuração e o aspecto mnemônico da geometria que a corda toma. A figura 3.18 mostra uma representação seletiva das excitações observadas e sua caracterização.

Os autores ainda notaram que esses objetos seguem a distribuição de Boltzmann. Os valores encontrados para energia de criação de um par de cargas e tensão da corda foram $30 D$ e $10 D/a$ respectivamente, corroborando os resultados teóricos feitos por L. Mól *et al*.

3. Gelos de Spin



(a)



(b)

Figura 3.17: (a) Observação direta do estado fundamental em grandes porções do sistema $\sim (20 \times 20)a = 10\mu m^2$, separados por domínios magnéticos compostos por vértices $T_{2,3}$. (b) Arranjo dos momentos magnéticos encontrados na região destacada em (a) [84].

3. Gelos de Spin

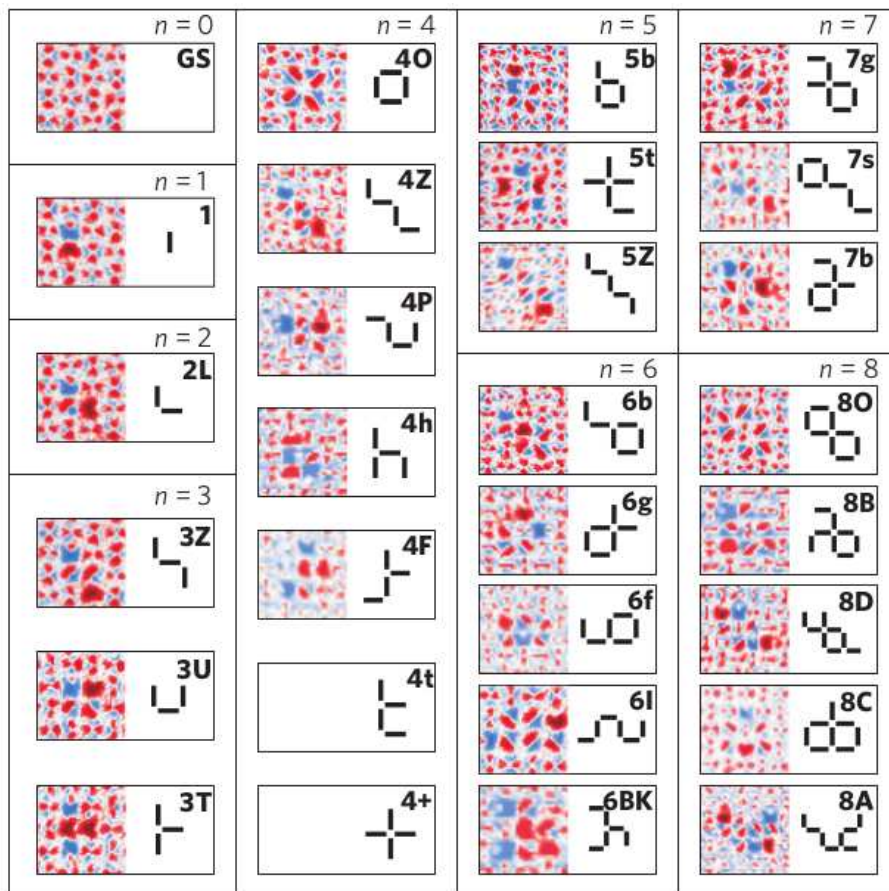


Figura 3.18: Imagens de MFM das excitações isoladas observadas no GSA [84].

Capítulo 4

Métodos Numéricos

Neste capítulo serão discutidos as técnicas computacionais utilizadas neste trabalho. Serão abordados o método de Monte Carlo, técnica de histograma, soma de Ewald e problemas de atribuição.

4.1 O Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo (MC) refere-se a uma classe de métodos numéricos muito empregado em diversas áreas do conhecimento como economia, matemática, biologia, etc. Particularmente na física, ele é amplamente utilizado na resolução de problemas de física estatística e física da matéria condensada. Neste trabalho, o objetivo das simulações de MC é estimar médias de ensemble de uma dada grandeza termodinâmica no equilíbrio.

A dinâmica das configurações microscópicas é obtida por meio de *regras de atualização*, utilizadas pelos algoritmos de MC, e as medidas de uma dada grandeza podem ser feitas após o sistema alcançar o equilíbrio. Nessa tese, foram utilizadas simulações de MC no equilíbrio para estudar a termodinâmica dos gelos de spin artificiais, numa rede quadrada. Existem muitos livros que tratam do assunto, mostrando inúmeras aplicações do método, tanto em problemas de física estatística quanto em problemas de física da matéria condensada [85,86].

Uma simulação de MC gera uma série de configurações de acordo com a dis-

4. Métodos Numéricos

tribuição de Boltzmann. Partindo de um estado inicial μ , o algoritmo gera, via um processo de Markov [87], um novo estado ν . A probabilidade de transição do estado μ para o estado ν é escrita como $W(\mu \rightarrow \nu)$. Esse procedimento garante que qualquer microestado do sistema possa ser obtido, a partir de qualquer outro, usando um número finito de passos. Isso é chamado de *condição de ergodicidade*. O processo estocástico de obtenção de novos estados pode ser entendido como a evolução microscópica do sistema, sendo que a probabilidade $\mathcal{P}(\mu, t)$ de encontrar o sistema no estado $\mu(t)$, no tempo t é dado pela equação mestra:

$$\frac{\partial \mathcal{P}(\mu, t)}{\partial t} = - \sum_{\nu} [\mathcal{P}(\mu, t)W(\mu \rightarrow \nu) - \mathcal{P}(\nu, t)W(\nu \rightarrow \mu)] . \quad (4.1)$$

Como dito anteriormente, a dinâmica das configurações é obtida através das regras de atualização ditadas pelo algoritmo utilizado para se criar uma nova configuração $\mu(t + 1)$, a partir de uma configuração anterior $\mu(t)$. Dessa forma, diferentes dinâmicas podem ser implementadas no algoritmo dependendo da situação física na qual se deseja estudar. Entretanto quando se alcança o equilíbrio termodinâmico, as novas configurações, mesmo sendo criadas por diferentes algoritmos, são geradas seguindo a distribuição de Boltzmann. Assim, no equilíbrio $\partial \mathcal{P}(\mu, t)/\partial t = 0$ obtendo, dessa forma, a condição de balanço detalhado:

$$W(\mu \rightarrow \nu)\mathcal{P}(\mu, t) = W(\nu \rightarrow \mu)\mathcal{P}(\nu, t) . \quad (4.2)$$

A probabilidade do μ -ésimo estado aparecer em um sistema clássico é dado por:

$$\mathcal{P}(\mu) = \frac{e^{-\beta E_{\mu}}}{\mathcal{Z}} \quad (4.3)$$

em que $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura e \mathcal{Z} é a função partição canônica.

O balanço detalhado (eq. 4.2) juntamente com a condição de *ergodicidade* não determinam completamente a forma da taxa de transição. Uma escolha simples, e amplamente utilizada para a taxa de transição, é dada pela prescrição de Metropolis [88]:

4. Métodos Numéricos

$$W(\mu \rightarrow \nu) \begin{cases} \tau_0^{-1} e^{-\beta[E(\nu) - E(\mu)]}, & \text{se } E(\nu) - E(\mu) > 0 \\ \tau_0^{-1} & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad (4.4)$$

em que τ_0 é a unidade de tempo usada.

A especificação das probabilidades de transição juntamente com as regras de atualização para criar novos estados definem o algoritmo de MC. Durante as simulações, o chamado passo de Monte Carlo (MCS) - uma medida de tempo computacional - é atualizado após o sistema realizar $2L^2$ tentativas de inversões de um único spin [“single spin flip”, (SSF)] e $0,7 \times L^2$ tentativas de inversões de cadeias aleatórias e fechadas de spins [“worm loops”, (WL)]. O SSF é implementado seguindo o algoritmo de Metropolis:

1. Escolha um estado inicial para o sistema (aleatório, por exemplo).
2. Escolha aleatoriamente um sítio i da rede.
3. Calcule a variação de energia ΔE necessária para se modificar a direção original de \vec{S}_i .
4. Gere um número aleatório r uniformemente distribuído entre 0 e 1.
5. Se $r < e^{-\beta\Delta E}$ inverta o spin.
6. Volte ao passo 2.

Os WLs são criados da seguinte maneira:

1. Adicione aleatoriamente um vértice i da rede a uma lista.
2. Adicione um novo vértice, vizinho de i , escolhido aleatoriamente a partir dos spins que estão apontando para fora de i .
3. Verifique se o *loop* está fechado.
4. Em caso negativo volte ao item 2.

4. Métodos Numéricos

5. Em caso afirmativo, verifique se o *loop* tem cordas ou pontas e as elimine (ver figura 4.1(a)).
6. Calcule a variação de energia ΔE para inverter simultaneamente todos spins que estão dentro do *loop* fechado
7. Gere um número aleatório r uniformemente distribuído entre 0 e 1.
8. Se $r < e^{-\beta\Delta E}$ inverta todos spins do *loop* fechado (ver figura 4.1(b)).

Utilizando esse algoritmo, o WL apenas muda a topologia na região por onde o *loop* passa, não criando nem aniquilando cargas durante a inversão da cadeia de spins. Em outras palavras, após a inversão do *loop* fechado de spins, os vértices que tiveram spins invertidos ainda obedecem à regra do gelo: dois spins apontam para o centro do vértice e dois para fora do vértice, como mostrado na figura 4.1.

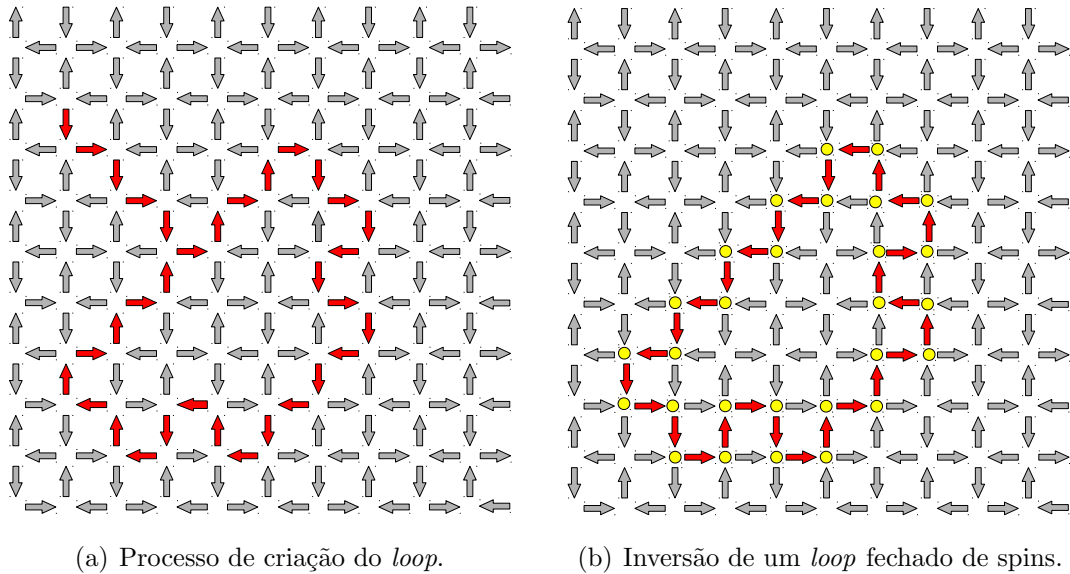


Figura 4.1: Processo de inversão de uma cadeia fechada de spins em uma rede $L = 10a$.

Na figura 4.1, (a) indica o *loop* fechado de spins que irão ser invertidos enquanto em (b) os spins que estão no *loop* já foram invertidos. Observe que os vértices marcados pelos círculos em azul obedecem à regra do gelo, mantendo a neutralidade magnética do sistema.

4. Métodos Numéricos

4.1.1 Análise de dados e Medidas termodinâmicas

O cálculo de qualquer medida termodinâmica deve ser feito apenas quando o sistema está no equilíbrio. Partindo de uma dada configuração inicial, as primeiras configurações criadas pelo método de MC devem ser desprezadas por não seguirem a distribuição de Boltzmann. Esse transiente inicial recebe o nome de *tempo de termalização*, se referindo ao número mínimo de passos de Monte Carlo que devem ser dados para que o sistema alcance o equilíbrio. O tempo de termalização depende fortemente da configuração inicial e da temperatura do sistema. Obter esse número é um trabalho que deve ser feito com bastante cuidado e atenção. O que geralmente é feito é calcular a evolução temporal de uma dada quantidade termodinâmica A para diferentes condições iniciais. Pode-se, por exemplo, calcular a energia ou a magnetização de cada configuração para diferentes configurações iniciais: aleatórias, estado fundamental (quando conhecido), estado de maior energia, etc, e, assim, estimar qual seria o número mínimo de passos necessário para termalizar todas essas redes. O equilíbrio termodinâmico é identificado quando os valores das grandezas calculadas flutuam em torno de um valor médio, conforme ilustra a figura 4.2.

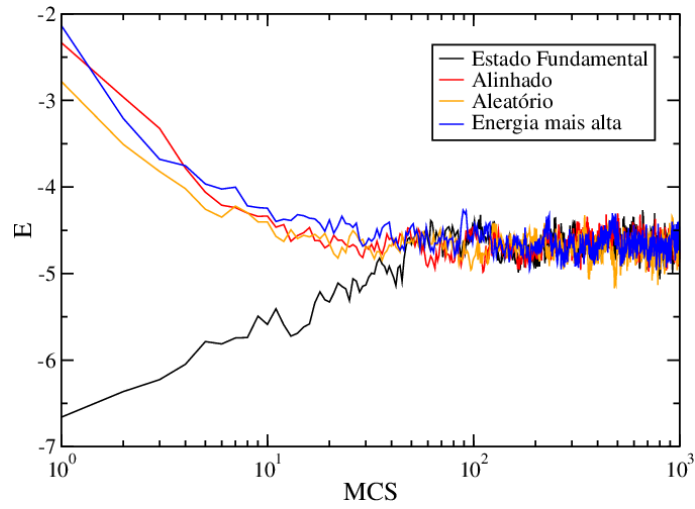
Observe, na figura 4.2, que a magnetização termaliza mais rápido que a energia, mostrando que diferentes quantidades termodinâmicas possuem diferentes tempos (medidos em MCS) para alcançar o equilíbrio. Note também que 4.2(c) mostra como é o ordenamento dos dipolos em um vértice para as configurações que obedecem o estado fundamental, alinhado e de maior energia, respectivamente.

Uma vez alcançado o equilíbrio térmico, pode-se começar a fazer as medidas das quantidades termodinâmicas de interesse e, conseqüentemente, obter seus valores médios em uma dada temperatura. O valor médio de uma quantidade termodinâmica $\langle A \rangle$ é obtido por meio de uma média aritmética simples dos valores medidos de A , em cada configuração visitada:

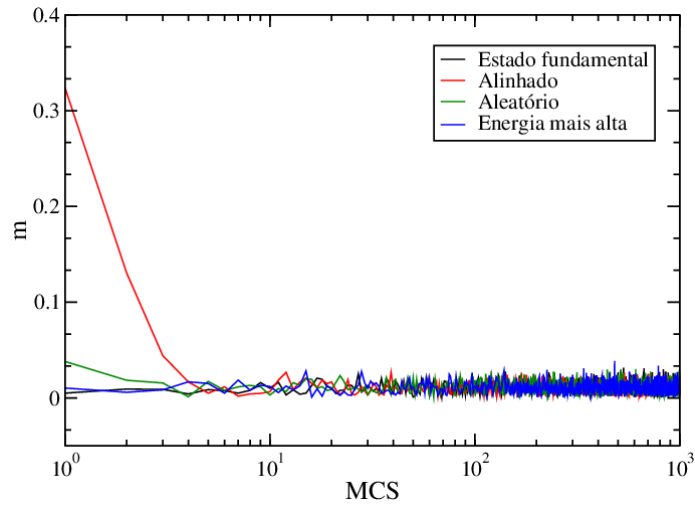
$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i, \quad (4.5)$$

em que N representa o número de medidas da quantidade A em uma dada temperatura.

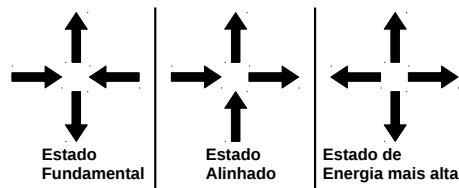
4. Métodos Numéricos



(a) Termalização da Energia.



(b) Termalização da Magnetização.



(c) Configurações iniciais utilizadas.

Figura 4.2: Processo de termalização da energia e magnetização para rede de tamanho $L = 40$ a em $T = 7,8 D/k_B$, como função do número de passos de Monte Carlo para os gelos de spin artificiais.

O erro associado a medida de $\langle A \rangle$ $[\varepsilon(A)]$ é dado por:

4. Métodos Numéricos

$$\varepsilon(A) = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_i (\langle A \rangle - A_i)^2}. \quad (4.6)$$

As grandezas termodinâmicas calculadas nessa tese foram:

(i) Calor específico:

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (4.7)$$

(ii) Densidade de pares de cargas simples e duplas, obtidas por meio de uma média aritmética simples sobre o número de pares de cargas de cada configuração visitada.

(iii) Separação média entre as cargas que constituem um par.

4.2 Técnicas de Repesagem ou Histograma

O método de histograma é uma técnica que permite extrapolar os resultados de uma simulação de Monte Carlo, feita em uma temperatura T_0 , para um intervalo de temperaturas, ΔT , entorno de T_0 . Essa técnica é muito poderosa porque evita que se faça uma nova simulação de MC nessas temperaturas, o que inclui processo de termalização e o processo de medidas das quantidades termodinâmicas de interesse. Isso torna as simulações com o uso do MC muito longas e demoradas.

O método de histograma consiste em fazer a repesagem das probabilidades das configurações geradas. A probabilidade de um estado μ_1 ser visitado em uma simulação de MC é dado por:

$$P(\mu_1) = \frac{\exp(-\beta E_{\mu_1})}{\sum_{\{\mu\}} \exp(-\beta E_{\mu})}, \quad (4.8)$$

em que $\beta = 1/k_B T$.

Para aplicação do método, é interessante reescrever 4.8 em termos da probabilidade de um estado com energia E ocorrer em uma dada temperatura:

$$P_{\beta}(E) = \frac{g(E) \exp(-\beta E)}{\mathcal{Z}(\beta)} \quad (4.9)$$

em que

4. Métodos Numéricos

$$g(E) = \sum_{\{\mu\}} \delta_{E, E_\mu}, \quad (4.10)$$

é o número de estados com energia E e $\beta_0 = 1/k_B T_0$, e $\mathcal{Z}(\beta)$ é a função partição canônica.

Assim, uma simulação de MC realizada em uma temperatura T_0 gera uma série de configurações com uma frequência proporcional ao peso de Boltzmann, $e^{-\beta_0 E}$. Dessa forma, o histograma $H(E)$ dos valores da energia fornece uma estimativa para a distribuição de probabilidade no equilíbrio em T_0 . Essa estimativa se torna exata no limite em que a amostragem feita na simulação seja infinita. Numa simulação real, o histograma sofrerá erros estatísticos, no entanto $H(E)/N$, em que N é número de medidas feitas, fornece uma estimativa para $P_{\beta_0}(E)$ sobre o intervalo dos valores de E gerados durante a simulação. Então:

$$H(E) \approx \frac{N}{\mathcal{Z}(\beta_0)} g(E) \exp(-\beta_0 E) \quad (4.11)$$

Dessa forma, é possível estimar o valor de $g(E)$:

$$g(E) \approx \frac{\mathcal{Z}(\beta_0)}{N} H(E) \exp(\beta_0 E). \quad (4.12)$$

A distribuição de probabilidades em uma temperatura β qualquer é dado por:

$$P_\beta(E) \approx \frac{H(E) \exp(-\Delta\beta E)}{\sum_E H(E) \exp(-\Delta\beta E)}, \quad (4.13)$$

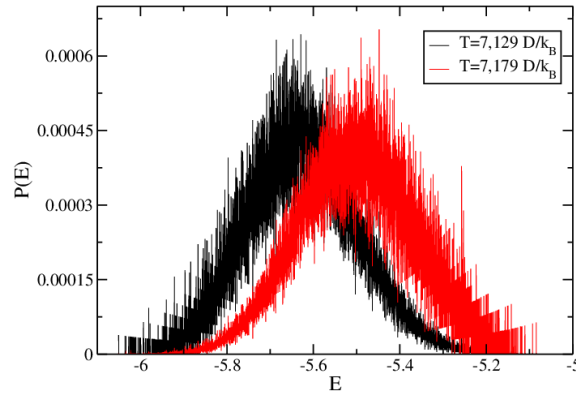
em que $\Delta\beta = \beta - \beta_0$. Assim, o valor esperado de uma grandeza termodinâmica que é função da energia, $A(E)$ em uma temperatura T é:

$$\langle A(E) \rangle_\beta \approx \sum_E A(E) P_\beta(E). \quad (4.14)$$

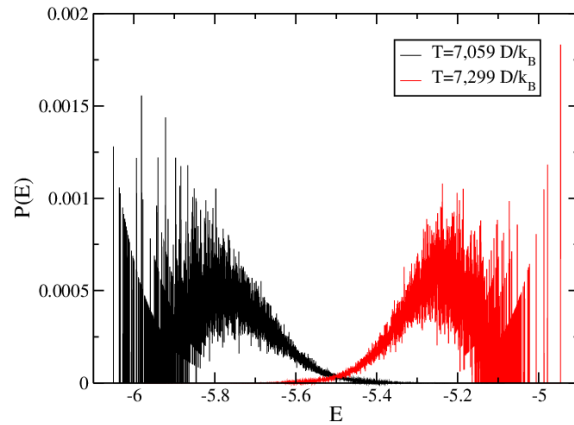
Em temperaturas β suficientemente distantes de β_0 , o método de histograma prevê valores que obviamente estão errados, devido ao fato que no intervalo de energias E necessário para se estimar a distribuição de probabilidades $P_\beta(E)$ não são relevantes em β_0 . Esse problema é ilustrado na figura 4.3, que mostra o histograma de energia para

4. Métodos Numéricos

quatro temperaturas $T = 7,129D/k_B$, $7,179D/k_B$, $7,059D/k_B$, $7,299D/k_B$ obtidos a partir de uma simulação de MC em $T = 7,15D/k_B$ nos gelos de spin artificiais na rede quadrada. Note que para temperaturas acima de $T = 7,179D/k_B$ ou abaixo de $T = 7,129D/k_B$ as estimativas feitas pelo método de histograma não são válidas e, dessa forma, muito cuidado deve ser tomado ao utilizar essa técnica. De fato, a observação dos histogramas obtidos para temperaturas próximas de T_0 sempre é necessária para validar (ou não) os dados obtidos por esta técnica.



(a) $T = 7,129 D/k_B$ e $T = 7,179 D/k_B$.



(b) $T = 7,059 D/k_B$ e $T = 7,299 D/k_B$.

Figura 4.3: Distribuição de probabilidade $P(E)$ como função da energia obtida para uma rede $L = 60a$ obtida a partir de uma simulação de Monte Carlo realizada em $T_0 = 7,15D/k_B$.

4.3 Soma de Ewald

A interação dipolar desempenha um papel importante na determinação das propriedades de sistemas bidimensionais, podendo estabelecer ordem de longo alcance

4. Métodos Numéricos

em ferromagnetos bidimensionais em temperatura finita [89–95]. É responsável pela reversão da magnetização entre as fases planares e “fora do plano” em filmes finos magnéticos [96–98]. Está associada com a formação de fases moduladas [99] através de uma competição com as forças de curto alcance, com o surgimento de faixas e bolhas em filmes finos [100], [101]. Promove também a formação de superestruturas coloidais em nanocristais [102–104].

Uma característica marcante da interação dipolar é o seu decaimento espacial lento, o qual deve ser cuidadosamente tratado nas simulações. Limitando a interação dipolar em apenas uma célula (isto é, a rede em questão), como geralmente é feito para potenciais de curto alcance, conduz a uma série de resultados imprecisos [105]. A maneira correta de trabalhar com a interação dipolar é levar em conta sua natureza de longo alcance e repetir a célula de simulação de maneira periódica no espaço. Isto é feito implementando as condições de contorno periódicas e, assim, realizar a soma de Ewald para a energia [106–108]. A seguir, as expressões importantes para a energia encontram-se resumidas. Uma dedução formal da soma de Ewald é apresentada no apêndice B.

A implementação de condições de contorno periódicas em sistemas com interação dipolar é uma tarefa não-trivial. A maneira mais fácil seria replicar o sistema em todas as direções, até um determinado raio de corte n_c e realizar a soma das interações dos N dipolos da célula básica (rede original) com os outros dipolos dessa célula e com suas imagens (réplicas do sistema). Assim:

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}}^{n_c} \left\{ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|^3} - 3 \frac{[\vec{S}_i \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)][\vec{S}_j \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)]}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|^5} \right\}, \quad (4.15)$$

em que a linha (') no somatório em $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ mostra que para $\vec{n} = 0$, o termo $i = j$ não é considerado e \vec{n} indica o número de cópias do sistemas (dessa forma, $n_i \in \mathbb{N}$). Uma forma apropriada de se calcular 4.15 é obtida através da soma de Ewald. Esta técnica consiste em quebrar a interação dipolar em dois termos: um de curto alcance e o outro de longo alcance e realizar a soma deste último termo no espaço

4. Métodos Numéricos

recíproco. A expressão final é dada por:

$$H_{Ewald} = H_{Re} + H_{fourier} + H_{sup} + H_{self}, \quad (4.16)$$

em que H_{Re} representa a soma dos termos de curto alcance, sendo realizada no espaço real, $H_{fourier}$ é a parte correspondente dos termos de longo alcance, efetuada na espaço recíproco (ou espaço de Fourier), H_{sup} considera os termos de superfície e, por fim, H_{self} é o termo de autointeração. A expressão para esses termos são dados por:

$$H_{Re} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{n}}^{n_c} \left\{ B(|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + C(|\vec{r}_{ij} + \vec{n}L|) [\vec{S}_i \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)] [\vec{S}_j \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)] \right\}, \quad (4.17)$$

$$H_{fourier} = \frac{\pi}{A} \sum_{\vec{G} \neq 0} h_1(\vec{G}) F_{\parallel}(\vec{G}) F_{\parallel}^*(\vec{G}) + \frac{\pi}{A} \sum_{\vec{G} \neq 0} h_2(\vec{G}) F_{\perp}(\vec{G}) F_{\perp}^*(\vec{G}), \quad (4.18)$$

$$H_{sup} = \frac{2\sqrt{\pi}\alpha}{A} \sum_{i,j=1}^N S_i^z S_j^z, \quad (4.19)$$

$$H_{self} = -\frac{2\alpha^3 N}{3\sqrt{\pi}}, \quad (4.20)$$

em que, novamente, a linha (') no somatório sobre $\vec{n} = (n_x, n_y)$ (o sistema tratado aqui é bidimensional) significa que o termo $i = j$ é omitido quando $\vec{n} = 0$, N é o número de sítios da rede e $A = L^2$ é a área da rede (L expressa o tamanho de um lado do sistema), $\vec{G} = (2\pi/L)\vec{n}$ é o vetor da rede recíproca. Além do mais,

$$B(r) = -\frac{\text{erfc}(\alpha r)}{r^3} - \frac{2\alpha \exp(-\alpha^2 r^2)}{\sqrt{\pi} r^2}, \quad (4.21)$$

$$C(r) = 3\frac{\text{erfc}(\alpha r)}{r^5} + \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3}{r^2} + 2\alpha^2 \right) \frac{\exp(-\alpha^2 r^2)}{r^2}, \quad (4.22)$$

$$h_1(\vec{G}) = -\frac{\text{erfc}(G/2\alpha)}{G}, \quad (4.23)$$

4. Métodos Numéricos

$$h_2(\vec{G}) = \left[\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{G^2}{4\alpha^2}\right) - \operatorname{Erfc}\left(\frac{G}{2\alpha}\right) \right], \quad (4.24)$$

$$F_{\parallel}(\vec{G}) = \sum_{i=1}^N (\vec{G} \cdot \vec{S}_i) \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}_i), \quad (4.25)$$

$$F_{\perp}(\vec{G}) = \sum_{i=1}^N S_i^z \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}_i), \quad (4.26)$$

em que $\operatorname{erfc}(x)$ é a função erro complementar. Observe ainda a existência de um parâmetro α que regula a rapidez com que as séries (no espaço real e recíproco) convergem, de forma que ambas possam ser truncadas e ainda se obter resultados confiáveis. Para isso, este parâmetro deve ser escolhido de forma a minimizar o erro no cálculo da energia.

4.4 Problemas de Atribuição

Problemas de Atribuição (PA), ou utilizando o termo em inglês “assignment problems”, aborda a questão de como associar N itens (trabalhos, estudantes) a N outros itens (máquinas, tarefas) [109]. Existem várias formas de descrever matematicamente esse problema, podendo ser tratado como um mapeamento bijetor entre dois conjuntos finitos, U e V , com n elementos cada conjunto. Fazendo a identificação dos elementos desses conjuntos, tem-se a representação de uma atribuição por meio de *permutações* entre seus elementos, como mostra a figura 4.4. Observe que existem muitas formas de se atribuir os elementos de U aos elementos de V (ao todo, existem $n!$ maneiras distintas), e dessa forma, é de grande interesse obter a configuração que otimiza o problema em consideração.

Nesse trabalho, foram calculadas a separação média entre os pares de cargas positivas e negativas que aparecem em uma dada configuração de equilíbrio a uma dada temperatura. O problema encontrado foi como emparelhar essas cargas de tal forma que a soma de todas separações entre as cargas que constituem um par seja mínima. Esse problema é um problema típico de atribuição e, dessa forma, fica justificado a

4. Métodos Numéricos

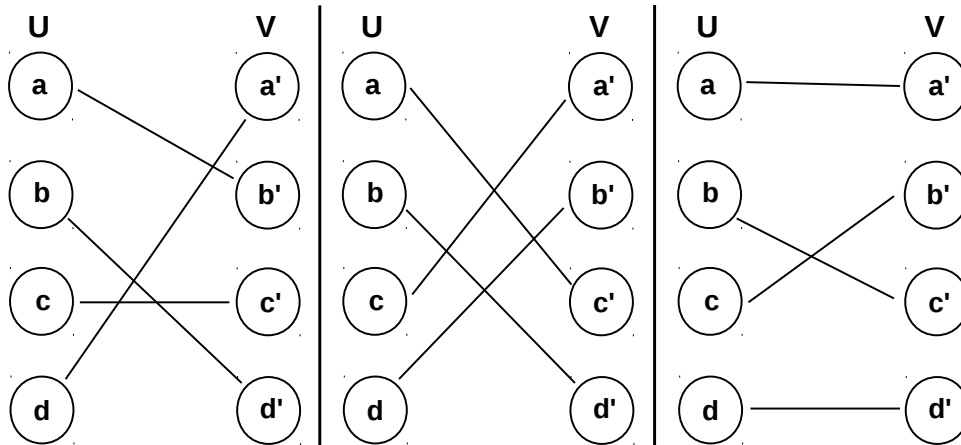


Figura 4.4: Possíveis mapeamentos dos elementos de U nos elementos de V .

necessidade de se utilizar essa ferramenta.

A formulação geral do problema de atribuição consiste em minimizar

$$z = \sum_{i,j=1}^n c_{ij}x_{ij}, \quad (4.27)$$

sujeita aos vínculos:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n x_{ij} = 1, & j = 1, 2, \dots, n \\ \sum_{j=1}^n x_{ij} = 1, & i = 1, 2, \dots, n \\ x_{ij} = 1 \text{ ou } x_{ij} = 0, & i, j = 1, 2, \dots, n, \end{cases} \quad (4.28)$$

em que $x_{ij} = 1$ indica que o item i é atribuído ao item j e $x_{ij} = 0$, caso contrário. O valor de z expressa o custo total da atribuição dos n elementos de U aos n elementos de V , e c_{ij} é o custo unitário de se atribuir um único elemento i de U a um único elemento j de V . As restrições impostas em 4.28 garantem que o mapeamento seja bijetor.

Computacionalmente, a minimização da equação 4.27 é conseguida através da implementação do *Método Húngaro*.

4.4.1 Método Húngaro

O Método Húngaro (MH), denominação dada em homenagem aos pesquisadores húngaros, E. Egerváry e D. König, que o desenvolveram, explora de uma maneira

4. Métodos Numéricos

O MH apresenta a seguinte propriedade: a solução ótima de um problema de otimização não se altera quando é somado na função-objetivo uma quantidade constante (positiva ou negativa), isto é, para um escalar α qualquer, as soluções ótimas do problema de minimizar z sujeito as restrições 4.28 e minimizar $\bar{z} = z + \alpha$ sujeito às mesmas restrições são idênticas. Sendo assim, assumindo que x'_{ij} , $i, j = 1, 2, \dots, n$ seja uma associação ótima do problema de atribuição. Então para qualquer α_i com $i = 1, 2, \dots, n$ tem-se:

$$\alpha_i(x'_{i1} + x'_i + \dots + x'_{in}) = \alpha_i, \quad (4.32)$$

pois, se a solução é viável, então $x'_{i1} + x'_i + \dots + x'_{in} = 1$. Da mesma forma, para β_j qualquer:

$$\beta_j(x'_{i1} + x'_i + \dots + x'_{in}) = \beta_j. \quad (4.33)$$

Definindo $\alpha_i = \min \{c_{i1}, c_{i2}, \dots, c_{in}\}$ e subtraindo $\alpha_i(x'_{i1} + x'_i + \dots + x'_{in})$ do valor de z , obtém-se uma nova função-objetivo, cujo valor difere do valor original por uma constante, que apresenta pelo menos n novos custos unitários nulos e cujo valor mínimo também é atingido por meio da atribuição x'_{ij} . Procedendo de maneira similar com $\beta_j = \min \{c_{1j}, c_{2j}, \dots, c_{nj}\}$, mantém-se a otimalidade de x'_{ij} sendo que custos unitários nulos adicionais são criados.

Variáveis com custos nulos são potenciais candidatas a assumirem o valor 1. Se existir um número suficiente de custos nulos para permitir que n variáveis assumam esse valor e ao mesmo tempo as restrições do problema sejam atendidas, então o problema de atribuição terá sido resolvido.

O MH é implementado computacionalmente por meio do **algoritmo húngaro**: considerando a matriz original de custos unitários:

4. Métodos Numéricos

$$C = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{pmatrix},$$

o algoritmo húngaro consiste em executar os seguintes passos:

(i) Encontre o custo mínimo de cada linha e construa uma nova matriz subtraindo os custos de cada linha da tabela original pelo seu custo mínimo;

(ii) De posse da nova matriz, encontre o custo mínimo de cada coluna e construa uma nova matriz subtraindo os custos de cada coluna pelo seu custo mínimo;

(iii) Determinar o número de retas (horizontais e/ou verticais) necessárias para cobrir todos os zeros da matriz corrente de custos (podem existir várias maneiras de cobrir os zeros com o mesmo número de mínimos de retas). Se exatamente n retas forem determinadas, então uma atribuição de custo mínimo poderá ser obtida com base nos zeros cobertos pelas retas e o algoritmo termina. Se menos do que n retas forem determinadas, vá para o passo (iv);

(iv) Encontre o menor elemento não-nulo (θ) da matriz atual de custos não cobertos pelas retas determinadas pelo passo iii. Subtraia θ de cada elemento não coberto pelas retas, adicione θ a cada elemento coberto por duas retas e volte ao passo iii.

Observe que as operações realizadas no passo (iv) são equivalentes a adicionar θ a cada custo de uma linha coberta e subtrair θ de cada custo de coluna não coberta. Com isso, ao menos um novo custo torna-se zero, mantendo a não-negatividade dos custos e a otimalidade da atribuição. O passo (iv) simplesmente executa essas operações com uma pequena economia de cálculos.

Capítulo 5

Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais

5.1 Modelo

Considerou-se aqui uma rede similar à experimentalmente construída por Wang *et al* [23]. Para isto, o momento de dipolo de cada ilha foi trocado por um momento de dipolo puntiforme e centrado na mesma (similares a spins do tipo Ising). Nessa aproximação, não é considerado os graus de liberdade internos de cada ilha, bem como interações de ordem maior que a dipolar (interações quadripolar, octopolar, etc...). Contudo, é esperado que essa simplificação não altere as principais propriedades físicas do sistema. Existem trabalhos na literatura [110] mostrando que se o espaçamento de rede (a) for cerca de duas vezes maior que o maior eixo da ilha, o efeito de interações de ordem superior é insignificante. Para espaçamentos de rede menores, o efeito dessas interações é, basicamente, dar mais estabilidade para os estados de energia mais baixa. Dessa forma, pode-se esperar que, com o aumento do tamanho da ilha aproximando-se do espaçamento de rede, o estado fundamental deve ser mais robusto e o aparecimento de excitações magnéticas demandaria mais energia. Sendo assim, nessa aproximação, em cada sítio (x_i, y_i) da rede, duas variáveis de spins foram definidas:

- $\vec{S}_h = (\pm 1, 0, 0)$, localizados em $\vec{r}_h = (x_i + \frac{1}{2}, y_i)$;
- $\vec{S}_v = (0, \pm 1, 0)$, localizados em $\vec{r}_v = (x_i, y_i + \frac{1}{2})$.

5. Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais

Assim, pode-se representar as ilhas por \vec{S}_h ou \vec{S}_v , de forma que em uma rede de área L^2 possui $2L^2$ spins. A interação entre as nanoilhas é de longo alcance, sendo essencialmente dipolar, uma vez que o comprimento de interação de troca, no permalloy, é de apenas alguns nanômetros [111] e a separação entre as nanoilhas é muito maior que esse comprimento. Dessa forma, o hamiltoniano do sistema é, então, dado por :

$$H = Da^3 \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{|\vec{r}_{ij}|^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^5} \right], \quad (5.1)$$

em que $D = (\mu_0 \mu^2 / 2\pi a^3)$ é a constante de interação dipolar e a é o espaçamento de rede. A soma é feita em todos pares de spins e suas imagens, utilizando condições de contorno periódicas, de forma que a soma de Ewald, apresentada no capítulo 4, foi utilizada.

5.2 Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais

Os resultados que serão apresentados foram obtidos nas simulações de Monte Carlo (MC) para redes de tamanho 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70 e 80 espaçamentos de rede. Entretanto, em todos os gráficos serão apresentados somente os resultados para as redes de tamanho $40a$, $60a$ e $70a$. O método de MC, utilizado para obter as médias das grandezas termodinâmicas, foi definido como sendo a combinação de inversões de um único dipolo (“single spin flip”) e cadeias fechadas e aleatórias (“worm loops”) de spins, na qual todos dipolos contidos dentro de um caminho fechado aleatório são invertidos seguindo a prescrição de Metropolis [86]. Assim, um passo de Monte Carlo (MCS) consiste em $2 \times L^2$ tentativas de inversões de um dipolo e $0,7 \times L^2$ tentativas de inversões de cadeias fechadas de spins, em que L é o tamanho do sistema. Em todas as simulações, 10^4 MCS foram suficientes para alcançar as configurações de equilíbrio, sendo utilizadas 10^5 configurações em equilíbrio para obter as médias termodinâmicas.

Começando com os resultados obtidos para o calor específico. Os resultados mostram que o calor específico possui um comportamento típico de sistemas que apresentam uma transição de fase contínua, ou de segunda ordem, conforme pode ser visto na Figura 5.1. Para as redes estudadas, o calor específico apresenta um pico acentuado

5. Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais

na temperatura $T_c \approx 7,2 D/k_B$. Também foi observado que T_c praticamente não varia quando o tamanho do sistema é alterado.

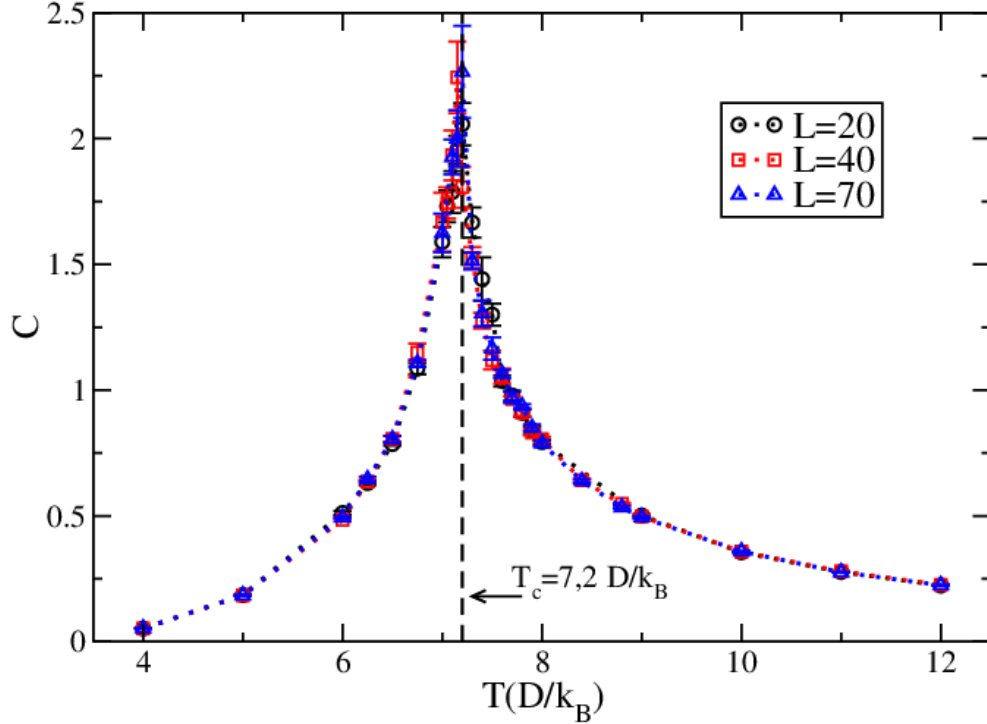


Figura 5.1: Calor específico como função da temperatura. Observe que o calor específico exibe um pico acentuado na temperatura $T_c \approx 7,2 D/k_B$.

O comportamento da amplitude máxima do calor específico, C_{\max} , como função do tamanho da rede também foi investigado, como mostra a Figura 5.2. Esses valores foram obtidos utilizando a técnica de histograma, descrita no capítulo 4. Como pode ser visto na figura, C_{\max} aumenta muito lentamente com o aumento de L , apresentando uma divergência logarítmica. Portanto, de acordo com os dados obtidos nas simulações, espera-se que o calor específico apresente uma divergência logarítmica apenas no limite termodinâmico, ou seja, quando $L \rightarrow \infty$.

Outra quantidade analisada foi a densidade de pares de monopólos. É interessante notar que existem dois tipos distintos de cargas: as de energias mais baixa, formados por vértices que estão na topologia T_3 , em que se tem três spins saindo e um entrando ou, o oposto com três spins entrando e um saindo. Dessa forma, vértices que estão nessa topologia (T_3) serão chamados de cargas simples. Por outro lado, se em um dado vértice tem-se quatro spins saindo ou quatro entrando, ou seja, vértices

5. Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais

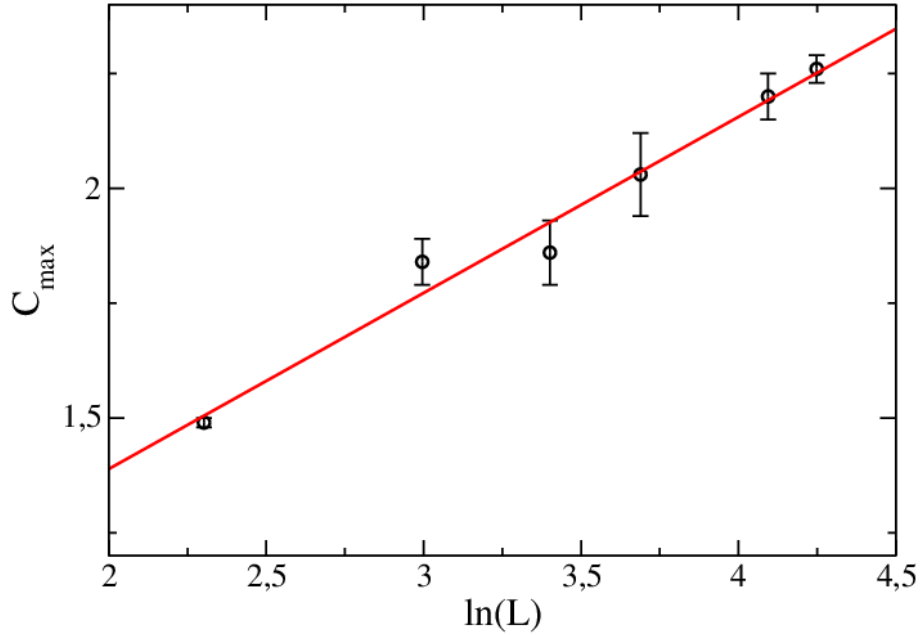


Figura 5.2: Amplitude máxima do Calor específico como função do tamanho da rede (L). Note que o pico do calor específico diverge logaritmicamente com o tamanho do sistema.

que estão na topologia T_4 , serão denominados cargas duplas, por serem vértices mais energéticos que T_3 . A Figura 5.3 mostra a densidade de pares de cargas simples (ρ_s) e, no “inset”, a densidade de pares de cargas duplas (ρ_d) como função da temperatura. Os dados foram obtidos simplesmente contando o número de cargas simples e duplas que aparecem em cada configuração em equilíbrio e, ao final da simulação obtém-se os valores médios para uma determinada temperatura.

Observe que para ambos casos, a densidade aumenta monotonicamente até um valor máximo, obtido no regime de altas temperaturas. Também pode ser visto que a densidade de pares de cargas duplas sempre é muito menor que a densidade de cargas simples. Tal resultado era esperado, visto que a energia dos vértices que estão na topologia T_4 [$E_{T_4} = (8 + 24\sqrt{2}) D \approx 41,9 D$] é muito maior que a energia dos vértices que estão na topologia T_3 ($E_{T_3} = 0$), demandando mais energia para serem criadas no sistema.

A separação das cargas que formam um par constitui um grau de liberdade interno, uma vez que a energia do par depende da distância entre as cargas que o compõe. Assim, foi calculado a distância média, r_M , entre dois monopolos opostos como

5. Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais

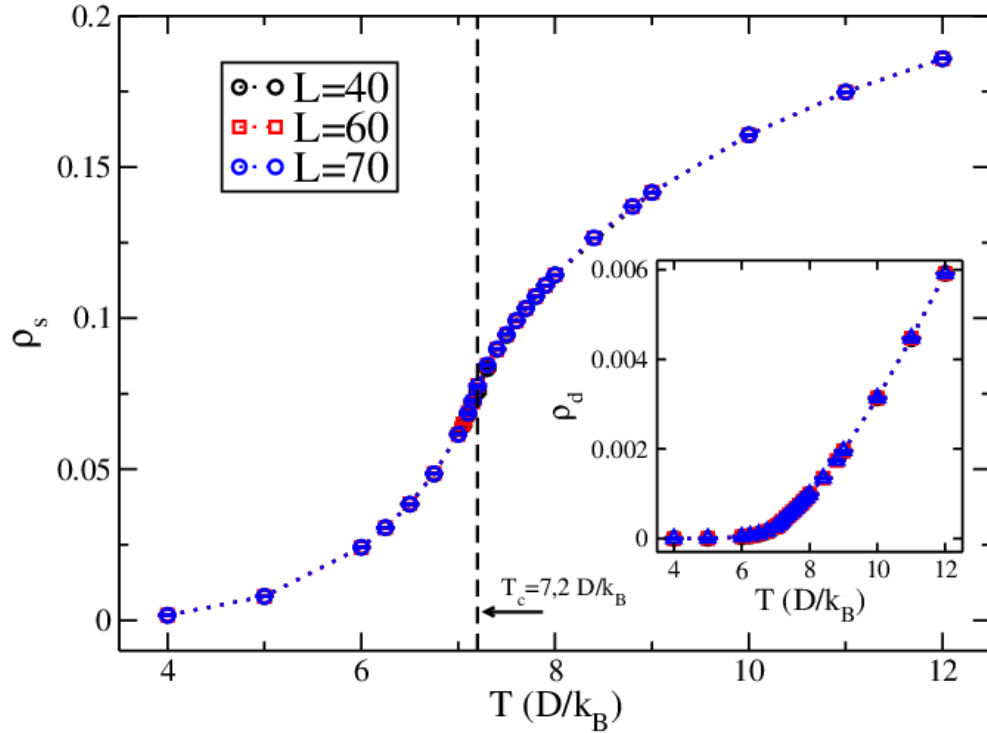


Figura 5.3: Densidade de monopólos simples como função da temperatura. Inset: Densidade de pares de cargas duplas como função da temperatura.

função da temperatura. Essa quantidade termodinâmica pode conter informação sobre a possibilidade da separação dos monopólos e de como essas excitações se organizam no sistema. Nesse cálculo foi considerado apenas vértices que tenham cargas simples. O agrupamento de monopólos em pares é único se as distâncias entre eles são menores que a distância média entre os monopólos, $r_M \sim 1/\sqrt{\rho_s}$. Se a separação das cargas que formam um par se tornar maior que r_M , simplesmente haverá um reemparelhamento de cargas e, conseqüentemente, formação de novos pares. Isso acontece porque o custo energético gasto para separar um par de cargas em um espaçamento de rede é muito alto, $\Delta E \approx 10D$, e manter esse par de cargas separados por uma corda muito longa é energeticamente desfavorável. Todavia, obter r_M computacionalmente exige muita atenção porque esse valor depende fortemente da carga com que se começa a fazer o emparelhamento. Esse problema é típico de atribuição (já descrito no capítulo 4), que lida com a questão de como atribuir n itens (empregos, estudantes) a n outros itens (máquinas, tarefas), sujeitas a um vínculo. Nesse caso, deseja-se atribuir N cargas positivas a N cargas negativas, em uma dada configuração, de modo que a soma das

5. Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais

distâncias de todos os pares seja mínima. Isso é feito usando o algoritmo húngaro (também descrito no capítulo 4). Os resultados obtidos são mostrados na Figura 5.4.

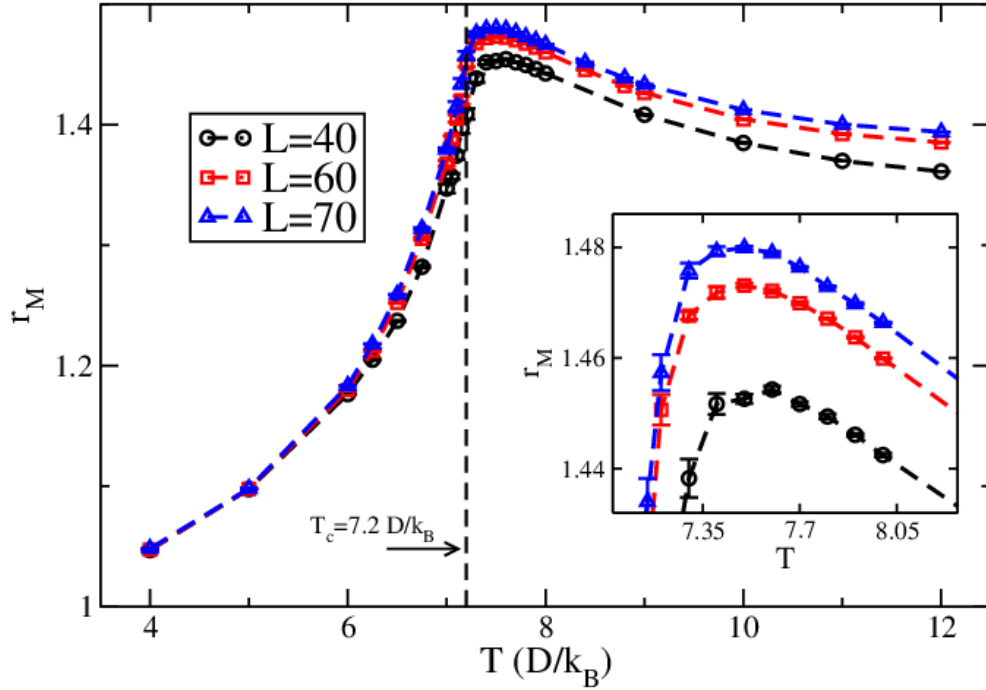


Figura 5.4: Separação média das cargas que formam um par como função da temperatura. Observe que r_M exibe seu máximo próximo da $T_c = 7,2D/k_B$. O Inset mostra com maiores detalhes a região onde ocorre o máximo.

A separação média r_M possui um máximo global em temperaturas muito próximas de T_c , na qual o calor específico exibe um pico. Analisando o inset da Figura 5.4, que mostra com maiores detalhes a região em que ocorre o máximo de r_M , percebe-se que a amplitude máxima da separação média entre as cargas de um par cresce muito lentamente com o aumento do tamanho da rede. De fato, procedendo de forma similar com o que foi feito para obter C_{max} , foi construído um gráfico da amplitude máxima (d_{max}) da separação média r_M como função do tamanho da rede, sendo observado que d_{max} cresce logaritmicamente com o tamanho do sistema ($d_{max} \propto \ln L$), conforme mostra a figura 5.5.

Dessa forma, pode-se então esperar que uma certa quantidade de monopolos esteja praticamente isolada para redes grandes. A figura 5.6 mostra a distribuição $P(d)$ em função da distância média d (entre um par de cargas) obtido para rede de tamanho $L = 80$ a, em três temperaturas distintas: $T = 6,0 D/k_B$, $T = 7,6 D/k_B$ e

5. Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais

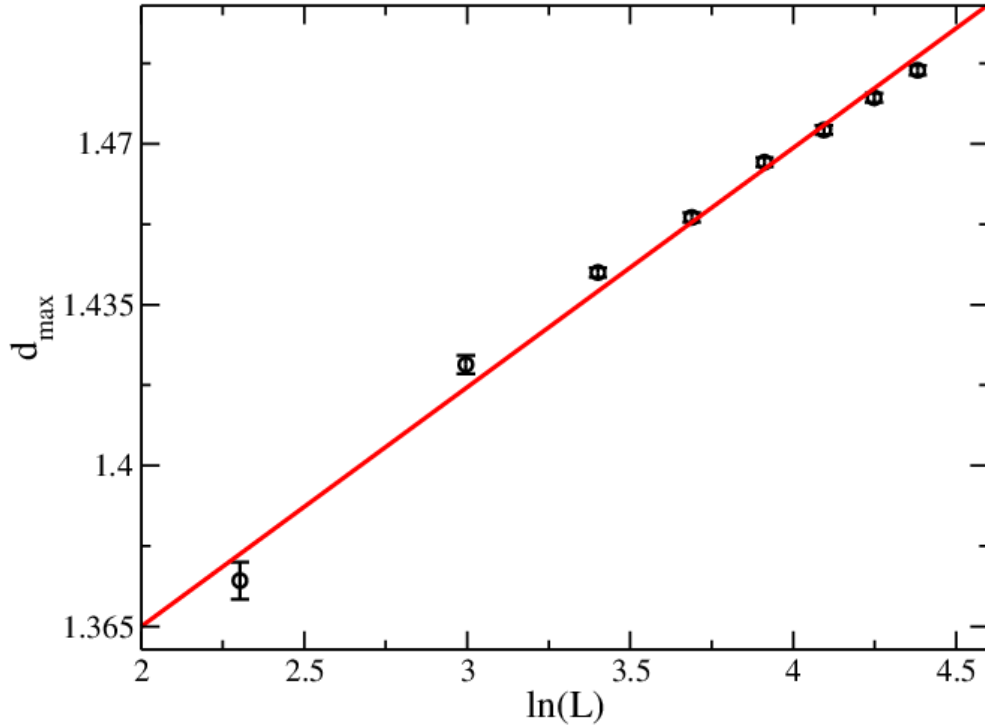


Figura 5.5: Máximo da separação média d_{\max} entre duas cargas que formam um par cresce com o logaritmo do tamanho da rede.

$T = 11,0 D/k_B$. Cada valor de d no gráfico representa a separação média entre os pares de cargas simples de uma dada configuração visitada, fixada uma temperatura. Observe que para $T \geq T_c$, a distribuição de distâncias varia muito pouco em torno do valor médio (r_M). Para $T < T_c$, existem algumas poucas configurações que possuem $d > r_M$, que podem ser entendido ao se levar em conta a baixa densidade de cargas que surge nesse regime: existem muitos vértices disponíveis (descarregados) para serem ocupados por essas cargas, que são excitadas termicamente. No entanto esses estados são metaestáveis, pois nessa faixa de temperatura o sistema não dispõe de energia suficiente para manter as cargas separadas de distâncias relativamente longas. À medida em que a temperatura aumenta, a distribuição $P(d)$ também aumenta, entretanto é observado pouquíssimas configurações exibindo $d \approx 1,7a$. Nesse regime de temperaturas, a densidade de cargas é muito alta de forma que o sistema fica robusto (ou preso).

A Figura 5.7(a) mostra uma configuração de equilíbrio típica gerada para uma rede de tamanho $L = 10a$ numa temperatura abaixo de T_c ($T = 6 D/k_B$). Nessa figura, os círculos pretos representam cargas positivas enquanto os círculos vermelhos

5. Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais

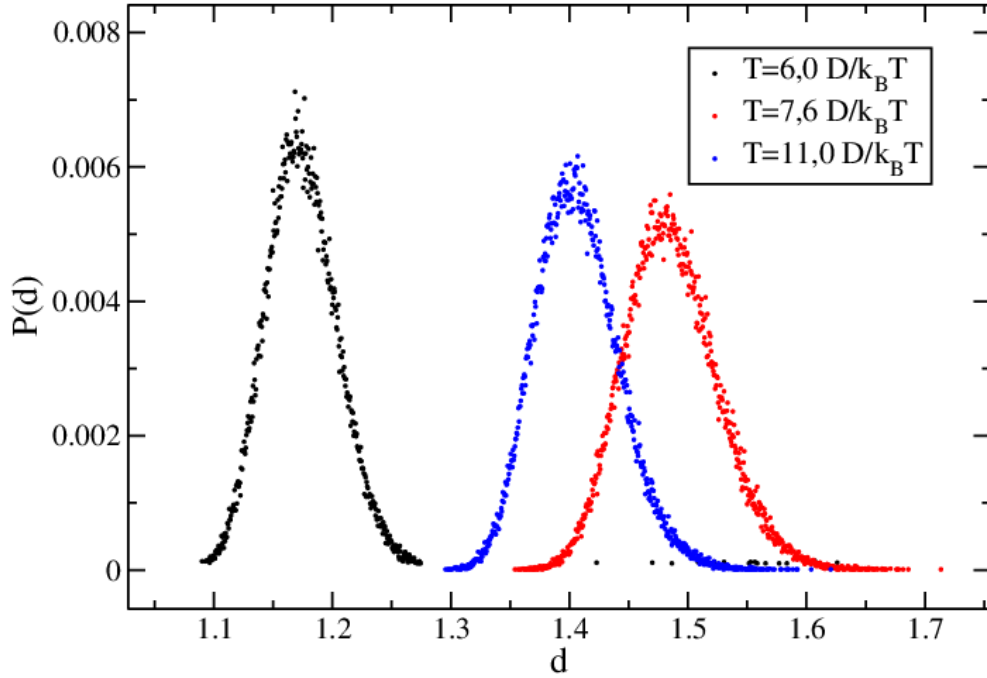


Figura 5.6: Distribuição de separação de cargas como função da separação média (entre os pares) por configuração.

cargas negativas. Observe que, nessa temperatura, existem poucas excitações e todos os monopolos com cargas opostas estão acoplados ao seu respectivo par por uma corda que os une. Por outro lado, a Figura 5.7(b) mostra o mesmo sistema para uma temperatura acima de T_c ($T = 7,6 D/k_B$) e, nesse caso, podem ser observados um pequeno número de monopolos que não estão conectados por suas respectivas cordas. Em princípio, essas excitações estão livres, apesar de algumas delas não estarem completamente isoladas, isto é, longe de outro polo com carga oposta. Outra característica do sistema em temperaturas $T > T_c$ é a existência de algumas cordas soltas, isto é, cordas que não terminam em monopolos, estando dispersas ao longo do sistema. Apenas lembrando, as cordas são excitações compostas por vértices que se encontram na topologia T_2 .

Embora as Figuras 5.7 representem apenas uma configuração de um número muito grande de amostras, as características apresentadas na Figura 5.7(a) para temperaturas abaixo de T_c , bem como as características da Figura 5.7(b), para $T > T_c$, continuam sendo observadas na maioria das amostras, podendo ser consideradas representativas do sistema.

5. Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais

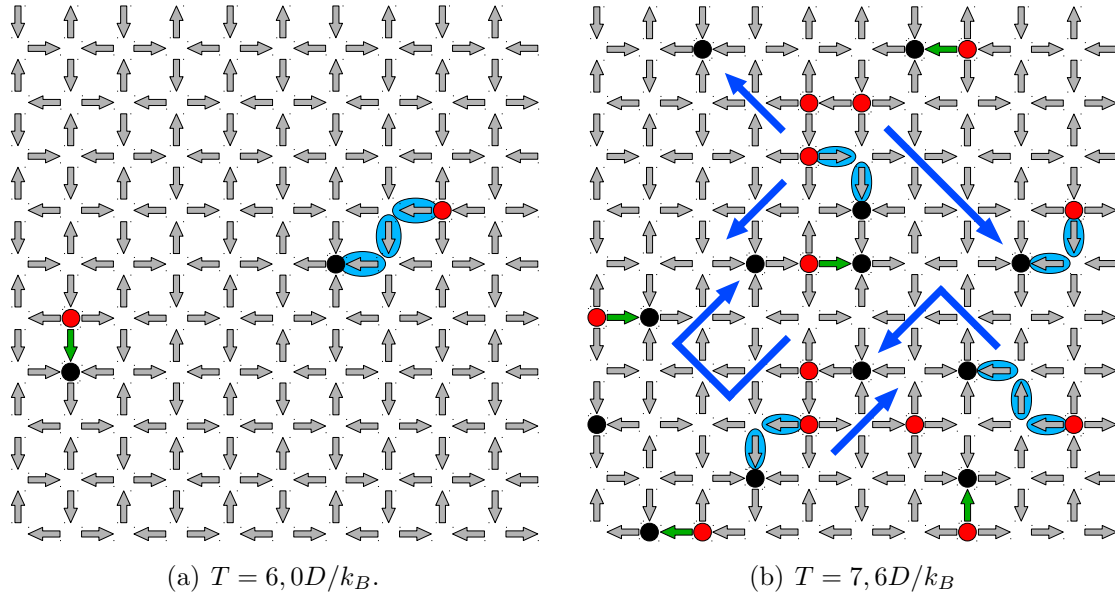


Figura 5.7: Instânteneos de duas configurações particulares de excitações em diferentes temperaturas em uma rede com $L = 10a$. Os círculos vermelhos representam cargas negativas e os círculos pretos cargas positivas. As setas em azul mostram cordas livres, isto é, cordas que não estão conectando um par de cargas magnéticas opostas. Também foram ilustrados alguns pares de cargas ligados por suas respectivas cordas (elipses destacadas em azul e spins verdes).

Todo esse quadro é melhor compreendido ao se considerar o comportamento do sistema no limite termodinâmico. Nesse caso, os monopolos estariam infinitamente separados (em média) de seus pares para temperaturas $T > 7,2D/k_B$. Como a temperatura é aumentada a partir de $T = 0$, a densidade de pares de monopolos cresce simultaneamente com o aumento da separação média. À medida em que a densidade de pares aumenta, o número de vértices disponíveis para se criar novos pares, bem como o número de vértices acessíveis para as cargas já existentes se moverem diminui e, dessa forma, a distância média entre as cargas que formam um par (r_M) diminui para temperaturas altas. Observe, na Figura 5.4, que para $T < T_c$ não existe uma dependência de r_M com o tamanho da rede enquanto, para $T > T_c$, r_M apresenta uma dependência muito pequena com L . Nesse caso, é possível inferir que alguns monopolos estejam completamente isolados quando $L \rightarrow \infty$, mesmo em um regime de temperaturas altas.

Os resultados obtidos aqui, quando extrapolados para sistemas infinitos, corroboram os resultados teóricos apontados por L. Mól e colaboradores [82], já discutidos

5. Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais

no capítulo 3, em que os autores prevêm a existência de uma fase com monopolos isolados nos gelos de spin artificiais na geometria quadrada, numa temperatura estimada em $T \approx 9,1 D/k_B$. No entanto, a temperatura obtida nas simulações ($T_c \approx 7,2 D/k_B$) é menor que a estimada no trabalho de L. Mól *et al.* Todavia, argumentos baseados em energia/entropia geralmente costumam superestimar a quantidade correta, o que já era de conhecimento dos autores do referido trabalho.

A divergência de r_M pode ser entendida de duas maneiras: pode estar associada com o anulamento da tensão da corda, levando ao quadro de monopolos livres ou, estaria relacionada com a divergência do comprimento de correlação que, em uma transição do tipo ordem-desordem (semelhante à que ocorre no modelo de Ising), diverge na temperatura crítica. Como, nesse caso, r_M pode ser escrito em termos do comprimento de correlação, também irá divergir em $T = T_c$. Assim, os resultados obtidos apontam para a existência de uma transição de fase, faltando agora entender qual seria a natureza dessa transição. Infelizmente, os resultados apresentados aqui não são suficientes para responder essa questão, sendo ainda necessários muitos cálculos para respondê-la.

Por outro lado, a divergência de r_M no limite termodinâmico, e então uma fase com uma separação entre cargas, pode não ser esperada em sistemas finitos. Para efeitos práticos, extrapolando os resultados para uma rede bidimensional contendo $N_a^{2/3} = 10^{16}$ ilhas (em que N_a é o número de Avogadro em duas dimensões) implica em $d_{\max} \approx 2,5 a$. Entretanto, mesmo em redes pequenas, alguns monopolos podem se tornar isolados próximos de $T_c = 7,2 D/k_B$. O desafio de se construir redes utilizando novos materiais (com temperatura de ordenamento próxima da temperatura ambiente) e/ou redução do volume da ilha e conseqüentemente aumento do tamanho da rede são importantes pesquisas nessa área visando aplicações tecnológicas, como por exemplo, a obtenção da chamada “*magnetricidade*” e a construção de toda uma tecnologia que utiliza essa corrente de monopolos.

Agora é interessante notar que existem trabalhos defendendo o uso do modelo de 16 vértices [(MDV) “sixteen vertex model”] para descrição dos GSA [112]. Na rede quadrada o MDV possui solução exata e, de fato, a descrição da dinâmica de vértices

5. Termodinâmica dos Gelos de Spin Artificiais

via MDV está de acordo com as observações experimentais. No entanto, devido ao fato da interação de curto alcance e a simetria deste modelo serem diferentes da interação dipolar entre as nanoilhas, assumidas nesse trabalho, não se espera observar o mesmo comportamento crítico nos gelos de spin. Para exemplificar, foram feitas simulações restringindo o alcance da interação dipolar entre as ilhas apenas para primeiros vizinhos. Foi observado que os vértices que estão na topologia T_3 permanecem conectados por cordas, mas agora não existe a interação coulombiana entre esses vértices, ou seja, a descrição das excitações em termos de monopolos magnéticos é perdida. A interação entre dois vértices T_3 opostos é, agora, dado por $V(r) = b_I X(r) + c_I$, em que $b_I = 26 D/a$, está relacionada com a tensão da corda ($X(r)$ é comprimento da corda) e $c_I = 34 D$ está associado com a energia de criação de um par de vértices com topologia T_3 . Observe que esses resultados são muito maiores que os resultados encontrados quando se leva em conta a natureza de longo alcance da interação dipolar. Todos cálculos para a termodinâmica apresentados aqui foram repetidos e os resultados são qualitativamente os mesmos descritos anteriormente, mas com um aumento na escala de energia. Por exemplo, o valor da temperatura na qual o calor específico, a separação média entre pares apresentam um máximo é agora $T = 16 D/k_B$. Contudo, muitos estudos ainda são necessários para averiguar a possibilidade de se utilizar modelos extremamente efetivos, como o MDV, como uma alternativa para a descrição dos GSA, substituindo a interação dipolar entre as nanoilhas por uma interação local, pois parte da interação do sistema original é perdida nessa simplificação.

Estes resultados foram publicados em um fascículo especial da revista *New Journal of Physics* (Focus issue on Artificial Frustrated Systems) em 2012 [113].

Capítulo 6

Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais

Os gelos de spin artificiais são produzidos através de técnicas litográficas, de modo que nem sempre é possível fabricar uma rede homogênea, ou seja, livre de imperfeições. É muito comum, durante o processo de fabricação, alguma ilha ficar deformada, devido às limitações das técnicas utilizadas, e uma descrição teórica que leva em conta esse tipo de defeito não intencional se faz necessária. Por outro lado, existe a possibilidade de se construir uma malha de ilhas em que os defeitos sejam intencionais como, por exemplo, o caso em que uma ilha esteja ausente em um determinado sítio da rede. Em geral, o estudo de sistemas com defeitos estruturais revela uma série de novos fenômenos com possibilidades reais de aplicações tecnológicas [2,3,114–116].

Embora o sistema real possua um grande número de defeitos estruturais, o principal objetivo agora é estudar a influência que uma única ilha malformada (maior ou menor que as demais nanoilhas da rede) exerce sobre as excitações magnéticas nos gelos de spin artificiais. A figura 6.1 mostra uma imagem típica de MEV (microscopia eletrônica de varredura) de uma malha quadrada dos gelos de spin. Observe as deformações no tamanho das ilhas bem como a ausência de algumas delas na rede.

Novamente, a aproximação de dipolos pontuais será utilizada. Entretanto, em um sítio particular da rede, denotada por l , a ilha é “malformada”, podendo ser maior

6. Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais

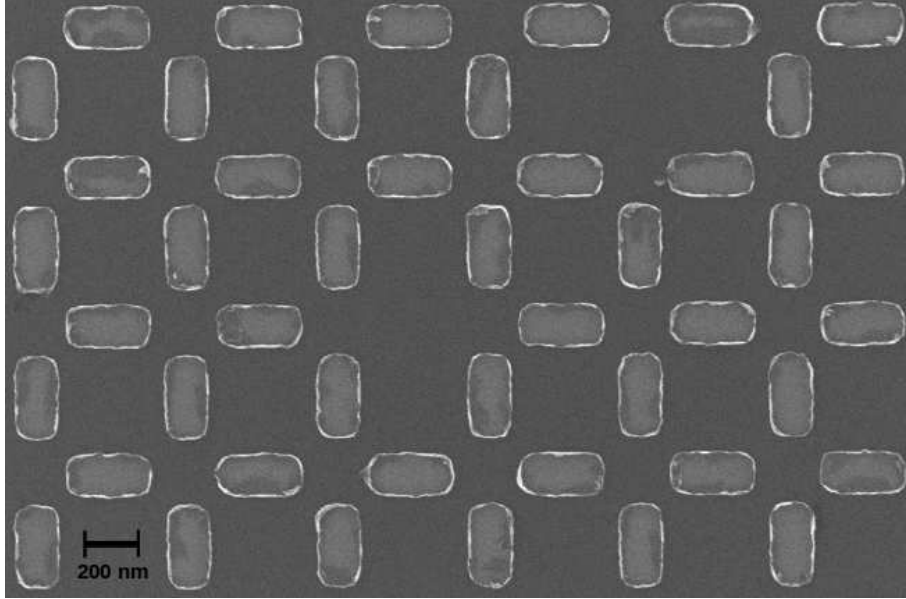


Figura 6.1: Imagem de espectroscopia eletrônica de varredura, MEV, de uma amostra de gelo de spin na geometria quadrada. Observe a diferença no tamanho das nanoilhas bem como a ausência de algumas na rede.

ou menor que as demais. No modelo utilizado, a deformação da ilha é incluída em seu momento magnético, que é proporcional a seu volume. Nos cálculos apresentados, o valor do momento magnético da ilha malformada varia no intervalo $0 \leq S_l \leq 2$.

O estado fundamental foi encontrado utilizando o processo conhecido como “*simulated annealing*”, que consiste basicamente de um processo de Monte Carlo em que a temperatura do sistema é reduzida gradualmente em cada passo do processo, sendo possível determinar a configuração em que a energia é mínima. O estado final observado é o mesmo obtido em simulações para uma rede normal [82], ilustrado na Figura 6.2, com todos os vértices estando na topologia T_1 . No entanto, sobre os dois vértices adjacentes em que a ilha deformada se encontra têm-se um momento magnético líquido não nulo devido ao desbalanço causado pelo defeito, uma vez que seu spin é menor (ou maior) que o momento magnético dos outros três spins que compõem o vértice (ver Figura 6.2).

O principal objetivo é verificar se as excitações elementares, os monopolos magnéticos de Nambu e suas cordas, interagem de alguma forma com a nanoilha deformada. Para isso, pretende-se analisar o efeito causado pelo defeito sobre o potencial de

6. Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais

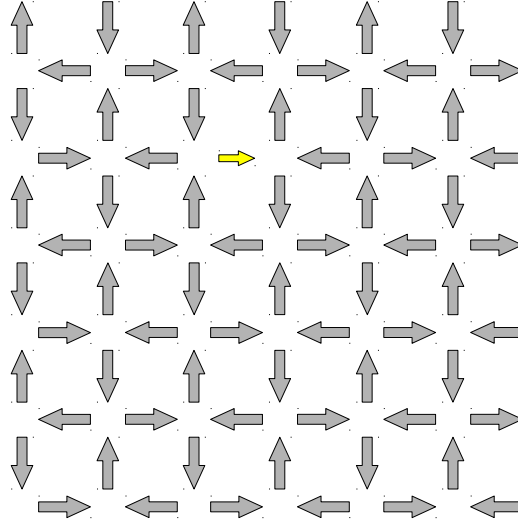


Figura 6.2: Estado fundamental obtido para uma rede $L = 6a$. O spin em amarelo indica a posição da ilha defeituosa que, nesse caso, é menor que as demais ilhas da rede.

interação entre cargas, verificando a existência desta interação. O procedimento utilizado para obter o potencial de interação é muito similar ao feito por L. Mól, *et al* [82]: partindo do estado fundamental, um par de cargas é criado e separado repetindo-se o padrão de cordas I e II (setas brancas na Figura 6.3). A energia de cada passo é calculada e, em seguida, subtrai-se a energia do estado fundamental, restando apenas a energia potencial de interação excitações-defeito (V_D) de cada configuração. A Figura 6.3 ilustra o processo de separação de cargas usando as cordas I e II. Os spins destacados em azul indicam o local por onde uma carga passou. Os números 1 e 2 indicam a posição dos monopolos magnéticos de Nambu, com cargas $-Q_m$ e Q_m enquanto os números 3 e 4 indicam a posição dos vértices em que a ilha deformada, representada pela seta em amarelo, se encontra. Por simplicidade, durante o processo de separação, a carga 2 sempre é mantida fixa, enquanto a posição de carga 1 é alterada. Naturalmente, as posições 3 e 4 não mudam ao longo das simulações, uma vez que o defeito é estático.

A Figura 6.4 mostra o potencial de interação excitações-defeito para uma rede de tamanho $L = 80a$. Nesse caso, $S_l = 0$, ou seja, o sistema possui uma vacância. Os círculos preto indicam os pontos obtidos na simulação, enquanto a linha pontilhada em vermelho representa o potencial de interação entre cargas obtido para um sistema sem

6. Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais

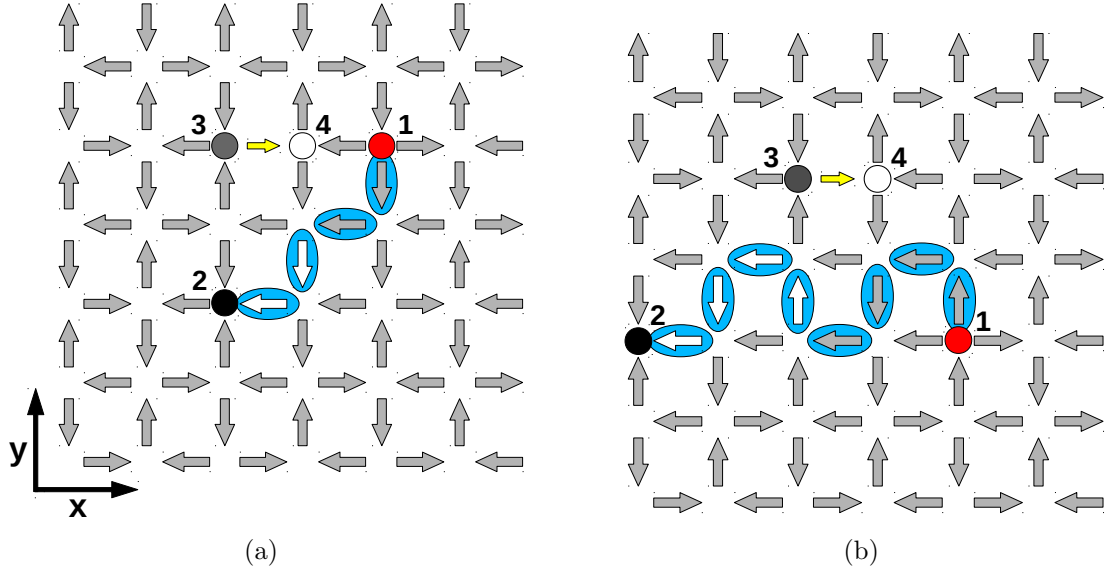


Figura 6.3: Processo de separação de cargas em uma rede, de tamanho $L = 6a$, com uma ilha malformada seguindo dois tipos de cordas: (a) corda I e (b) corda II.

defeitos estruturais. Em uma primeira análise, o potencial de interação de cargas é praticamente inalterado quando o sistema apresenta apenas um defeito. Para analisar melhor o efeito de uma ilha malformada no sistema calculou-se $\Delta = V_D(R) - V_N(R)$, em que $V_N(R)$ é o potencial obtido em uma rede sem defeitos estruturais. Dessa forma, Δ representa a energia de interação entre o par de monopolos magnéticos, sua corda e o defeito estrutural. Assumindo que o efeito da adição de um defeito estrutural na rede seja de induzir um par de cargas magnéticas opostas localizadas nos vértices adjacentes ao defeito (representados pelos círculos branco e cinza da Figura 6.3) e desconsiderando, por enquanto, a interação entre a corda e o defeito, o problema se reduz à interação entre quatro cargas magnéticas. A energia de interação desse sistema é, então, dada por:

$$E_{int} = \frac{\mu_0}{4\pi} Q_d Q_m \left[\frac{1}{|\vec{r}_{13}|} - \frac{1}{|\vec{r}_{14}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{24}|} - \frac{1}{|\vec{r}_{23}|} \right]. \quad (6.1)$$

em que Q_d é o módulo da carga induzida pelo defeito, \vec{r}_{ij} é a distância do vértice i ao vértice j . Observe que a interação entre as cargas 1 e 2 bem como a interação entre as cargas 3 e 4 foram omitidas. A interação entre as as cargas 1 e 2 é calculada em $V_N(R)$ e quando $\Delta = V_D(R) - V_N(R)$ é calculado, esse termo é perdido. O mesmo

6. Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais

acontece para a interação das cargas induzidas pelo defeito: elas estão presentes mesmo no estado fundamental do sistema e quando $V_D(R)$ é calculado, tal interação é perdida.

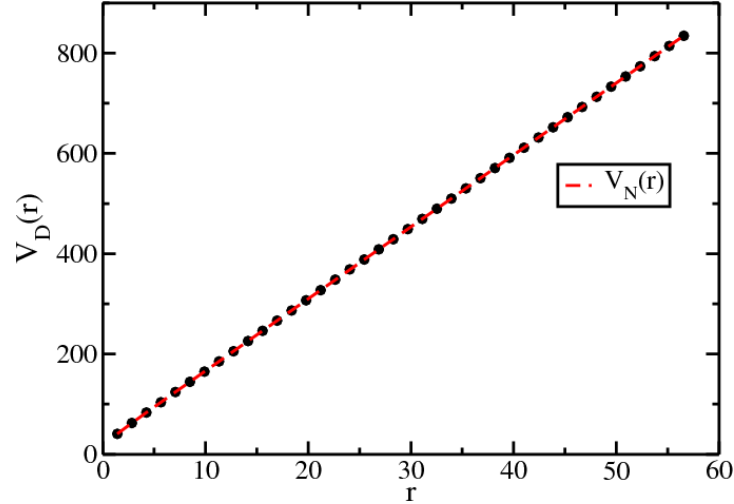


Figura 6.4: Os círculos pretos representam o potencial de interação V_D como função $r = R/a$ obtido em uma rede de tamanho $L = 80a$ com uma vacância ($S_l = 0$). A linha tracejada vermelha representa o potencial de interação entre cargas obtidas para uma rede sem defeitos estruturais.

A interação entre as cargas induzidas pelo defeito e a corda, criada durante o processo de separação dos monopólos de Nambu 1 e 2, é bastante complicada, de forma que calcular/obter uma expressão analítica para essa interação não é uma tarefa trivial. Contudo, é possível escrever uma expressão geral para Δ , utilizando 6.1 e adicionando um termo *ad hoc* que estaria associado à interação corda-defeito. Assim sendo, Δ fica:

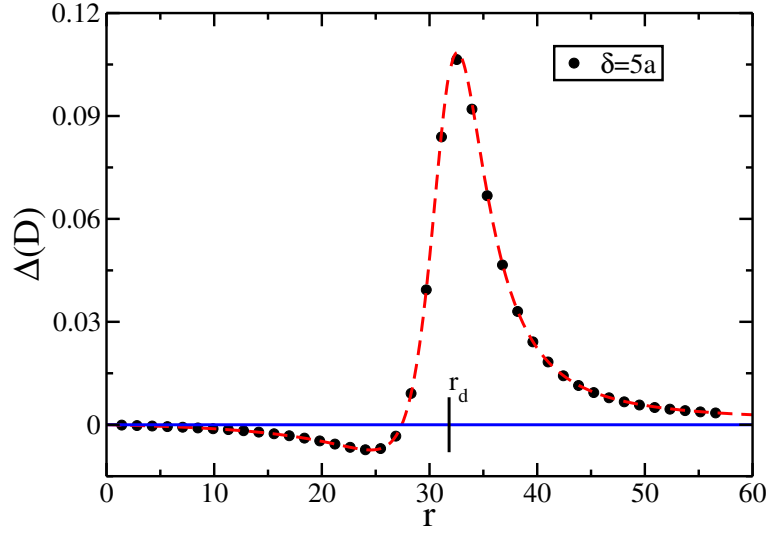
$$\Delta = K_1 \left[\frac{1}{|\vec{r}_{13}|} - \frac{1}{|\vec{r}_{14}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{24}|} - \frac{1}{|\vec{r}_{23}|} \right] + K_2 \Theta(\vec{r}_d \cdot \hat{r}_1 - |\vec{r}_1|), \quad (6.2)$$

em que

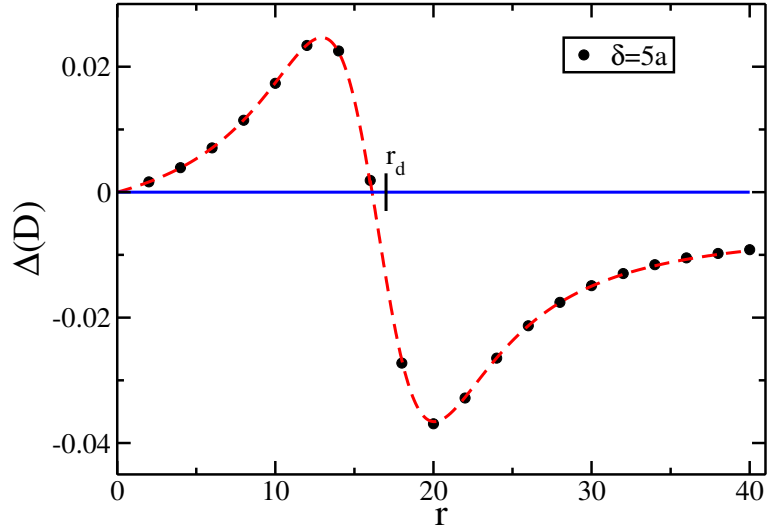
$$K_1 = \frac{\mu_0}{4\pi} Q_d Q_m,$$

e K_2 são constantes que devem ser determinadas, $\Theta(z)$ é a função degrau unitário [$\Theta(z) = 1$, para $z > 0$ e $\Theta(z) = 0$, para $z < 0$], \vec{r}_d é a posição do defeito e \vec{r}_1 é distância do defeito a carga 1. Como já dito anteriormente, o primeiro termo da equação 6.2 é simplesmente a energia de interação coulombiana entre as quatro cargas e o segundo termo representa a interação entre a corda e o defeito e será discutido adiante.

6. Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais



(a) Corda I



(b) Corda II

Figura 6.5: Dados obtidos via simulação (círculos pretos) para Δ como função de $r = R/a$ considerando (a) uma corda do tipo I e (b) uma corda do tipo II. Na figura a menor distância entre o monopolo 1 e o defeito é $\delta = 5a$. Nesse caso, o defeito é uma vacância, $S_l = 0$. A linha tracejada em vermelho indica a regressão não-linear feita sobre os pontos usando a expressão 6.2.

A Figura 6.5 mostra o potencial Δ como função da separação entre as cargas 1 e 2, usando cordas dos tipos I e II. Na figura, o momento de dipolo da ilha deformada utilizado foi $S_l = 0$, ou seja, o sistema foi construído com uma vacância. Os resultados apresentados foram obtidos para uma rede de tamanho $L = 80a$ (com 12800 spins). No entanto, foram analisadas redes com tamanhos variando no intervalo $10a \leq L \leq 80a$

6. Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais

todas elas exibindo resultados muito similares aos apresentados aqui.

Na figura 6.5, a menor distância entre o monopolo 1 e o defeito é $\delta = 5a$. δ é definido como a distância entre a linha que une os monopolos 1 e 2 e a ilha defeituosa. Note que para os tipos de cordas adotados aqui, essa medida coincide com a menor distância entre a corda e o defeito. A linha tracejada em vermelho mostra a regressão não-linear usando a expressão 6.2 feita sobre os pontos obtidos na simulação. Como, nesse caso, δ é relativamente grande, foi observado que a interação entre a corda e o defeito é muito pequena, podendo ser desprezada e, dessa forma, $K_2 = 0$. O mesmo comportamento é observado para qualquer $\delta \geq 2a$. Neste regime é interessante observar que a interação efetiva entre as excitações que aparecem no sistema e o defeito é puramente coulombiano. Resultados semelhantes foram observados para $0 \leq S_l \leq 2$ e $\delta \geq 2a$.

Assim, os resultados indicam que a ilha defeituosa se comporta como um par de cargas separados por um espaçamento de rede, de acordo com as suposições iniciais. Os máximos e mínimos da Figura 6.5 podem ser entendidos considerando a atração ou repulsão coulombiana entre o monopolo de Nambu 1 e as cargas induzidas pelo defeito. Observe que o potencial é atrativo ou repulsivo dependendo da proximidade da carga 1 com as cargas 3 e 4.

Os valores da constante K_1 , obtidos via ajuste não-linear, como função do tamanho do spin da ilha malformada (S_l) são mostrado na Figura 6.6. Os dados apresentados foram obtidos utilizando a corda I. O mesmo comportamento foi observado para a corda II. A linha tracejada em vermelho representa um ajuste linear feito sobre os pontos. Para $S_l = 0$, os resultados indicam que $K_1 \approx 2Da$ e, a partir dessa quantidade, pode-se estimar o módulo da carga magnética induzida pelo defeito (Q_d) de rede que, nesse caso, trata-se de uma vacância. Dessa forma:

$$\begin{aligned} Q_d &= \frac{4\pi K_1}{\mu_0 Q_m} Da \\ &= \frac{\mu K_1}{a Q_m}, \end{aligned}$$

6. Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais

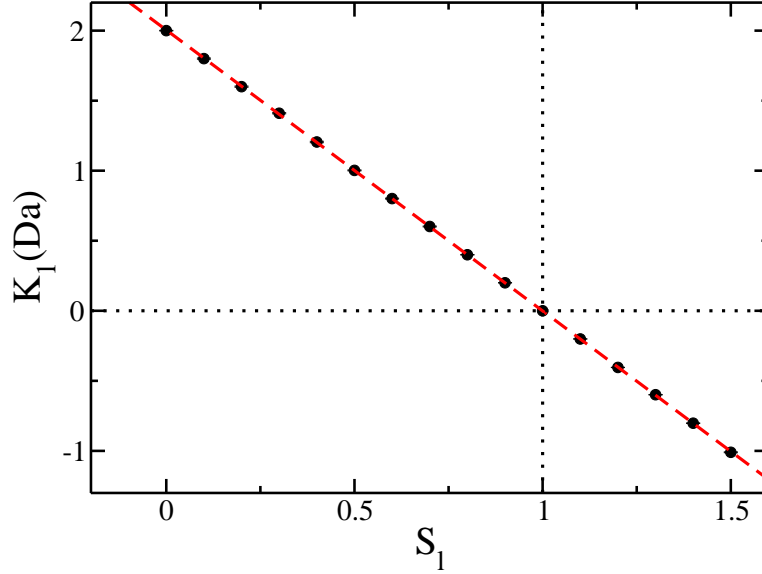


Figura 6.6: Valores obtidos para K_1 como função do tamanho do momento de dipolo da ilha malformada. Observe o comportamento linear de K_1 à medida que S_l aumenta. A linha tracejada em vermelho representa um ajuste linear feito sobre os dados.

em que $Q_m \approx 2\sqrt{2}\mu/a$ é o módulo da carga magnética obtida em uma rede sem defeitos estruturais. Logo, para o caso em que o sistema possui uma vacância, $Q_d \approx \sqrt{2}\mu/a = Q_m/2$. Esse resultado era esperado, uma vez que a topologia dos spins nos vértices adjacentes ao defeito são um arranjo do tipo dois spins entrando e um saindo (ou o contrário), facilmente suportado pelo modelo de halter proposto por Castelnovo *et al* [17].

Ainda na Figura 6.6, observe que a magnitude de K_1 diminui à medida que S_l aumenta, anulando-se, como esperado, para $S_l = 1$. Para $S_l > 1$, K_1 muda de sinal, indicando uma inversão na posição das cargas positivas e negativas induzidas pela presença da ilha defeituosa, como é mostrado na Figura 6.7. Na figura, o círculo cinza representa a carga negativa induzida pela ilha defeituosa enquanto o círculo branco representa a carga positiva. A mudança na posição das cargas pode ser facilmente entendida/observada ao se levar em conta o momento magnético líquido (seta vermelha) sobre os vértices onde está localizada a ilha deformada: em 6.7a, a nanoilha é menor que as outras ilhas que compõem o vértice, de forma que existe um momento magnético

6. Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais

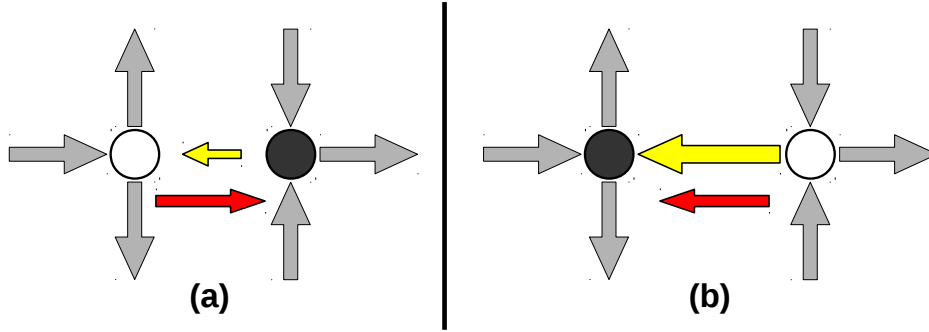


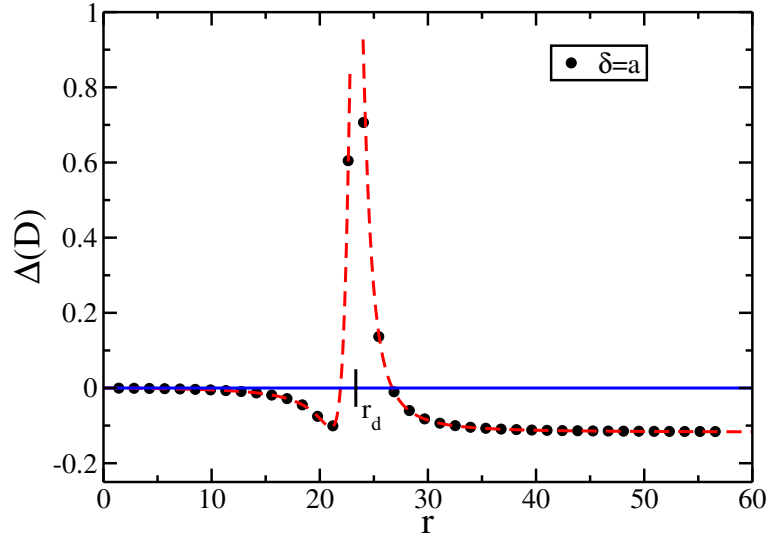
Figura 6.7: Mudança de posição das cargas induzidas pelo defeito estrutural. O momento magnético da ilha deformada em (a) é menor e em (b) é maior que as demais nanoilhas. Os círculos branco e cinza representam, respectivamente, as cargas negativa e positiva induzidas pelo defeito. A seta em vermelho ilustra a existência de um momento magnético líquido nos vértices adjacentes ao defeito estrutural. Observe que o momento magnético líquido é não nulo mesmo se a configuração dos spins no vértice seguir a topologia T_1 .

líquido resultante (seta em vermelho) apontando da esquerda para direita. Quando a ilha deformada é maior que as demais, o momento magnético resultante tem seu sentido invertido, indicando uma mudança na posição das cargas induzidas pela ilha defeituosa.

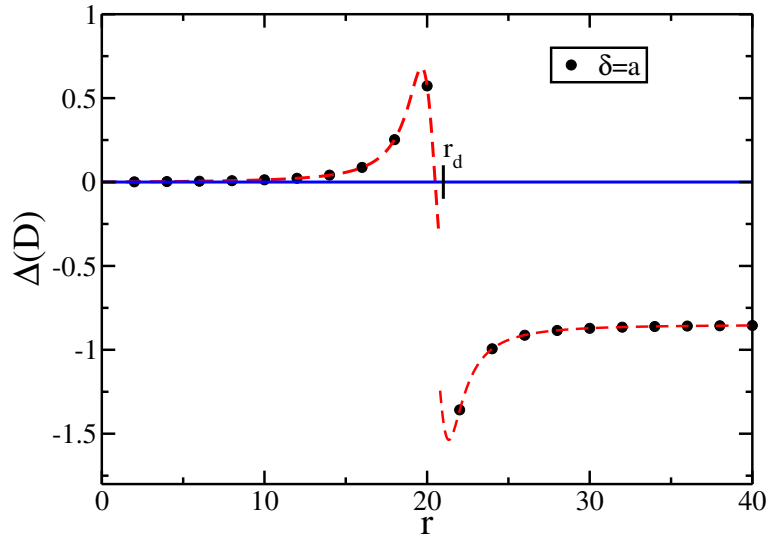
Até agora os resultados apresentados foram obtidos $\delta \geq 2a$. No entanto, quando a distância entre o monopolo 1 e a ilha defeituosa é inferior a $2a$ (da ordem de um espaçamento de rede) pode-se notar uma clara diferença no potencial de interação, como mostra a Figura 6.8. Para valores grandes de r observe que Δ tende a um valor constante enquanto, na figura 6.5, Δ tende a zero. Esse comportamento é atribuído a interação entre a corda e o defeito. Espera-se que a corda interaja apenas com objetos muito próximos, pois para $\delta \geq 2a$ não foram observados quaisquer assinaturas dessa interação.

Para verificar essa hipótese foram criados excitações 4O, que são obtidas invertendo todos spins em uma dada plaqueta do material. Essa excitação tem a grande vantagem de não criar cargas magnéticas, sendo basicamente uma corda fechada. Uma vez criado, o loop 4O é movido na direção da ilha defeituosa e, de maneira similar ao processo de separação de cargas descrito anteriormente, pode-se calcular a energia de interação do loop-defeito como função de sua separação. A Figura 6.9 mostra o processo de separação e consequentemente o afastamento do loop 4O do defeito estrutural, que no caso é uma vacância.

6. Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais



(a) Corda I



(b) Corda II

Figura 6.8: Dados obtidos via simulação (círculos pretos) para Δ como função de $r = R/a$ considerando (a) uma corda do tipo I e (b) uma corda do tipo II, $\delta = 1a$ e $S_l = 0$. A linha tracejada em vermelho indica a regressão não-linear feita sobre os pontos usando a expressão 6.2.

A Figura 6.10 mostra o potencial de interação loop-defeito, $V_{L-D}(r)$, como função de sua separação, r_{L-D} em uma rede de tamanho $L = 80a$, obtido em uma rede com uma vacância. Esse gráfico deixa claro que a excitação 4O (e consequentemente a corda) interage com as cargas induzidas pelo defeito estrutural apenas quando a excitação encontra-se muito próxima ao defeito (para $|\vec{r}_{L-D}| \approx 1a$). Para $|\vec{r}_{L-D}| > 1a$,

6. Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais

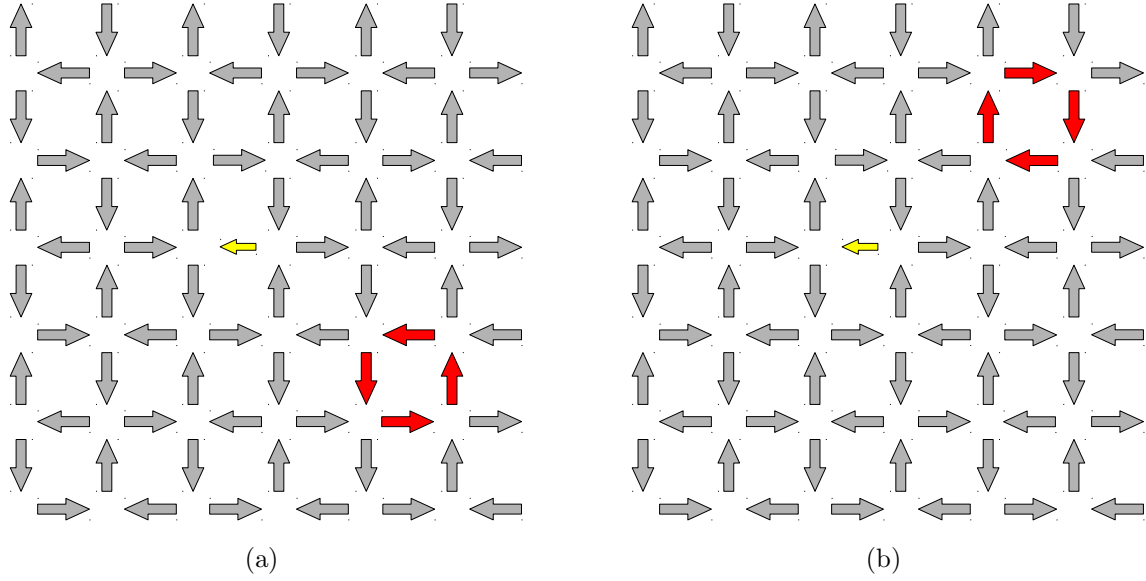


Figura 6.9: Diferentes etapas no processo de movimento de um loop 4O ao longo do sistema com uma ilha malformada.

a interação loop-defeito vai a zero, mostrando a natureza de curto alcance desta interação.

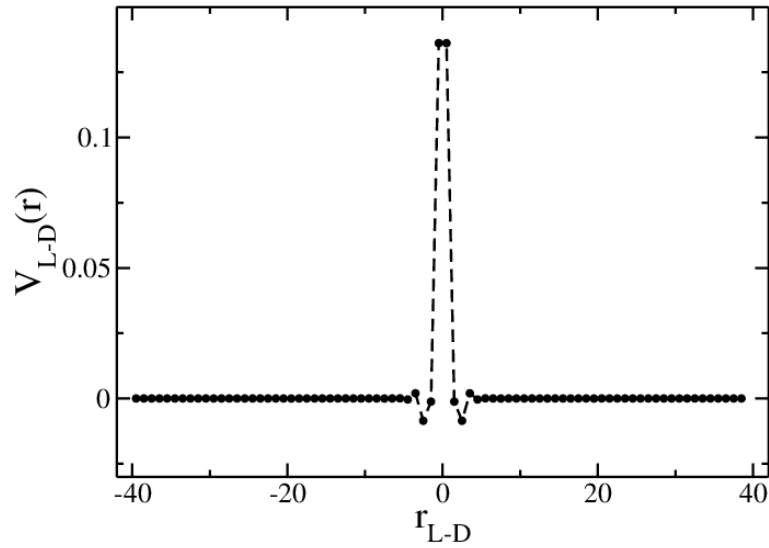


Figura 6.10: Potencial de interação entre o loop 4O e as cargas induzidas pela vacância obtidos numa rede de tamanho $L=80a$.

Desse modo, quando todas partes da corda estão distantes da ilha defeituosa, não se observa a contribuição dessa interação para a energia total. Por outro lado, se um segmento da corda encontra-se perto o suficiente da ilha deformada (acontecendo

6. Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais

para $\delta < 2a$), a interação irá ocorrer apenas entre este segmento e o defeito. E assim, o termo *ad hoc* da equação 6.2 fica, portanto, justificado.

Ainda na Figura 6.8, as curvas tracejadas vermelhas foram obtidas fazendo uma regressão não linear, utilizando a equação 6.2, de forma que para $r < r_d$, $K_2 = 0$, sendo determinado apenas o valor de K_1 . Para $r > r_d$, K_1 foi mantido constante e a regressão foi feita no restante dos pontos obtendo, dessa forma, o valor de K_2 . Na Figura 6.11 estão apresentados os valores de K_2 como função de δ . Como pode ser visto, K_2 tem valores relevantes apenas para $\delta < 3$.

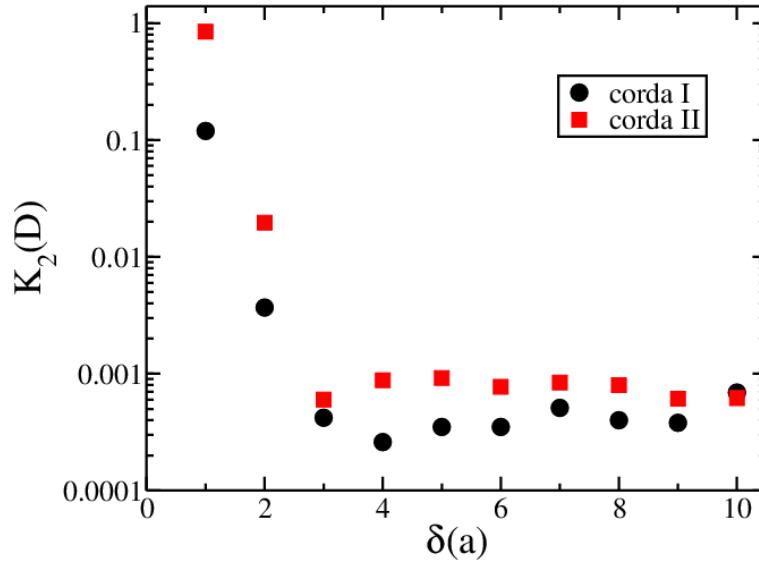


Figura 6.11: Constante de interação entre a corda e o defeito estrutural, K_2 , como função de δ . Os círculos pretos e vermelhos são os valores de K_2 obtidos na regressão para as cordas I e II, respectivamente.

Pode-se extrapolar os resultados apresentados aqui. Como foi dito anteriormente, devido as limitações das técnicas de fabricação dos GSA, dificilmente todas nanoilhas terão o mesmo volume, de forma que os momentos de dipolo de cada ilha, que dependem de seu volume, apresentarão pequenas variações. Dessa forma, cada variação do momento de dipolo leva ao surgimento de um par de cargas situadas nos vértices que delimitam a ilha. Como todos vértices de um sistema real possuem momentos magnéticos diferentes, pode-se inferir que todos eles estarão carregados, mesmo no estado fundamental do sistema. Além do mais, esses resultados reforçam o cenário de monopolos magnéticos como excitações emergentes nos GSA, apresentados na re-

6. Estudo da Inclusão de Defeitos Estruturais em Gelos de Spin Artificiais

ferência [82]. Esses resultados foram publicados em Physical Review B [117].

Conclusões e Perspectivas

Estudou-se aqui a termodinâmica dos gelos de spin artificiais na geometria quadrada e a influência de defeitos estruturais sobre o potencial de interação dos monopolos magnéticos de Nambu. Os resultados para a termodinâmica do sistema sugerem a existência de uma transição de fase, em que acima de uma dada temperatura crítica T_c , poderia estar associada a perda da tensão da corda que liga um par de monopolos. Dessa forma, pode-se esperar que essas interações estejam livres no sistema, confirmando o primeiro caso do fenômeno de fracionalização em duas dimensões espaciais. No entanto, ao calcular a separação média de um par de cargas foi verificado que essa quantidade é muito pequena, apresentando uma divergência apenas no limite termodinâmico. Mesmo assim, ao se observar as configurações geradas nas simulações para $T > T_c$ é possível encontrar cargas que não estão ligadas ao seu par, bem como observar fragmentos de cordas soltas na rede. Esse fato seria um indicativo que a transição ocorreu, entretanto os resultados apresentados não são conclusivos, de forma que mais estudos são necessários para entender natureza dessa transição de fase.

Também foi analisado o caso em que a rede é construída com um defeito estrutural, com uma nanoilha maior ou menor que as demais ilhas da rede, em um determinado vértice. Foi observado que a presença de uma ilha defeituosa induz o aparecimento de um par de cargas opostas, fixas na rede, nos vértices adjacentes a essa ilha. Os resultados mostram que as cargas e a corda interagem com o defeito, de tal forma que, quando a menor distância entre a ilha defeituosa e o monopolo/corda é maior que dois espaçamentos de rede, a interação entre a corda e o defeito de rede é desprezível. Desse modo, a interação resultante é puramente coulombiana, proveniente dos dois pares de cargas existentes no sistema. Entretanto, quando a distância entre a carga (e / ou a

Conclusões e Perspectivas

corda) e o defeito é menor que $2a$, a interação da corda com o defeito não é desprezível, de forma que apenas um pequeno fragmento da corda que se encontra suficientemente próximo da ilha defeituosa contribui efetivamente para a interação total do sistema, sendo um potencial de curto alcance.

O próximo passo na pesquisa seria verificar qual o efeito que uma certa densidade ρ de defeitos causaria na termodinâmica dos gelos de spin, especialmente sobre as cordas que ligam as cargas. Pensando em defeitos do tipo vacância, o sistema teria menos caminhos possíveis para ligar um par de cargas por cordas de mesmo comprimento X , de forma que é natural esperar que a temperatura no qual a tensão da corda se anula seria inferior a obtida nas simulações de um sistema sem imperfeições.

Outro ponto que está sendo considerado é a possibilidade de se arquitetar sistemas com propriedades específicas. Por exemplo, pode-se agora pensar em construir um capacitor operando com cargas magnéticas. Isso seria obtido construindo um sistema em que uma faixa de spins é menor (ou maior) que as outras duas. Dessa forma, a interface entre essas duas faixas estaria sempre carregada, mesmo no estado fundamental do sistema. O estudo desse tipo de sistema seria o primeiro passo para a criação de toda uma tecnologia operando na chamada *magnetricidade*, ou seja, uma corrente de cargas magnéticas.

Outro foco se encontra no estudo de novas geometrias nas quais as nanoilhas magnéticas alongadas podem ser dispostas de forma que surjam excitações coletivas que se comportem como monopolos magnéticos ligados por cordas não energética. Para isto, a estratégia é procurar por geometrias nas quais as interações entre as ilhas de um vértice são tais que todas as configurações que satisfaçam a regra do gelo, ou regra similar, tenham a mesma energia. Também é interessante explorar as propriedades estáticas e dinâmicas das diversas geometrias possíveis, pois mesmo que não existam excitações do tipo monopolo, outros fenômenos, coletivos ou não, poderiam ser de interesse prático. Ressalta-se neste ponto o fato de que já foram fabricados sistemas onde efeitos térmicos à temperatura ambiente são relevantes para o sistema [78], e que dinâmicas induzidas por campos magnéticos externos tem atraído muito interesse [74,

Conclusões e Perspectivas

118,119].

Por fim, dar continuidade a fabricação e caracterização experimental destes sistemas no país, mantendo as colaborações já existentes e buscando novas parcerias com pesquisadores experimentais. De fato, todos trabalhos experimentais em sistemas magnéticos artificiais e frustrados citados nesta tese foram feitos por grupos dos Estados Unidos e Europa. Até onde sabemos, somos o único grupo no Brasil que vem trabalhando com gelos de spin artificiais (ou pelo menos, o único a já ter publicado resultados sobre este assunto). Seria então interessante se outros grupos, especialmente experimentais, se interessassem por tal assunto de forma que uma frutífera colaboração teórico-experimental pudesse ser estabelecida e mantida.

Apêndice A

Processos de Fabricação e Caracterização dos Gelos de Spin Artificiais

O grande avanço tecnológico nas técnicas de litografia tem proporcionado a fabricação de materiais magnéticos em escalas nanométricas. As técnicas mais utilizadas são a litografia por feixe de elétrons (EBL, electron beam lithography) [120], litografia por raio X (XRL, x-ray lithography) [121] e litografia por interferência (INL, interference lithography) [122]. Na grande maioria das vezes, os GSA são produzidos utilizando litografia por feixes de elétrons. O esquema dos principais processos envolvidos nesta técnica encontra-se ilustrado na Figura A.1.

Primeiramente deposita-se resiste (um material que é sensível ao feixe de elétrons) sobre um substrato. Em geral, o resiste e o substrato mais utilizados são, respectivamente, o PMMA (polimetil-metacrilato, material termoplástico rígido e transparente, também conhecido como “vidro acrílico”) e o silício. Após o recobrimento do substrato com o resiste, a amostra é sensibilizada em algumas áreas, devido à sua exposição ao feixe de elétrons. A parte sensibilizada pode, agora, ser retirada através de um processo químico, conhecida como *revelação*. Após essas etapas, pode-se depositar o material desejado sobre a amostra, utilizando, por exemplo, técnicas de *sputtering*. Na maioria das vezes, o material utilizado é o permalloy. Na técnica de sputtering um alvo do material que se deseja depositar é bombardeado por partículas energéticas,

Apêndice A: Processos de Fabricação e Caracterização dos Géis de Spin Artificiais

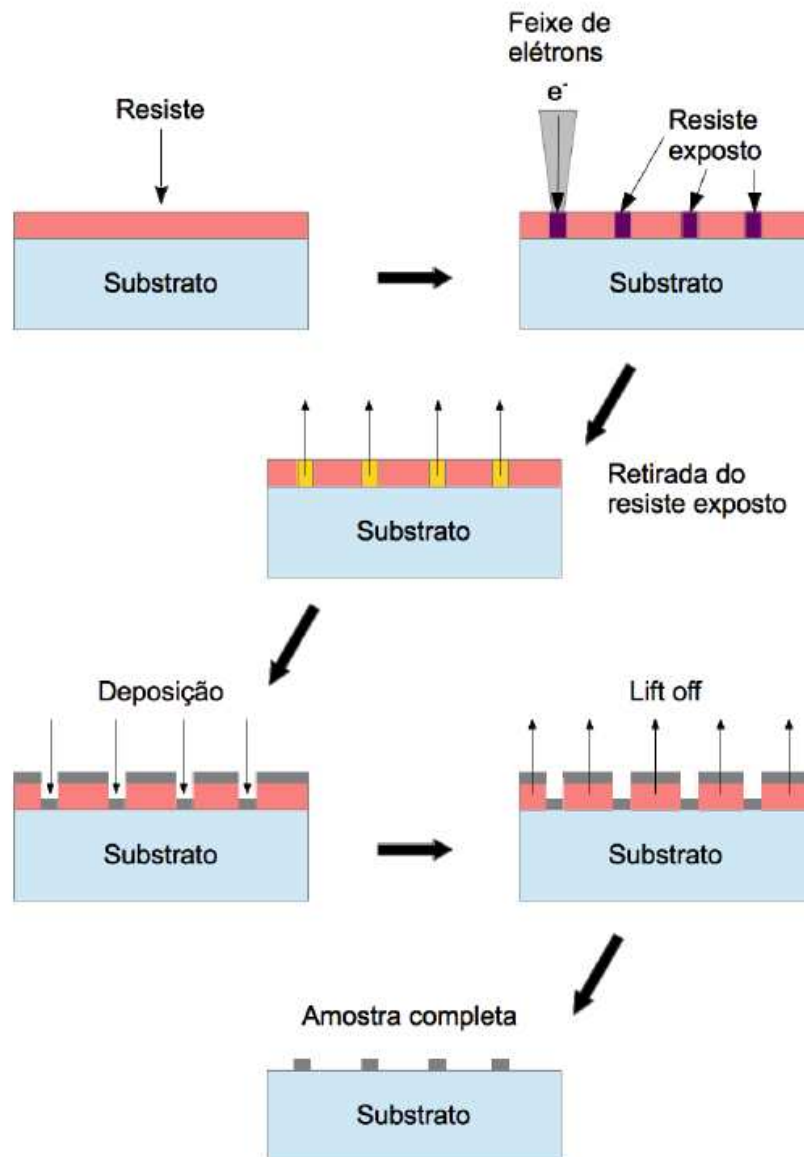


Figura A.1: Diagrama esquemático do processo de fabricação de amostras por litografia de feixe de elétrons.

fazendo com que os átomos do alvo sejam ejetados. As partículas ejetadas, ao entrarem em contato com o substrato sobre o qual se deseja fazer o crescimento são adsorvidas, criando assim uma fina camada do material sobre o substrato. Em seguida, a amostra é colocada em uma solução de uma substância na qual o resiste é solúvel, de forma que as partes que contém o resiste são retiradas da amostra, levando consigo a camada do material que foi depositada sobre ele. Este processo é denominado *lift off*. Dessa forma, ao final dessa etapa só resta o material depositado nas regiões onde o resiste

Apêndice A: Processos de Fabricação e Caracterização dos Gels de Spin Artificiais

foi retirado na revelação, como mostra a figura A.1. Assim, pode-se fabricar amostras nos mais diversos formatos geométricos, observando-se apenas o limite da resolução existente no feixe de elétrons. De maneira geral, obtêm-se resolução maior que 20 nm [123].

Tão importante quanto as técnicas de preparação das amostras dos GSA são os aparatos experimentais utilizados para a caracterização das propriedades magnéticas destas nanoestruturas. A caracterização das amostras pode ser fazendo imagens por microscopia eletrônica de varredura (MEV) para observar se as estruturas feitas pelo processo de litografia ficaram com seu formato e tamanho desejados, bem como falhas e sujeiras deixadas durante o processo de lift off. A Figura A.2 mostra algumas imagens feitas por MEV dos GSA nas geometrias quadrada linear, quadrada e triangular.

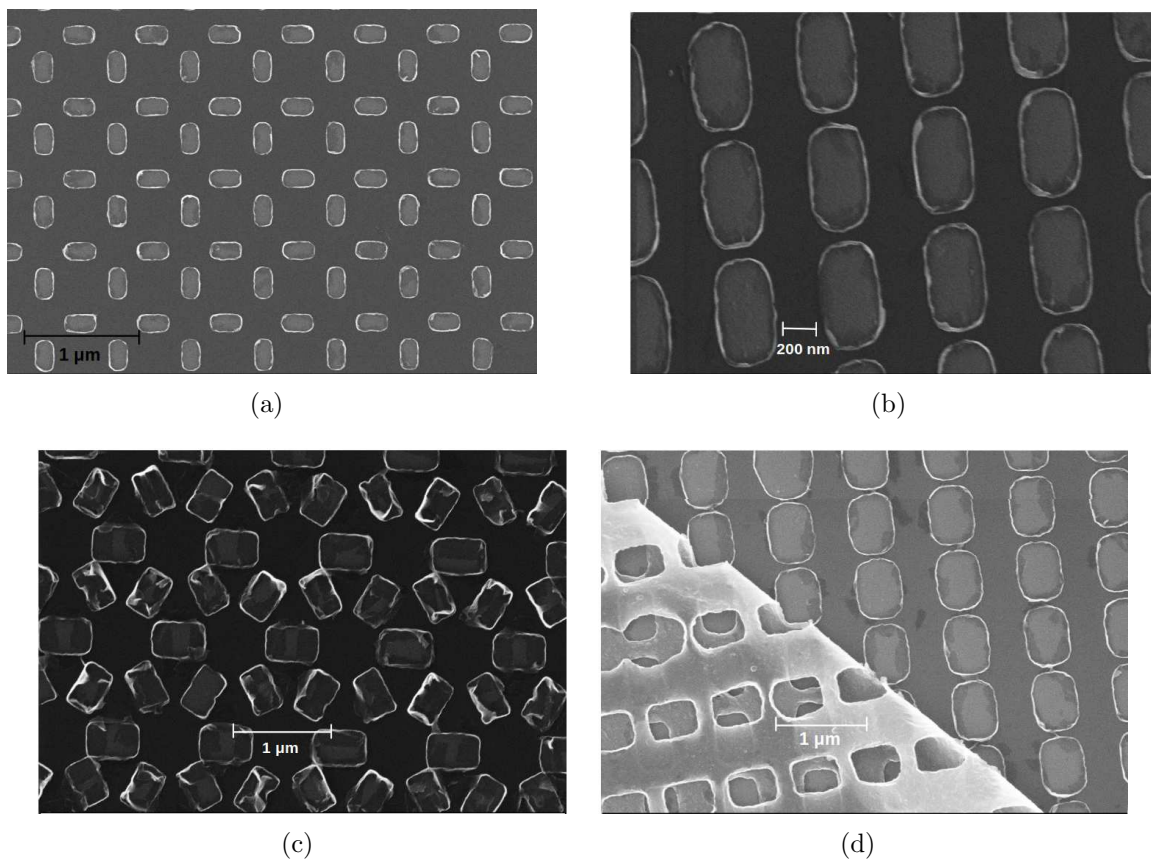


Figura A.2: Imagens feitas por microscopia eletrônica de varredura de amostras de GSA nas geometrias (a) quadrada, (b) quadrada linear e (c) triangular. Em (d) pode ser visualizado parte do resiste e do filme de permalloy que não foram completamente removidos durante o lift off, sendo dobrado sobre a amostra.

Apêndice A: Processos de Fabricação e Caracterização dos Gelos de Spin Artificiais

A caracterização das propriedades magnéticas das amostras pode ser feita utilizando-se, principalmente, duas técnicas: o efeito Kerr magneto-óptico (MOKE) e microscopia de força magnética (MFM). Nas medidas MOKE um feixe de laser é incidido sobre a amostra e, a partir da análise do estado de polarização do feixe refletido, é possível obter informações sobre a direção e a intensidade da magnetização da amostra. Esta é uma técnica amplamente conhecida e difundida que permite obter curvas de histerese com presteza e a baixo custo. A microscopia de força magnética, por outro lado, fornece informações sobre os campos magnéticos existentes na amostra em escala atômica. Esta técnica é sensível às componentes do campo magnético perpendiculares ao plano da amostra permitindo, desta forma, determinar o sentido da magnetização de cada uma das nanoilhas. Assim,, enquanto as medidas de MOKE fornecem informações sobre a amostra como um todo, ou seja, sobre o macroestado do sistema, as medidas de MFM fornecem informações sobre o microestado do sistema, permitindo uma conexão direta com os resultados teóricos.

Apêndice B

Dedução da Soma de Ewald em duas dimensões

Nesse apêndice será apresentada uma dedução para as expressões usadas nas somas de Ewald em duas dimensões espaciais [124]. Sendo assim, seja V um potencial dado por B. 1.

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{|\vec{n}|=0}^{\infty} \prime \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^{2m}} \quad (\text{B. 1})$$

em que $m = 1/2, 3/2, \dots$, $\vec{n} = L(n_x \hat{i} + n_y \hat{j})$, $n_x, n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, L é o tamanho da célula de simulação e, q_i será definido em um momento mais apropriado. A linha do somatório significa que o termo $i = j$ é omitido para $\vec{n} = 0$. O primeiro passo na dedução é a escolha apropriada de uma função $\omega_m(\kappa r)$ para fatorizar $1/r^{2m}$, isto é:

$$\frac{1}{r^{2m}} = \frac{1 - \omega_m(\kappa r)}{r^{2m}} + \frac{\omega_m(\kappa r)}{r^{2m}} \quad (\text{B. 2})$$

em que $\omega_m(\kappa r)$ vá rapidamente para um, no limite de r grande e para zero, quando r tende a zero. Assim, o primeiro termo do lado direito da equação B. 2 é de curto alcance, enquanto o segundo termo é de longo alcance. Dessa forma, utilizando a expressão B. 2 pode-se fatorizar a equação B. 1 da seguinte maneira:

$$V = V_c + V_l \quad (\text{B. 3})$$

Apêndice B: Dedução da Soma de Ewald em duas dimensões

em que V_c é o termo de curto alcance dado por:

$$V_c = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{|\vec{n}|=0}^{\infty}, \frac{q_i q_j [1 - \omega_m(\kappa|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|)]}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^{2m}} \quad (\text{B. 4})$$

e V_l é o termo de longo alcance,

$$\begin{aligned} V_l &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{|\vec{n}|=0}^{\infty}, \frac{q_i q_j \omega_m(\kappa|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^{2m}} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{|\vec{n}|=0}^{\infty} \frac{q_i q_j \omega_m(\kappa|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^{2m}} - V_s \end{aligned} \quad (\text{B. 5})$$

Observe que na segunda linha da equação B. 5, o termo $i = j$ para $\vec{n} = 0$ foi reincluído na soma e V_s é o termo de autointeração dado por:

$$V_s = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N q_i^2 \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\omega_m(\alpha r)}{r^{2m}} \quad (\text{B. 6})$$

que pode ser simplificado utilizando a regra de L'Hopital.

Usando as seguintes relações:

$$\sum_{\vec{n}} \frac{\omega_m(\kappa|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^{2m}} = \int \sum_{\vec{n}} \frac{\omega_m(\kappa r)}{r^{2m}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{ij} - \vec{n}) d\vec{r} \quad (\text{B. 7})$$

$$\sum_{\vec{n}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{ij} - \vec{n}) = \frac{1}{L^2} \sum_{\vec{G}} \exp[i\vec{G} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_{ij})] \quad (\text{B. 8})$$

em que $\vec{G} = (2\pi/L)(n_x \hat{i} + n_y \hat{j})$, pode-se obter a seguinte expressão:

$$\sum_{\vec{n}} \frac{\omega_m(\kappa|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^{2m}} = \frac{1}{L^2} \sum_{\vec{G}} \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}_{ij}) \int \frac{\omega_m(\kappa r)}{r^{2m}} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \quad (\text{B. 9})$$

Para sistemas quasi-bidimensionais, uma escolha adequada para a função $\omega_m(\kappa r)$ é

$$\omega_m(\kappa r) = \frac{\gamma(m, \kappa^2 r^2)}{\Gamma(m)} \quad (\text{B. 10})$$

em que $\gamma(m, \kappa^2 r^2)$ e $\Gamma(m)$ são as funções gama incompleta complementar e a função

Apêndice B: Dedução da Soma de Ewald em duas dimensões

gama incompleta, respectivamente. Pode-se agora calcular a transformada de Fourier da equação B. 9, dada pela equação B. 11. A demonstração desse calculo juntamente com o termo de auto-interação serão feitos posteriormente.

$$\int \frac{\gamma(m, \alpha^2 r^2)}{r^{2m}} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) d\vec{r} = \pi \left(\frac{G^2}{4}\right)^{m-1} \Gamma\left(-m+1, \frac{G^2}{4\alpha^2}\right) \quad (\text{B. 11})$$

Outras relações ainda são muito úteis para simplificar as expressões obtidas:

$$\begin{cases} \gamma(m, x) = \Gamma(m) - \Gamma(m, x) \\ \Gamma\left(\frac{1}{2}, x\right) = \sqrt{\pi} \operatorname{erfc}(\sqrt{x}) \\ \Gamma(n+1, x) = n\Gamma(n, x) + x^n e^{-x} \end{cases} \quad (\text{B. 12})$$

Fazendo $q_i = S_i^z$ e $m = 3/2$ obtém-se as expressões para os termos de curto alcance, V_c^z , longo alcance, V_l^z e de autointeração, V_s^z .

$$V_c^z = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{|\vec{n}|=0}^{\infty} \left\{ \frac{S_i^z S_j^z}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|} \left[\operatorname{erfc}(\alpha|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|) + \frac{2\alpha|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|}{\sqrt{\pi}} \exp(-\alpha^2|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^2) \right] \right\} \quad (\text{B. 13})$$

$$\begin{aligned} V_l^z &= \frac{\pi}{L^2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\vec{G} \neq 0} \left\{ S_i^z S_j^z \left[\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{G^2}{4\alpha^2}\right) - \operatorname{Gerfc}\left(\frac{G}{2\alpha}\right) \right] \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}_{ij}) \right\} \\ &\quad + \frac{2\sqrt{\pi}\alpha}{L^2} \sum_{i,j=1}^N S_i^z S_j^z \end{aligned} \quad (\text{B. 14})$$

$$V_s^z = -\frac{2\alpha^3}{3\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2 \quad (\text{B. 15})$$

Por último, as componentes planares são obtidas fazendo $q_i = \vec{S}_{is} \cdot \vec{\nabla}$ e $m = 1/2$. Assim,

$$V_c^s = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{|\vec{n}|=0}^{\infty} \left\{ B(|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|) \vec{S}_{is} \cdot \vec{S}_{js} - C(|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|) [\vec{S}_{is} \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n})][\vec{S}_{js} \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n})] \right\} \quad (\text{B. 16})$$

em que

$$B(r) = \frac{\operatorname{erfc}(\alpha r)}{r^3} + \frac{2\alpha \exp(-\alpha^2 r^2)}{\sqrt{\pi} r^2} \quad (\text{B. 17})$$

$$C(r) = \frac{3\operatorname{erfc}(\alpha r)}{r^5} + \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3}{r^2} + 2\alpha^2 \right) \frac{\exp(-\alpha^2 r^2)}{r^2} \quad (\text{B. 18})$$

$$V_l^s = \frac{\pi}{L^2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{|\vec{G}| \neq 0} \frac{(\vec{S}_{is} \cdot \vec{G})(\vec{S}_{js} \cdot \vec{G})}{|\vec{G}|} \operatorname{erfc} \left(\frac{|\vec{G}|}{2\alpha} \right) \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}_{ij}) \quad (\text{B. 19})$$

e por último,

$$V_s^s = -\frac{2\alpha^3 |\vec{S}_{is}|^2}{3\sqrt{\pi}} \quad (\text{B. 20})$$

Combinando as expressões acima obtém-se as equações da soma de Ewald apresentadas no capítulo 4.

B.1 Transformada de Fourier para soma de Ewald

Será feita aqui a demonstração da equação B. 11:

$$\int \frac{\gamma(m, \alpha^2 r^2)}{r^{2m}} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{r}) d\vec{r} = \pi \left(\frac{G^2}{4} \right)^{m-1} \Gamma \left(-m + 1, \frac{G^2}{4\alpha^2} \right) \quad (\text{B. 21})$$

em que $\gamma(m, x) = \int_0^x e^{-t} t^{m-1} dt$ é a função gama incompleta complementar e $\Gamma(m, x) = \int_x^\infty e^{-t} t^{m-1} dt$ é a função gama incompleta. A equação B. 21 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\int_0^\infty \int_{-\pi}^\pi \frac{\gamma(m, \kappa^2 r^2)}{r^{2m}} e^{iGr \cos(\theta)} r d\theta dr = \pi \left(\frac{G^2}{4} \right)^{m-1} \Gamma \left(-m + 1, \frac{G^2}{4\kappa^2} \right) \quad (\text{B. 22})$$

em que a parte angular da integral B. 22 foi escrita em termos das funções de Bessel de primeiro tipo, isto é, $J_0(Gr) = (1/2\pi) \int_{-\pi}^\pi e^{iGr \cos \theta} d\theta$. Portanto, é preciso provar somente a seguinte transformação de Hankel:

Apêndice B: Dedução da Soma de Ewald em duas dimensões

$$2 \int_0^\infty \frac{\gamma(m, \alpha^2 r^2)}{r^{2m-1}} J_0(Gr) dr = \left(\frac{G^2}{4}\right)^{m-1} \Gamma\left(-m+1, \frac{G^2}{4\alpha^2}\right) \quad (\text{B. 23})$$

Sejam $u = Gr$, I_R o lado direito da equação B. 23 e, I_L o lado esquerdo. Dessa forma, I_L e I_R são dados por:

$$I_L = 2G^{2(m-1)} \int_0^\infty \frac{\gamma\left(m, \frac{\alpha^2 u^2}{G^2}\right)}{u^{2m-1}} J_0(u) du = G^{2(m-1)} I'_L \quad (\text{B. 24})$$

$$I_R = \left(\frac{G^{2(m-1)}}{4^{m-1}}\right)^{m-1} \Gamma\left(-m+1, \frac{G^2}{4\alpha^2}\right) = G^{2(m-1)} I'_R \quad (\text{B. 25})$$

A tarefa agora se resume em mostrar que $I'_L = I'_R$. Para esse fim, será necessário utilizar três relações:

(i) teorma relacionado com as funções gama incompletas, que pode ser encontrado na página 942, equação 8.356(4) da referência [125]:

$$\frac{d\gamma(m, x)}{dx} = -\frac{\Gamma(m, x)}{dx} = x^{m-1} e^{-x} \quad (\text{B. 26})$$

(ii) O resultado da integral B. 27, que é encontrado na página 717, equação 6.631(7) da referência [125]:

$$\int_0^\infty x e^{-ax^2} J_0(x) dx = \frac{1}{2a} e^{-\frac{1}{4a^2}} \quad (\text{B. 27})$$

(iii) Dois limites para as funções gama incompleta:

$$\begin{aligned} \gamma(m, x \rightarrow 0) &= 0 \\ \Gamma(m, x \rightarrow \infty) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B. 28})$$

Das equações B. 24, B. 26 e B. 27:

$$\frac{dI'_L}{dG} = -4 \frac{\alpha^{2m}}{G^{2m+1}} \int_0^\infty u e^{-\frac{\alpha^2 u^2}{G^2}} J_0(u) du = -2 \frac{\alpha^{2m-2}}{G^{2m-1}} e^{-\frac{G^2}{4\alpha^2}} \quad (\text{B. 29})$$

Apêndice B: Dedução da Soma de Ewald em duas dimensões

Por outro lado, das equações B. 25 e B. 26:

$$\frac{dI'_R}{dG} = -2 \frac{\alpha^{2m-2}}{G^{2m-1}} e^{-\frac{G^2}{4\alpha^2}} \quad (\text{B. 30})$$

A igualdade entre as derivadas de I'_L e I'_R juntamente com a condição (iii) fornecem as mesmas condições de contorno sobre I'_L e I'_R , de modo que $I'_L = I'_R$ e, conseqüentemente à equação B. 11.

Outro calculo que ainda deve ser feito é:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\omega_m(\alpha r)}{r^{2m}} = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\gamma(m, \alpha^2 r^2)}{\Gamma(m) r^{2m}} \quad (\text{B. 31})$$

Aplicando a regra de L'Hopital, tem-se:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\omega_m(\alpha r)}{r^{2m}} &= \lim_{r \rightarrow 0} \frac{2\alpha^2 r (\alpha^2 r^2)^{m-1} e^{-\alpha^2 r^2}}{2m\Gamma(m)r^{2m-1}} \\ &= \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\alpha^{2m} r^{2m-1} e^{-\alpha^2 r^2}}{m\Gamma(m)r^{2m-1}} \\ &= \frac{\alpha^{2m}}{m\Gamma m} \end{aligned} \quad (\text{B. 32})$$

Dessa forma, como $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ e $\Gamma(1+x) = x\Gamma(x)$, então $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$, para $m = 3/2$ e obtém-se o seguinte resultado:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\omega_m(\alpha r)}{r^{2m}} = \frac{4\alpha^3}{3\sqrt{\pi}} \quad (\text{B. 33})$$

Apêndice C

Lista de Trabalhos

- **Predicted defect-induced vortex core switching in thin magnetic nanodisks**, R. L. Silva, A. R. Pereira, R. C. Silva, W. A. Moura Melo, N. M. Oliveira-Neto, S. A. Leonel, P. Z. Coura, *Physical Review B* **78**, 054423 (2008).
- **Magnetic monopole and string excitations in two-dimensional spin ice**, L. A. S. Mól, R. L. Silva, R. C. Silva, A. R. Pereira, W. A. Moura Melo, and B. V. Costa, *Journal of Applied Physics* **106**, 063913 (2009).
- **Thermodynamics of elementary excitations in artificial magnetic square ice**, R. C. Silva, F. S. Nascimento, L. A. S. Mól, W. A. Moura Melo, A. R. Pereira, *New Journal of Physics* **14**, 015008 (2012).
- **Nambu monopoles interacting with lattice defects in two-dimensional artificial square spin ices**, R. C. Silva, R. J. C. Lopes, L. A. S. Mól, W. A. Moura Melo, G. M. Wysin, A. R. Pereira, *Physical Review B* **87**, 014414 (2013).
- **Magnetic vortex crystal formation in the antidot complement of square artificial spin ice**, C. I. L. de Araujo, R. C. Silva, I. R. B. Ribeiro, F. S. Nascimento, J. F. Felix, S. O. Ferreira, L. A. S. Mól, W. A. Moura Melo, A. R. Pereira, *Applied Physics Letters* **104**, 092402 (2014).

Referências Bibliográficas

- [1] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, “*Solid State Physics*”, Books/cole (1976).
- [2] R. L. Silva, A. R. Pereira, R. C. Silva, W. A. Moura-Melo, N. M. Oliveira-Neto, S. A. Leonel, P. Z. Coura; “*Predicted defect-induced vortex core switching in thin magnetic nanodisks*”; Physical Review B **78**, 054423 (2008).
- [3] W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, L. A. S. Mól, A. S. T. Pires; “*Geometrical pinning of magnetic vortices induced by a deficit angle on a surface: Anisotropic spins on a conic space background*”; Physics Letters A **360**, 472 (2007).
- [4] M. A. Amaral, R. L. Silva, A. R. Pereira, W. A. Moura-Melo; “*Discrete double core skyrmions in magnetic thin films*”; Journal of Magnetism and Magnetic Materials **321**, 3360 (2009).
- [5] J. Goldstone, A. Salam, S. Weinberg; “*Broken Symmetries*”; Physical Review **127**, 965 (1962).
- [6] B. J. Kim, H. Koh, E. Rotenberg, S. -J. OH, H. Eisak, N. Motoyama, U. Uchida, T. Tohyama, S. Maekawa, Z. -X. Shen, C. Kim; “*Distinct spinon and holon dispersions in photoemission spectral functions from one-dimensional SrCuO₂*”; Nature Physics **2**, 397 (2006).
- [7] R. de-Picciotto, M. Reznikov, M. Heiblum, V. Umansky, G. Bunin, D. Mahalu; “*Direct Observation of a Fractional Charge*”; Nature **389**, 6647 (1997).
- [8] J. Martin, S. Ilani, B. Verdene, J. Smet, V. Umansky, D. Mahalu, D. Schuh, G. Abstreiter, A. Yacoby; “*Localization of Fractionally Charged Quasi Particles*”; Science **305**, 5686 (2004).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [9] V. J. Goldman, B. Su; “*Resonant Tunneling in the Quantum Hall Regime: Measurement of Fractional Charge*”; *Science* **267**, 5200 (1995).
- [10] R. M. F. Houtappel; “*Order-disorder in hexagonal lattices*”; *Physica* **16**, 425 (1950).
- [11] L. D. C. Jaubert, J. T. Chalker, P. C. W. Holdsworth and R. Moessner; “*Three-Dimensional Kasteleyn Transition: Spin Ice in a [100] Field*”; *Physical Review Letters* **100**, 067207 (2008).
- [12] E. H. Lieb; “*Exact Solution of the F Model of An Antiferroelectric*”; *Physical Review Letters* **18**, 1046 (1967).
- [13] C. L. Henley; “*The “Coulomb phase” in frustrated systems*”; *Annual Review of Condensed Matter Physics* **11**, 179 (2009).
- [14] R. Youngblood, J. D. Axe, B. M. McCoy ; “*Correlations in ice-rule ferroelectrics*”; *Physical Review B* **21**, 5212 (1980).
- [15] B. Chakraborty, D. Das, J. Kondev ; “*Topological jamming and the glass transition in a frustrated system*”; *The European Physical Journal E* **9**, 227 (2002).
- [16] T. Fennell, O. A. Petrenko, B. Fåk, J. S. Gardner, S. T. Bramwell B. Ouladdiaf; “*Neutron scattering studies of the spin ices $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ and $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ in applied magnetic field*”; *Physical Review B* **72**, 224411 (2005).
- [17] C. Castelnovo, R. Moessner, S. L. Sondhi; “*Magnetic monopoles in spin ice*”; *Nature* **451**, 42 (2008).
- [18] S. T. Bramwell, S. R. Giblin, S. Calder, R. Aldus, D. Prabhakaran and T. Fennell; “*Measurement of the charge and current of magnetic monopoles in spin ice*”; *Nature* **461**, 956 (2009).
- [19] T. Fennell, P. P. Deen, A. R. Wildes, K. Schmalzl, D. Prabhakaran, A. T. Boothroyd, R. J. Aldus, D. F. McMorrow, and S. T. Bramwell; “*Magnetic Coulomb Phase in the Spin Ice $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$* ”; *Science* **326**, 415 (2009).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [20] D. J. P. Morris, D. A. Tennant, S. A. Grigera, B. Klemke, C. Castelnovo, R. Moessner, C. Czternasty, M. Meissner, K. C. Rule, J.-U. Hoffmann, K. Kiefer, S. Gerischer, D. Slobinsky, and R. S. Perry; “*Dirac Strings and Magnetic Monopoles in the Spin Ice $Dy_2Ti_2O_7$* ”; *Science* **326**, 411 (2009).
- [21] H. Kadowaki, N. Doi, Y. Aoki, Y. Tabata, T. J. Sato, J. W. Lynn, K. Matsuhira, Z. Hiroi; “*Observation of Magnetic Monopoles in Spin Ice*”; *Journal of the Physical Society of Japan* **78**, 103706 (2009).
- [22] M. J. P. Gingras; “*Observing Monopoles in a Magnetic Analog of Ice*”; *Science* **326**, 375 (2009).
- [23] R. F. Wang, C. Nisoli, R. S. Freitas, J. Li, W. MacConville, B. J. Cooley, M. S. Lund, N. Samarth, C. Leighton, V. H. Crespi and P. Schiffer; “*Artificial spin ice in a geometrically frustrated lattice of nanoscale ferromagnetic islands*”; *Nature* **439**, 303 (2006).
- [24] J. Li, X. Ke, S. Zhang, D. Garand, C. Nisoli P. Lammert, V.H. Crespi, and P. Schiffer; “*Comparing artificial frustrated magnets by tuning the symmetry of nanoscale permalloy arrays*”; *Physical Review B* **81**, 092406 (2010).
- [25] S. Ladak, D.E. Read, G.K. Perkins, L.F. Cohen, and W.R. Brandford; “*Direct observation of magnetic monopole defects in an artificial spin-ice system*”; *Nature Physics* **6**, 359 (2010).
- [26] E. Mengotti, L.J. Heyderman, A.F. Rodriguez, F. Nolting, R.V. Hügli, and H-B Braun; “*Real-space observation of emergent magnetic monopoles and associated Dirac strings in artificial kagome spin ice*”; *Nature Physics* **7**, 68 (2011).
- [27] A. K. Salem, P. C. Searson e K. W. Leong; “*Multifunctional nanorods for gene delivery*”; *Nature Materials*, **2** 668 (2003).
- [28] D. Sellmyer, R. Skomski; “*Advanced Magnetic Nanostructures*”, Springer, Berlin Heidelberg (2006).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [29] R. L. Liboff, “*Introductory Quantum Mechanics*”, Pearson Education, Fourth Edition (2008).
- [30] L. E. Ballentine, “*Quantum Mechanics, A Modern Development*”, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2000).
- [31] S. R. A. Salinas, “*Introdução a Física Estatística*”, ed da Universidade de São Paulo, São Paulo (1999).
- [32] D. J. Griffiths, “*Introduction to Electrodynamics*”, Prentice Hall, New Jersey, Third Edition (2008).
- [33] J. D. Jackson, “*Classical Electrodynamics*”, Wiley, New York, Third Edition (1999).
- [34] M. Getzlaff, “*Fundamentals of Magnetism*”, Springer-Verlag, Berlin (2008).
- [35] A. Aharoni, “*Introduction to the Theory of Ferromagnetism*”, Oxford Science Publications, Second Edition (1999).
- [36] C. P. Bean, J. D. Livingston, “*Superparamagnetism*”, Journal of Applied Physics **30**, 120 (1959).
- [37] X. Batle, A. Labarta, “*Finite-size effects in fine particles: magnetic and transport properties*”, Journal of Physics D: Applied Physics **35**, R15 (2002).
- [38] J. Z. Sun, “*Spin-current interaction with a monodomain magnetic body: A model study*”, Physical Review B **62**, 570 (2000).
- [39] A. P. Guimarães, I. S. Oliveira; “*Magnetismo e Ressonância Magnética em Sólidos*”, edUsp (2009).
- [40] O. Iglesias, A. Labarta; “*Finite-size and surface effects in maghemite nanoparticles: Monte Carlo simulations*”; Physical Review B **63**, 184416 (2001).
- [41] P. Mohn, “*Magnetism in the Solid State: An Introduction*”, Springer-Verlag, Berlin (2006).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [42] K. H. J. Buschow, F. R. De Boer, “*Physics of Magnetic Materials*”, Kluwer Academic Publishers, New York (2004).
- [43] R. E. Newnham, “*Properties of Magnetism: Anisotropy, Symmetry, Structure*”, Oxford, New York (2005).
- [44] J. F. Sadoc, R. Mosseri; “*Geometrical Frustration*”, Cambridge University Press, New York (1999).
- [45] A. P. Ramirez; “*Strongly Geometrically Frustrated Magnets*”; Annual Review of Materials Research **24**, 453 (1994).
- [46] R. Moessner; “*Magnets with strong geometric frustration*”; Canadian Journal of Physics **79**, 1283 (2001).
- [47] R. Moessner, A. P. Ramirez; “*Geometrical Frustration*”; Physics Today **59**, 2 (2006).
- [48] L. Balents; “*Spin liquids in frustrated magnets*”; Nature **464**, 11 (2010).
- [49] M. Hanawa, Y. Muraoka, T. Sakakibara, T. Yamaura, Z. Hiroi; “*Superconductivity at 1 K in $Cd_2Re_2O_7$* ”; Physical Review Letters **87**, 187001 (2001).
- [50] Y. Yamamoto, H. Tanaka, T. Kawai; “*The Control of Cluster-Glass Transition Temperature in Spinel-Type $ZnFe_2O_{4-\delta}$ Thin Film*”; Japanese Journal of Applied Physics **40**, L545 (2001).
- [51] H. Frauenfelder, P. G. Wolynes, R. H. Austin; “*Biological Physics*”; Review of Modern Physics **71** S419 (1999).
- [52] H. Harreis, C. N. Likos, H. Löwen; “*Azimuthal Frustration and Bundling in Columnar DNA Aggregates*”; Biophysical Journal **84**, 3607 (2003).
- [53] M. J. P. Gingras; “*Spin Ice*”; arXiv: cond-mat/0903.2772v1 (2009).
- [54] J. Z. Villain; Z. Physics B **33**, 31 (1979).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [55] W. F. Giaouque, M. F. Ashley; “*Molecular Rotation in Ice at 10°K. Free Energy of Formation and Entropy of Water*”; Physical Review **43**, 81 (1933).
- [56] W. F. Giaouque, J. W. Stout; “*The Entropy of Water and the Third Law of Thermodynamics. The Heat Capacity of Ice from 15 to 273°K.*”; Journal of the American Chemical Society **58**, 1144 (1936).
- [57] L. Pauling; “*The Structure and Entropy of Ice and of Other Crystals with Some Randomness of Atomic Arrangement*”; Journal of the American Chemical Society **57**, 2680 (1935).
- [58] J. D. Bernal, R. H. Fowler; “*A Theory of Water and Ionic Solution, with Particular Reference to Hydrogen and Hydroxyl Ions*”; Journal of Chemical Physics **1**, 515 (1933).
- [59] M. J. Harris, S. T. Bramwell, D. F. McMorrow, T. Zeiske and K. W. Godfrey; “*Geometrical frustration in the ferromagnetic pyrochlore $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$* ”; Physical Review Letters **79**, 2554 (1997).
- [60] S. T. Bramwell and M. J. Harris; “*Frustration in Ising-type spin models on the pyrochlore lattice*”; Journal of Physics: Condensed Matter **10**, 215 (1998).
- [61] A. P. Ramirez, A. Hayashi, R. J. Cava, R. Siddharthan and B. S. Shastry; “*Zero-point entropy in spin ice*”; Nature **399**, 333 (2009).
- [62] K. Matsuhira, Y. Hinatsu, K. Tenya and T. Sakakibara; “*Low temperature magnetic properties of frustrated pyrochlore ferromagnets $\text{Ho}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$ and $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$* ”; Journal of Physics: Condensed Matter **12**, 649 (2000).
- [63] H. Kadowaki, Y. Ishii, K. Matsuhira and Y. Hinatsu; “*Neutron scattering study of dipolar spin ice $\text{Ho}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$: Frustrated pyrochlore magnet*”; Physical Review B **65**, 144421 (2002).
- [64] R. Moessner and P. Schiffer; “*Monopoles on the move*”; Nature Physics, **5** 250 (2009).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [65] M. J. P. Gingras; “*Observing Monopoles in a Magnetic Analog of Ice*”; *Science* **326**, 375 (2009).
- [66] C. Nisoli, R. F. Wang, J. Li, W. F. MacConville, P. E. Lammert, P. Schiffer and V. H. Crespi; “*Ground State Lost but Degeneracy Found: The Effective Thermodynamics of Artificial Spin Ice*”; *Physical Review Letters* **98**, 217203 (2007).
- [67] E. Mengotti, L. J. Heyderman, A. Fraile Rodríguez, A. Bisig, L. Le Guyader, F. Nolting and H. B. Braun; “*Building blocks of an artificial kagome spin ice: Photoemission electron microscopy of arrays of ferromagnetic islands*”; *Physical Review B* **78**, 144402 (2008).
- [68] L. A. S. Mól, W. A. Moura Melo, A. R. Pereira; “*Extending spin ice concepts to another geometry: The artificial triangular spin ice*”; *Physical Review B* **85**, 184410 (2012).
- [69] M. J. Morrison, T. R. Nelson and C. Nisoli; “*Unhappy Vertices in Artificial Spin Ice: New Degeneracies from Vertex Frustration*”; *New Journal of Physics* **15**, 045009 (2013).
- [70] G. W. Chern, M. J. Morrison, C. Nisoli; “*Engineering Degeneracy: a Critical Ground State of Artificial Spin Ice*”; arXiv: cond-mat/1210.8377 (2012).
- [71] R. F. Wang, C. Nisoli, R. S. Freitas, J. Li, W. MacConville, B. J. Cooley, M. S. Lund, N. Samarth, C. Leighton, V. H. Crespi and P. Schiffer; “*Demagnetization protocols for frustrated interacting nanomagnets arrays*”; *Journal of Applied Physics* **101**, 09J104 (2007).
- [72] C. Nisoli, J. Li, X. Ke, D. Garand, P. Schiffer and V. Crespi; “*Effective temperature in an interacting vertex system: Theory and experiment on artificial spin ice*”; *Physical Review Letters* **105**, 047205 (2010).
- [73] X. Ke, J. Li, C. Nisoli, P. E. Lammert, W. MacConville, R. F. Wang, V. H. Crespi, P. Schiffer; “*Energy Minimization and ac Demagnetization in a Nanomagnet Array*”; *Physical Review Letters* **101**, 037205 (2008).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [74] Z. Budrikis, P. Politi, R. L. Stamps; “*Vertex Dynamics in Finite Two-Dimensional Square Spin Ices*”; Physical Review Letters **105**, 017201 (2010).
- [75] Z. Budrikis, P. Politi, R. L. Stamps; “*Diversity Enabling Equilibration: Disorder and the Ground State in Artificial Spin Ice*”; Physical Review Letters **107**, 217204 (2011).
- [76] M. Tanaka, E. Saitoh, H. Miyajima, T. Yamaoka and Y. Iye; “*Magnetic interactions in a ferromagnetic honeycomb nanoscale network*”; Physical Review B **73**, 052411 (2006).
- [77] A. Schumann, B. Sothmann, P. Szary and H. Zabel; “*Charge ordering of magnetic monopoles in triangular spin ice patterns*”; Applied Physics Letters **97**, 022509 (2010).
- [78] V. Kapaklis, U. B. Arnalds, A. Harman-Clarke, E. Th Papaioannou, M. Karimipour, P. Korelis, A. Taroni, P. C. Holdsworth, S. T. Bramwell, B. Hjörvarsson; “*Melting artificial spin ice*”; New Journal of Physics **14**, 035009 (2012).
- [79] M. Pärnaste, M. Marcellini, E. Holmström, N. Bock, J. Fransson, O. Ericksson and B. Hjörvarsson; “*Dimensionality and crossover in the induced magnetization of Pd layers*”; Journal of Physics: Condensed Matter **19**, 246213 (2007).
- [80] E. Th Papaioannou, V. Kapaklis, A. Taroni, M. Marcellini and B. Hjörvarsson; “*Dimensionality and confinement effects in δ -doped Pd(Fe) layers*”; Journal of Physics: Condensed Matter **22**, 236004 (2010).
- [81] J. M. Porro, A. Bedoya-Pinto, A. Berger and P. Vavassori; “*Exploring thermally induced states in square artificial spin-ice arrays*”; New Journal of Physics **15**, 055012 (2013).
- [82] L. A. S. Mól, R. L. Silva, R. C. Silva, A. R. Pereira, W. A. Moura-Melo and B. V. Costa; “*Magnetic monopole and string excitations in two-dimensional spin ice*”; Journal of Applied Physics **106**, 063913 (2009).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [83] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless; “ *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems*, Journal of Physics C: Solid State Physics **6**, 1181 (1973).
- [84] J. P. Morgan, A. Stein, S. Langridge, C. H. Marrows; “ *Thermal ground-state ordering and elementary excitations in artificial magnetic square ice*”; Nature Physics **7**, 75 (2011).
- [85] D. Landau, K. Binder, “ *A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*”, Cambridge University Press; New York (2005).
- [86] M. E. J. Newman, G. T. Barkema, “ *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*”, Oxford University Press; New York (2011).
- [87] A.A. Markov; “ *Extension of the limit theorems of probability theory to a sum of variables connected in a chain*”. Reimpresso no Apêndice B de: R. Howard; “ *Dynamic Probabilistic Systems*”, volume 1: Markov Chains. Ed. John Wiley and Sons, 1971.
- [88] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller and E. J. Teller; “ *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*”; Journal of Chemical Physics **21**, 1087 (1953).
- [89] T. Beier, H. Jahrreis, D. Pescia, Th. Woike and W. Gudat; “ *Magnetic hysteresis loop of one monolayer of Co on Cu(100)*”; Physical Review Letters **61**, 1875 (1988).
- [90] Yu. M. Molozovsky and V. M. Rozenbaum; “ *Orientational ordering in two-dimensional systems with long-range interaction*”; Physica A **175**, 127 (1991).
- [91] V. M. Bedanov; “ *Long-range order in a classical two-dimensional dipole system*”; Journal of Physics: Condensed Matter **4**, 75 (1992).
- [92] K. De’Bell, A. B. MacIsaac, I. N. Booth and J. P. Whitehead; “ *Dipolar-induced planar anisotropy in ultrathin magnetic films*”; Physical Review B **55**, 15108 (1997).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [93] E. Rastelli, A. Carbognani, S. Regina and A. Tassi; “*Pseudodipolar anisotropy in the square rotator model*”; Journal of Applied Physics **85**, 6082 (1999).
- [94] A. Carbognani, E. Rastelli and A. Tassi; “*Dipolar interaction and long-range order in the square planar rotator model*”; Physical Review B **62**, 1015 (2000).
- [95] E. Rastelli, S. Regina, A. Tassi and A. Carbognani; “*Long-range isotropic and dipolar spin-spin interactions in the square planar rotator model*”; Physical Review B **65**, 094412 (2002).
- [96] D. P. Pappas, K. P. Kämper and H. Hopster; “*Reversible transition between perpendicular and in-plane magnetization in ultrathin films*”; Physical Review Letters **64**, 3179 (1990).
- [97] R. Allenspach and A. Bischof; “*Magnetization direction switching in Fe/Cu(100) epitaxial films: Temperature and thickness dependence*”; Physical Review Letters **69**, 3385 (1992).
- [98] R. Allenspach; “*Ultrathin films: magnetism on the microscopic scale*”; Journal of Magnetism and Magnetic Materials **129**, 160 (1994).
- [99] M. Seul and D. Andelman; “*Domain Shapes and Patterns: The Phenomenology of Modulated Phases*”; Science **267**, 476 (1995).
- [100] R. Allenspach, M. Stampanoni and J. P. Bischof; “*Magnetic domains in thin epitaxial Co/Au(111) films*”; Physical Review Letters **65**, 3344 (1990).
- [101] M. Hehn, S. Padovani, K. Ounadjela and J. P. Bucher; “*Nanoscale magnetic domain structures in epitaxial cobalt films*”; Physical Review B **54**, 3428 (1996).
- [102] C. Petit, A. Taleb and M. P. Pileni; “*Cobalt Nanosized Particles Organized in a 2D Superlattice: Synthesis, Characterization, and Magnetic Properties*”; Journal of Chemical Physics B **103**, 1805 (1999).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [103] S. Sun and C. B. Murray; “*Synthesis of monodisperse cobalt nanocrystals and their assembly into magnetic superlattices (invited)*”; Journal of Applied Physics **85**, 4325 (1999).
- [104] V. F. Puentes, K. M. Krishnan and A. P. Alivisatos; “*Colloidal Nanocrystal Shape and Size Control: The Case of Cobalt*”; Science **291**, 2115 (2001).
- [105] J. C. Shelley and G. N. Patey; “*Boundary condition effects in simulations of water confined between planar walls*”; Molecular Physics **88**, 385 (1996).
- [106] M. P. Allen and D. J. Tildesley; “*Computer Simulation of Liquids*”, Oxford, New York (1991).
- [107] L. A. S. Mól, “*Transições de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações dipolares*”, Tese de Doutorado, UFMG (2009).
- [108] J. J. Weiss; “*Simulation of quasi-two-dimensional dipolar systems*”; Journal of Physics: Condensed Matter, **15** S1471 (2003).
- [109] R. Burkard, M. Dell’Amico, S. Martello; “*Assignment Problems*”; SIAM, Philadelphia (2009).
- [110] A. León, J. Pozo; “*Using a genetic algorithm to study properties of minimum energy states and geometrical frustration in artificial spin ice system*”, Journal Of Magnetism and Magnetic Materials **320**, 210 (2008).
- [111] E. O. Kamenetskii; “*Eletromagnetic, Magnetostatic and Exchange-Interaction Vortices in confined Magnetic Structures*”, Kerala: Transworld Research Network (2008).
- [112] D. Levis, L. F. Cugliandolo, L. Foini and M. Tarzia; “*Thermal phase transitions in Artificial Spin-Ice*”; Physical Review Letters **110**, 207206 (2013).
- [113] R. C. Silva, F. S. Nascimento, L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira; “*Thermodynamics of elementary excitations in artificial magnetic square ice*”; New Journal of Physics **14**, 015008 (2012).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [114] A. R. Pereira, W. A. Moura-Melo, R. L. Silva, N. M. Oliveira-Neto; “*How hole defects modify vortex dynamics in ferromagnetic nanodisks*”; Journal of Applied Physics **103**, 124306 (2008).
- [115] F. A. Apolonio, W. A. Moura-Melo, F. P. Crisafuli, A. R. Pereira, R. L. Silva; “*A model for structural defects in nanomagnets*”; Journal of Applied Physics **106**, 084320 (2009).
- [116] R. L. Silva, A. R. Pereira, W. A. Moura-Melo; “*Magnetization reversals in a disk-shaped small magnet with an interface*”; Journal of Applied Physics **105**, 014314 (2009).
- [117] R. C. Silva, R. J. C. Lopes, L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo, G. M. Wysin and A. R. Pereira; “*Nambu monopoles interacting with lattice defects in a two-dimensional artificial square spin ice*”; Physical Review B **87**, 014414 (2013).
- [118] C. Phatak, M. Pan, A. K. Petford-Long, S. Hong, M. De Graef; “*Magnetic interactions and reversal of artificial square spin ices*”; New Journal of Physics **14**, 075028 (2012).
- [119] K. K. Kohli, A. L. Balk, J. Li, S. Zhang, I. Gilbert, P. E. Lammert, V. H. Crespi, P. Schiffer, N. Samarth; “*Magneto-optical Kerr effect studies of square artificial spin ice*”; Physical Review B **84**, 180412 (2011).
- [120] J. F. Smyth, S. Schultz, D. R. Fredkin, D. P. Kern, S. A. Rishton, H. Schmid, M. Cali, and T. R. Koehler; “*Hysteresis in lithographic arrays of permalloy particles: Experiment and theory (invited)*”; Journal of Applied Physics **69**, 5262 (1991).
- [121] J.-E. Wegrowe, O. Fruchart, J.-P. Nozières, D. Givord, F. Rousseaux, D. Decanini, and J. Ph. Ansermet; “*Arrays of ultrathin monocrystalline submicrometer-sized Fe dots: Néel–Brown relaxation and activation volume*”; Journal of Applied Physics **86**, 1028 (1999).
- [122] C. A. Ross, S. Haratani, F. J. Castaño, Y. Hao, M. Hwang, M. Shima, J. Y. Cheng, B. Vögeli, M. Farhoud, M. Walsh and H. I. Smith; “*Magnetic behavior*

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- of lithographically patterned particle arrays (invited)*”; Journal of Applied Physics **91**, 6848 (2002).
- [123] A. M. Maliska; “*Microscopia Eletrônica de Varredura*”, disponível em www.materiais.ufsc.br/lcm/web-MEV/MEV-Apostila.pdf.
- [124] G. T. Gao, X. C. Zeng and W. Wang; “*Vapor-liquid coexistence of quasi-two-dimensional Stockmayer fluids*”; Journal of Chemical Physics **106**, 3311 (1997).
- [125] Table of integral, series and products. In: Gradshteyn, I., Ryzhik, I.; (Ed.) Orlando: Academic Press, 1980. p. 942, eq. 8.356(4) e p.717, eq.6.631(7).