

MARCO ANTÔNIO AMARAL

DINÂMICA DE SKYRMIONS E CRISTAIS DE  
SKYRMIONS AUTO-ORGANIZADOS

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

VIÇOSA  
MINAS GERAIS - BRASIL  
2013

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

T

A485d  
2013

Amaral, Marco Antônio, 1987-  
Dinâmica de Skyrmions e cristais de Skyrmions auto-  
organizados / Marco Antônio Amaral. – Viçosa, MG, 2012.  
xiv, 51f. : il. (algumas color.) ; 29cm.

Orientador: Afrânio Rodrigues Pereira  
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.  
Referências bibliográficas: f. 47-51

1. Quase-partículas (Física). 2. Magnetismo. 3. Física do  
estado sólido. 4. Física. I. Universidade Federal de Viçosa.  
Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação  
em Física Aplicada. II. Título.

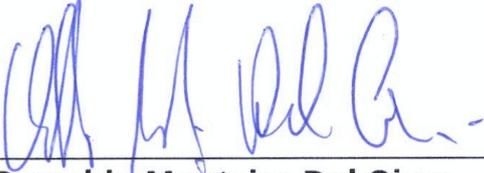
CDD 22. ed. 530.41

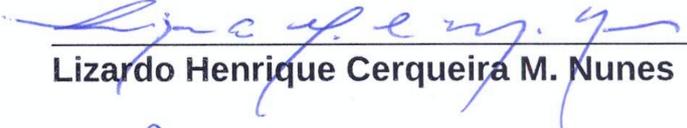
MARCO ANTÔNIO AMARAL

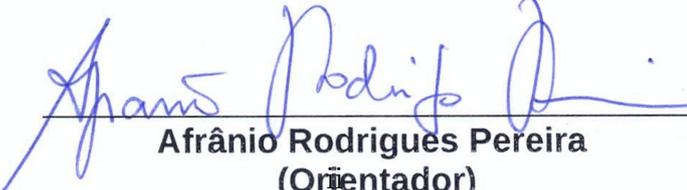
DINÂMICA DE SKYRMIONS E CRISTAIS DE SKYRMIONS AUTO-  
ORGANIZADOS

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

APROVADA: 21 de fevereiro de 2013.

  
Oswaldo Monteiro Del Cima

  
Lizardo Henrique Cerqueira M. Nunes

  
Afrânio Rodrigues Pereira  
(Orientador)

A todos alunos e estudantes. São vocês, e não professores já formados, que têm a chance de mudar para melhor nossa ciência.

"A central lesson of science is that to understand complex issues (or even simple ones), we must try to free our minds of dogma and to guarantee the freedom to publish, to contradict, and to experiment. Arguments from authority are unacceptable."

Carl Sagan

## Agradecimentos

Agradeço a todos que me fizeram chegar até aqui.

A Universidade Federal de Viçosa e ao CNPq pelo incentivo financeiro e pela chance de alcançar esse objetivo.

Aos professores do departamento de Física e principalmente aos orientadores e co-orientados Afranio, Winder e Mól pelas discussões sobre a pesquisa, pelos incentivos e cobranças e pelas excelentes tardes com café discutindo assuntos não relacionados a tese.

Aos amigos de curso e da universidade pelo apoio, pelas distrações e ócios produtivos.

E principalmente a minha família. A minha mãe, minha irmã e meu pai que me ajudaram mesmo estando longe. A minha família em viçosa, Karine, Marcos, Mariana, Leonardo e todos que me ajudaram quando eu precisei.

# Conteúdo

<b>Lista de Figuras</b>	<b>viii</b>
<b>Resumo</b>	<b>xi</b>
<b>Abstract</b>	<b>xiii</b>
<b>1 Objetivos</b>	<b>1</b>
<b>2 Introdução</b>	<b>2</b>
2.1 Materiais bidimensionais ferromagnéticos . . . . .	2
2.2 Matéria Condensada e quasi-partículas . . . . .	5
2.3 Sólitons . . . . .	7
2.4 Skyrmions como uma classe de Sólitons . . . . .	10
2.5 Métodos de simulação . . . . .	16
<b>3 Resultados: Skyrmions de dois núcleos</b>	<b>19</b>
3.1 Conservação de energia e estabilidade . . . . .	19
3.2 Rede sem impurezas . . . . .	21
3.3 Rede com campo magnético aplicado . . . . .	24
3.4 Rede com impurezas não-magnéticas . . . . .	25
<b>4 Resultados: Skyrmions de um núcleo</b>	<b>29</b>
4.1 Conservação de energia e estabilidade . . . . .	29
4.2 Rede sem impurezas . . . . .	30
4.3 Efeitos de borda . . . . .	31
4.4 Rede com dois Skyrmions . . . . .	33

4.5	Cristais de Skyrmions . . . . .	37
<b>5</b>	<b>Conclusões e perspectivas</b>	<b>44</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>47</b>

# Lista de Figuras

2.1	Grafeno, um exemplo de sistema real que se comporta como tendo baixa dimensionalidade. . . . .	3
2.2	a) Um sóliton em um canal raso empurrando uma pequena embarcação. b) Visão transversal de uma onda solitária de água em um canal raso gerada em laboratório. Ela pode viajar por uma longa distância sem perder sua forma ou velocidade. . . . .	8
2.3	Exemplo de um tipo de sóliton de pressão atmosférica, nuvem do tipo <i>morning glory</i> . . . . .	10
2.4	Ilustração da projeção de uma esfera de spins em um plano bidimensional.	11
2.5	Projeção dos spins em Z para ambos tipos de Skyrmions em 3D. . . .	15
3.1	Visão tridimensional e projeção dos spins no plano xy de um skyrmion de dois núcleos. . . . .	20
3.2	Gráfico de energia pelo inverso do tamanho da rede para um skyrmion de dois núcleos. Para uma rede infinita a energia tende ao valor esperado da teoria analítica. . . . .	22
3.3	Gráfico mostrando a posição em x de um dos núcleos do skyrmion pelo tempo de integração e sua transformada de Fourier. . . . .	23
3.4	Comparação de um skyrmion estático e um skyrmion deformado por ondas de spin. . . . .	24
3.5	Variação senoidal da energia da excitação conforme o campo aplicado. Assim que o campo é desativado a energia cai ao valor normal da excitação.	26

3.6	Projeção no plano XY dos spins. Note a vacância próxima ao centro do skyrmion. . . . .	27
3.7	Comportamento de um skyrmion ao passar perto de uma impureza. a) O núcleo com polaridade -1 (azul) passa perto da impureza sendo capturado por esta. b) Ele colapsa sobre a impureza. c) O núcleo com polarização +1 começa a colapsar e se alongar. d) A excitação se desfaz em ondas de spin na rede e a polarização total volta a zero. . . . .	28
4.1	Visão tridimensional dos spins em z e projeção dos spins no plano xy para um skyrmion de um núcleo. . . . .	30
4.2	Gráfico da energia pelo inverso do tamanho da rede para um skyrmion de um núcleo. . . . .	31
4.3	Gráfico da energia pelo deslocamento em relação ao centro da rede para um skyrmion de um núcleo. . . . .	32
4.4	Perfil da rede contendo dois skyrmions afastados. O centro da rede possui uma pequena descontinuidade na componente z dos spins. . . . .	34
4.5	Energia pelo inverso de L para um e dois skyrmions de um núcleo. Sendo S=1 os dados para um Skyrmion na rede e S=2 para a rede contendo dois destes. A energia da rede com um skyrmion foi multiplicada por 2 para que possamos comparar as energias. . . . .	35
4.6	Gráficos da energia pela distância do skyrmion ao centro da rede para um e dois skyrmions. A energia de interação com a borda da rede existe em todos os casos, porém de torna menor em redes grandes. Porém o pico central, que indica uma interação no caso da rede com dois skyrmions, permanece independentemente do tamanho da rede. . . . .	36
4.7	Visão 2D e 3D da rede em losango de skyrmions de um núcleo. . . . .	38
4.8	Energia total das excitações versus $\theta$ . O ângulo de menor energia é $\theta = 90^\circ$ . 39	39
4.9	Arranjo de skyrmions formando entre si uma rede do tipo <i>honeycomb</i> . . . . .	40

4.10	Energia por excitação de configurações do tipo <i>honeycomb</i> de skyrmions contendo 7,6,4 e 1 skyrmion. Mesmo com valores de parâmetros iguais para tamanho de skyrmion e tamanho de rede, estas apresentam excesso de energia ao se adicionar mais excitações. . . . .	42
4.11	Redes com a mesma quantidade de excitações, porém, com energia que se comporta ligeiramente diferente dependendo da configuração. a) Rede A com o skyrmion central, que possui 6 vizinhos, faltando. b) Rede B com um skyrmion periférico, que possui somente 3 vizinhos, faltando. c) Gráfico comparando as energias de ambas as redes; a rede B, que possui menos skyrmions vizinhos, tem a energia maior. . . . .	43

# Resumo

AMARAL, Marco Antonio, M. Sc., Universidade Federal de Viçosa, Fevereiro de 2013.  
**Dinâmica de Skyrmions e cristais de Skyrmions auto-organizados.** Orientador: Afranio Rodrigues Pereira. Coorientadores: Winder Alexander Moura-Melo e Lucas Alvares da Silva Mól

Neste trabalho estudamos excitações topológicas do tipo Skyrmions em redes ferromagnéticas bidimensionais finitas. Tais redes são uma boa descrição de materiais reais quase bidimensionais, pois estes, com frequência, possuem defeitos e impurezas, bem como fortes efeitos de borda, impedindo que um modelo infinito e contínuo os descreva bem. Foram analisados Skyrmions em redes livres de impurezas bem como sua interação com defeitos magnéticos, campos magnéticos externos e outras excitações do mesmo tipo na rede. Em especial foi analisada também a formação de cristais de skyrmions devido a interação entre excitações e sua consequente auto-organização. O estudo destes foi feito através de métodos computacionais de Dinâmica de Spins utilizando-se integradores do tipo Preditor-Corretor. Os resultados obtidos mostram que o modelo proposto se ajusta aos modelos teóricos contínuos no limite termodinâmico. Ainda assim, foram encontrados vários fenômenos novos para redes pequenas em que a dimensionalidade reduzida e discreteza do sistema pode gerar novas interações não previstas por modelos analíticos. Entre tais fenômenos podemos incluir a aniquilação de Skyrmions via impurezas, movimentação de skyrmions por campos aplicados e

energias de interação inter-skyrmions. Tais simulações são de grande importância visto que recentemente foi demonstrado [1–4] que redes hexagonais de Skyrmions podem se formar em filmes finos e podem ser detectadas experimentalmente [5–11]. Considerando a área de memórias magnéticas de alta densidade, quasi-partículas estáveis como skyrmions seriam de grande aplicação prática [12].

# Abstract

AMARAL, Marco Antonio, M. Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2013.  
**Skyrmion dynamics and self-organized Skyrmion crystals.** Adviser: Afranio Rodrigues Pereira. Co-adviser: Winder Alexander Moura-Melo and Lucas Alvares da Silva Mól

In the present work we have studied topological excitations of the skyrmion type at finite ferromagnetic two-dimensional lattices. Such lattices are a good approximation to real low dimensional magnetic materials because those, often, have impurities, discrete defects and strong border effects. Therefore, an infinite and continuous model would not be able to precisely describe such real magnetic materials. We have analysed skyrmions inside defect-free lattices as well as magnetical impurities interactions, external applied magnetic fields and interactions with other excitations of the same kind. Specifically we studied the formation of skyrmions crystals due to skyrmion interaction, and the eventual auto-organization of these lattices. Such study was taken by computational methods using spin dynamics. To this end, a Predictor-Corrector integrator was used. The obtained results shows that the proposed model adjusts to analytical theoretical models in the thermodynamics limit. Yet we observed various phenomena that weren't present in the continuous theory. Skyrmions annihilation by magnetic defects, skyrmion motion due to magnetic fields and skyrmion-skyrmion interaction are some of those. These simulations are of great importance noticing that it was directly observed [1–4] recently that hexagonal skyrmion lattices can be found in thin films and

be experimentally detected [5–11]. Considering the high-density magnetic memories area stable skyrmionic excitations would be of great interest [12].

# Capítulo 1

## Objetivos

O principal objetivo deste trabalho foi analisar as diferenças de comportamento dinâmico dos Skyrmions em redes magnéticas discretas e finitas quando comparadas com os modelos analíticos para sistemas de campos contínuos e infinitos como, por exemplo, o modelo  $\sigma$  não-linear [13]. Tal objetivo foi motivado, principalmente, pelo fato de que, recentemente, skyrmions terem sido encontrados experimentalmente [1–11] e observados diretamente em materiais de baixas dimensionalidades. Tais materiais demonstram, experimentalmente, o surgimento de cristais de skyrmions organizados [6–9], bem como skyrmions solitários [5, 14–16], além de possíveis redes de skyrmions como o estado fundamental em materiais quirais específicos [3, 4].

Analisamos principalmente a parte dinâmica de tais excitações, em temperatura zero. Foi levada em consideração a interação de Skyrmions com as bordas das redes finitas, impurezas magnéticas, campos magnéticos aplicados e interações entre Skyrmions.

Por fim, tentamos analisar a formação de redes e cristais de skyrmion, bem como as possíveis interações entre tais objetos e as simetrias envolvendo estas energias de interação.

# Capítulo 2

## Introdução

### 2.1 Materiais bidimensionais ferromagnéticos

Apesar de nossa vivência cotidiana se basear em experiências em três dimensões, vemos que existem vários materiais na natureza que se comportam como se possuíssem dimensionalidade menor do que três. Tais materiais possuem características muito especiais para as interações de seus constituintes (devido a causas que podem variar desde a sua estrutura cristalina até mesmo a motivos termodinâmicos). Assim, certos materiais possuem estruturas que fazem com que os constituintes possam interagir entre si somente ao longo de camadas ou mesmo ao longo de linhas, formando regiões de interação que, dependendo das forças específicas do sistema, podem ser caracterizadas como sendo somente bidimensionais ou mesmo unidimensionais. Há aproximadamente três décadas, materiais magnéticos, que crescem em estruturas constituídas de cadeias ou de camadas, passaram a ser produzidos, fazendo com que o interesse científico e industrial em magnetos bidimensionais aumentasse. Desse modo, novas teorias de campo e de matéria condensada em dimensões abaixo de três puderam ser elaboradas e principalmente testadas através do estudo de materiais naturais e artificiais. [17]

Mesmo que, em geral, nosso mundo cotidiano e seus objetos possuam três dimensões espaciais, em física da matéria condensada, redes que se comportam como se possuíssem dimensionalidades inferiores a 3 são comuns. Usando assimetrias dimensionais devido ao formato cristalino dos materiais podemos confinar certas partículas em superfícies, linhas ou mesmo em pontos, de maneira que estes se comportem como

## 2. Introdução

---

se tivessem uma dimensão reduzida. Podemos usar a terceira lei da termodinâmica para explicar tais comportamentos, já que, todos os graus de liberdade de um sistema físico devem ser congelados no limite de temperatura zero. Tais efeitos acontecem principalmente em temperaturas próximas a zero pois "congelamos" os graus de liberdade dos componentes, mas somente em determinadas direções. Deste modo, em potenciais fortemente confinantes ou temperaturas muito baixas, a energia de excitação em uma ou mais direções se torna muito mais alta que a energia térmica média das partículas, de maneira que as dimensões correspondentes a essas direções sejam efetivamente congeladas.

De fato, podemos dizer que, em muitas situações que ocorrem em matéria condensada, as leis da física são mais complexas e interessantes de serem analisadas em dimensões mais baixas. Um bom exemplo de um sistema que pode ser considerado efetivamente bidimensional é o grafeno (ver figura 2.1), que exhibe diversas propriedades interessantes não encontradas em estruturas tridimensionais [18–20].

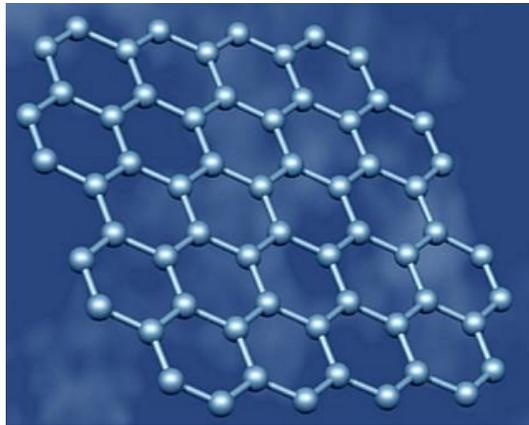


Figura 2.1: Grafeno, um exemplo de sistema real que se comporta como tendo baixa dimensionalidade.

O grafeno é um dos materiais que atualmente pode ser considerado de fato bidimensional. Ele se constitui de uma rede hexagonal de átomos de carbono interligados formando uma folha de espessura de um átomo. Nessa rede as interações seguem propriedades de um mundo bidimensional, e apresentam fenômenos tais como falta de "gap" de energia para os elétrons condutores, transporte balístico de elétrons a temperatura ambiente (o livre caminho médio no grafeno pode ser maior que a própria folha

## 2. Introdução

---

de grafeno) e uma condutividade que chega a ser 10 vezes maior que a do cobre [19,20]. Como podemos ver, os diversos efeitos de uma dimensionalidade reduzida podem mudar consideravelmente as propriedades de um material, que em nosso ambiente 3D é totalmente comum, como é o caso do carbono.

Materiais com fortes interações magnéticas entre seus constituintes são bons candidatos a sistemas que se comportam como bidimensionais, pois eles podem ser fabricados através de vários processos, possuindo as características necessárias para que suas interações mais fortes fiquem contidas em planos, linhas ou mesmo em pontos (ponto quântico).

Um dos modelos de spins com interações de curto alcance mais conhecidos é o modelo de Heisenberg [21]; este é uma boa aproximação inicial para vários sistemas magnéticos e é definido pela seguinte Hamiltoniana:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.1)$$

sendo que  $\vec{S}_i$  é o operador de spin localizado no sítio  $i$  e  $J_{i,j}$  a intensidade da interação de troca. Note que  $J_{ij} > 0$  indica um alinhamento ferromagnético enquanto  $J_{ij} < 0$  favorece o alinhamento antiferromagnético. Em tal Hamiltoniana o spin assume, em geral, magnitude  $s = 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$  e, por simplicidade, impomos o seguinte vínculo  $|\vec{S}|^2 = 1$ . Usando a aproximação clássica, considerando o spin muito grande ( $s \rightarrow \infty$ ), podemos tratar o spin como um vetor. Em geral a rede formada pelos sítios em que os spins estão localizados pode possuir dimensão diferente de três mesmo o spin tendo três componentes vetoriais.

Enfatizamos que o vácuo ferromagnético em um sistema bidimensional é composto por todos os spins alinhados na mesma direção, correspondendo ao estado de menor energia e que, em geral, quebra a simetria rotacional do sistema [22]. Sobre tal estado de menor energia pode-se gerar excitações tais como mágnons (ondas de spin) ou skyrmions, sendo que os primeiros advêm da quebra de simetria contínua de rotação que deverá gerar um tipo de bóson de Goldstone [23]. No contexto da matéria condensada e quasi-partículas é importante notar então que spins, átomos e moléculas são as partículas que realmente constituem nosso sistema, mas, em baixas energias, excitações

## 2. Introdução

---

coletivas é que irão ditar as principais propriedades do sistema. Por exemplo, sobre o estado fundamental (em que todos os spins estão alinhados apontando na mesma direção) poderão surgir ondas de spin ou mágnons a partir de qualquer temperatura infinitesimal; estes objetos (quasi-partículas) é que indicarão as quantidades dinâmicas e termodinâmicas do sistema em baixas energias.

Existem ainda muitas outras possibilidades de se trabalhar em matéria condensada com problemas efetivamente unidimensionais que retratam efeitos "reais" tais como os problemas de impurezas magnéticas solitárias em hospedeiros metálicos (efeito Kondo) ou os problemas de estados de borda no efeito Hall quântico [17, 24].

### 2.2 Matéria Condensada e quasi-partículas

A física de matéria condensada estuda sistemas de muitos corpos que se encontrem em estados condensados. Muitas vezes, materiais de baixas dimensionalidades exibem fenômenos que são melhor modelados não através da dinâmica de cada um de seus vários constituintes, mas, ao invés disso, através da análise do todo como um estado condensado de muitos corpos. Através dessas análises, novas idéias sobre quem seriam de fato as "partículas elementares" do sistema podem surgir, como é o caso dos fônons no estudo de vibrações propagadas em um sólido ou de mágnons (como apontado acima) no caso de sistemas magnéticos.

Em geral, nos estados condensados poderão emergir configurações de átomos que possuem características muito bem definidas e muitas vezes conservadas, comportando-se também como uma partícula (possuindo momento, carga, spin etc). Nessa análise surge o conceito de quasi partículas, estados bem definidos e com quantidades físicas características que poderão ser considerados como partículas fundamentais do sistema, apesar de tais estados serem na verdade somente configurações de vários elementos mais fundamentais. Visto que tais quasi-partículas não estão presentes na Hamiltoniana original do sistema, dizemos, portanto, que elas são emergentes.

Devido as interações complexas dos sistemas de muitos corpos (mesmo as Hamiltonianas mais simples são de difícil tratamento matemático), usualmente conseguimos determinar apenas o estado fundamental (seu vácuo) e os estados excitados estáveis de

## 2. Introdução

---

mais baixas energias de um determinado material [25]. No entanto, sabendo-se o espectro de excitação de baixas energias, podemos obter informações sobre a termodinâmica do sistema em baixas temperaturas e também a resposta do sistema a fracos campos externos aplicados. Em temperaturas próximas do zero absoluto, devido ao fator de Boltzman, teremos assim somente os estados de mais baixas energias contribuindo para a termodinâmica do sistema.

Considerando este tópico de emergência de "excitações elementares" em algum estado condensado, sugerimos o excelente artigo "More is different" [26] publicado por Anderson; tal trabalho elucida algumas dessas questões que tocam principalmente no cerne da filosofia científica sobre os métodos de reducionismo utilizados para se realizar ciência. De fato este tema, além de rico, é uma discussão antiga, na qual ainda não se chegou a uma conclusão definitiva, sendo ainda hoje um tópico para debates acalourados dentro da filosofia da ciência [27]. Apesar de ser um assunto fascinante não pretendemos tratá-lo a fundo aqui, por ser um campo extremamente vasto da filosofia da ciência. No entanto frizamos a ligação profunda que a física de matéria condensada possui com o tema.

Ao se considerar quasi-partículas gerando a dinâmica de um sistema, muitas vezes é mais produtivo trata-las de fato como os elementos fundamentais do sistema. O exemplo de vibrações se propagando em um sólido, que foi melhor elucidado ao se quantizar tais vibrações em quasi-partículas chamadas fônons, ao invés de se tentar resolver todas as equações dos muitos átomos que compõem a rede cristalina, é somente um entre vários modelos nos quais a análise do comportamento de conjunto se torna mais importante que a análise reducionista de cada parte que constitui o todo. Outros exemplos semelhantes seriam os pares de Cooper para se explicar certos tipos de supercondutividade; a análise de transporte de "holons" em determinados materiais ou o estudo de vórtices magnéticos como quasi-partículas responsáveis por determinadas transições de fase [30–32, 38].

Devido ao sistema possuir muitos corpos e graus de liberdade, a tarefa de analisar as equações dinâmicas e leis físicas de cada corpo se torna impraticável de modo que no estudo de matéria condensada e teorias de muitos corpos usamos então uma descrição

## 2. Introdução

---

efetiva do conjunto como um todo em baixas energias e não a análise última das leis mais fundamentais que compõe o sistema. Frizamos aqui que muitos teóricos defendem a idéia de que na verdade a análise reducionista pode ser falha em alguns casos e que saber somente as leis e partículas mais fundamentais não nos garante que ao somá-las possamos obter o comportamento do sistema de muitos corpos [26, 33, 34].

### 2.3 Sólitons

Boa parte da física é descrita por campos contínuos que, por vezes, não obedecem relações lineares entre si. Suponha que para um determinado sistema contínuo de campos não-lineares ouvesse uma solução que, além de bem comportada e finita, descrevesse algum tipo de entidade que não se dissipasse e mantivesse sua forma original através do tempo. Por muito tempo pensou-se que tal coisa fosse impossível, tanto por soluções não-lineares serem difíceis de se tratar, quanto por se imaginar que os efeitos dispersivos do campo destruíssem qualquer tipo de estrutura que fosse uma solução.

Esse tema somente começou a ser seriamente pesquisado em 1845 quando J. Scott Russell, um engenheiro escocês, observou uma única onda de água solitária atravessando o canal de Edinburgo. Russell chegou a perseguir a onda por várias milhas, segundo seu relato, sem notar diminuição na velocidade desta ou alteração em seu tamanho. Infelizmente, na época suas pesquisas tentando recriar o fenômeno foram menosprezadas, sendo somente muitos anos depois que a idéia de uma onda solitária (Sóliton) não-dispersiva foi desenvolvida e estudada mais profundamente. Na figura 2.2 podemos ver a reprodução de um sóliton em um laboratório e um experimento em larga escala de um sóliton viajando por um canal de água raso:

Segundo a Enciclopédia da Ciência Não-linear [35]

“•Sem o benefício do conhecimento prévio é absolutamente impressionante que sólitons sequer existam. Seria esperado que efeitos de não-linearidade destruíssem a configuração, especialmente sob a luz de experimentos com sistemas dinâmicos de baixa dimensão.

•Muitos sistemas físicos podem ser bem modelados com equações que admitem soluções solitônicas. De fato, sólitons foram observados em diversos sistemas e estes predominam no comportamento de longo prazo.

## 2. Introdução

---

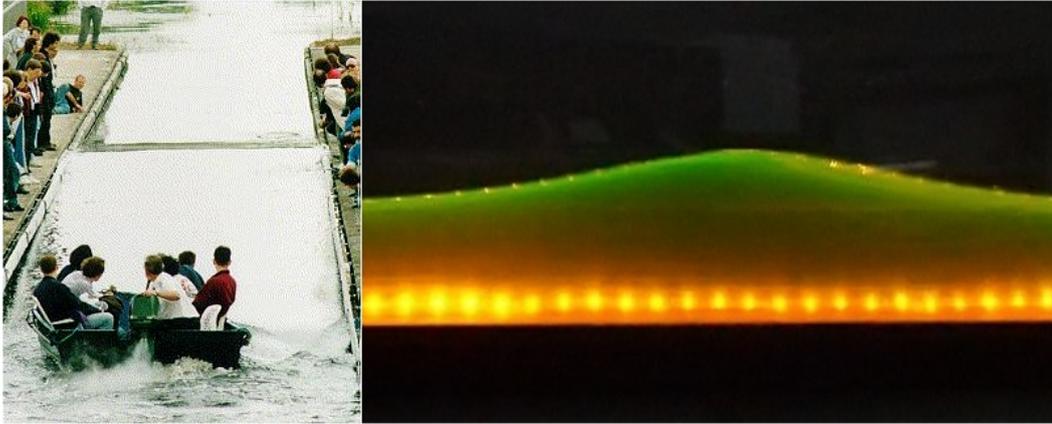


Figura 2.2: a) Um sóliton em um canal raso empurrando uma pequena embarcação. b) Visão transversal de uma onda solitária de água em um canal raso gerada em laboratório. Ela pode viajar por uma longa distância sem perder sua forma ou velocidade.

- Equações de sólitons possuem um profundo significado matemático.”

Usaremos como exemplo a hidrodinâmica para ilustrar a idéia inicial de um Sóliton. Podemos definir, inicialmente, o Sóliton como uma onda solitária que mantém sua forma e velocidade constantes enquanto se propaga, se mantendo intacta após uma colisão com outro sóliton [29, 37, 38]. Ainda usando o conceito hidrodinâmico, esperamos que uma onda qualquer inevitavelmente se disperse, principalmente em um meio não-linear. No caso de canais de água rasa, a altura de uma onda  $\phi$  obedece a seguinte equação [36]:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \frac{\partial^3\phi}{\partial x^3} - 6\phi\frac{\partial\phi}{\partial x} = 0 \quad (2.2)$$

Essa equação, além de ser não-linear, possui dissipação. À primeira vista, tais termos sugerem que ondas, em especial ondas solitárias e que não se dissipam, sejam impossíveis. Entretanto, o Sóliton observado por J. Russel era exatamente uma das soluções da EDP acima.

Uma onda solitária seria a sobreposição de uma infinidade de ondas de diferentes frequências. Devido a dispersão do meio, ondas de diferentes frequências devem viajar com velocidades diferentes, o que causaria a dispersão da onda solitária. Mas, em casos específicos, a não linearidade do meio pode reforçar ou amortecer determinadas frequências de ondas (Efeito Kerr, por exemplo, em ondas eletromagnéticas).

## 2. Introdução

---

Um sóliton surge justamente da competição dos termos não-lineares e dos termos dispersivos. Eles podem se anular mutuamente em determinadas situações, o que gera uma onda solitária que se propaga indefinidamente sem perder energia e mantendo seu formato original em meios dispersivos e não-lineares mesmo ao colidir com outra onda do mesmo tipo. De um ponto de vista matemático, devido aos campos que constituem estas estruturas serem integráveis, isso proporciona a elas a estabilidade característica que as impede de colapsar.

Apesar da analogia com hidrodinâmica, tais soluções estáveis já foram encontradas em diversas áreas da ciência, variando de sólitons cosmológicos, deslocamentos atmosféricos, Sólitons em ótica não-linear até transporte de energia em hélices de DNA [39–44].

De fato tais fenômenos são de grande interesse em várias áreas, por exemplo, um pulso de luz que mantenha seu formato e não se disperse, independente da distância, seria de grande utilidade para a indústria de comunicações. Além de fenômenos artificiais, sólitons também já foram observados em diversos cenários naturais, como por exemplo, sendo responsáveis por dinâmicas de formações atmosféricas na forma de nuvens do tipo "Morning Glory" [45] mostrado na figura 2.3.

Em todos esses casos, sólitons são compostos por inúmeras partículas fundamentais que constituem o sistema. Porém devido a suas características únicas de conservarem a energia (e outras cargas específicas de cada sistema), podemos utilizar métodos da física de matéria condensada para considerar sólitons como as partículas responsáveis por determinadas propriedades do material analisado. Essa conexão entre campos ( velocidade do vento, eletromagnético ou mesmo informações em hélices de DNA) e suas configurações estáveis que transportam quantidades bem determinadas nos fazem enxergar o sistema como contendo novas "partículas" fundamentais constituídas de tais campos [29, 30, 38, 46, 47] Assim, conectamos a Física da matéria condensada com as soluções matemáticas iniciais de problemas com dispersão e efeitos não-lineares.

## 2. Introdução

---



Figura 2.3: Exemplo de um tipo de sólton de pressão atmosférica, nuvem do tipo *morning glory*

### 2.4 Skyrmons como uma classe de Sólitons

Inicialmente, Skyrmons foram concebidos por Tony Skyrme [48–51] para descreverem Bárions. Eles constituem um caso particular de solução do tipo Sólton para o modelo sigma não-linear [13]. Porém diferente da maioria dos sólitons, skyrmions são sólitons topológicos, ou seja, eles são soluções para equações de campo não lineares que mantém sua forma, velocidade e cargas unicamente por motivos topológicos [1, 29, 52]. De fato a "carga" conservada por skyrmions é um número relacionado a sua topologia, chamado número de skyrmion (mais conhecida por carga topológica). Pode-se visualizar a topologia de um Skyrmon ao se projetar uma esfera de spins em um plano infinito, com os pontos no infinito representando o polo norte da esfera [25, 29]. A figura 2.4 mostra um skyrmion com carga topológica igual a 1 em duas dimensões espaciais. Note que a projeção estereográfica de uma esfera em um plano corresponde exatamente a identificarmos um ponto da esfera tridimensional (no caso o polo sul) com um ponto do plano (o centro deste). A partir desse ponto nos continuamos a correspondência de cada outro ponto da esfera sendo projetado no plano até que o ponto diametralmente

## 2. Introdução

---

inverso (polo norte) seja identificado com o "ponto" para  $r \rightarrow \infty$  que seriam todos os pontos do plano localizados no infinito. Frisamos também que esta é somente uma das várias maneiras de se projetar a esfera no plano, outra também possível seria identificar um ponto no equador da esfera como sendo o centro do plano bidimensional e projetar o restante da esfera de acordo com esse ponto (o que também resultaria em um skyrmion, porém de dois núcleos.).

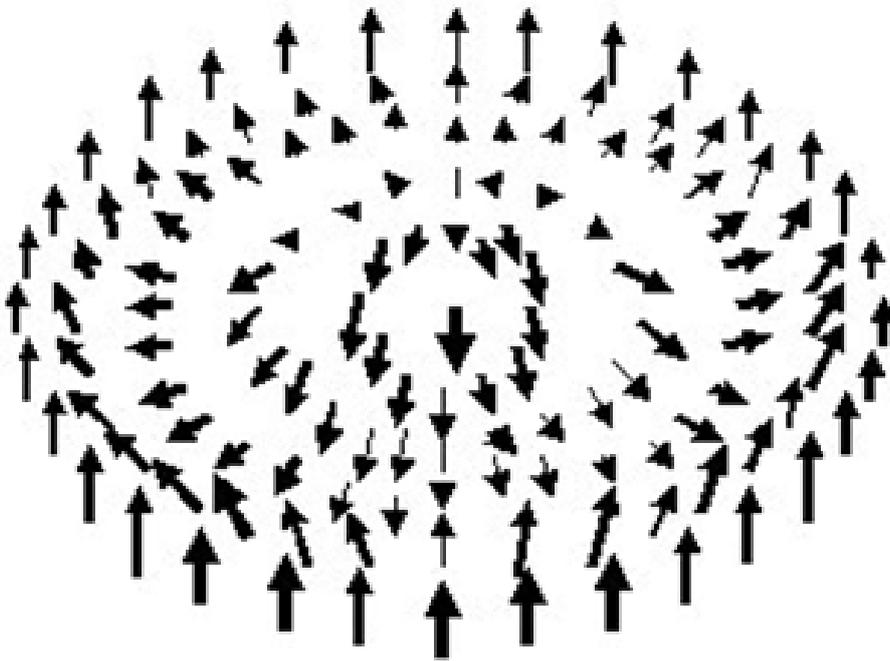


Figura 2.4: Ilustração da projeção de uma esfera de spins em um plano bidimensional.

Apesar de terem sido criados inicialmente para descreverem Bárions e interações inter-nucleares, Skyrmions foram encontrados como soluções topológicas para o efeito Hall quântico e foram previstos como excitações em vários sistemas magnéticos de matéria condensada [3,24,53,54]. Tais quasi-partículas foram introduzidas no contexto do modelo de Heisenberg bidimensional por Belavin e Polyakov [55] a cerca de 50 anos atrás e devem responder por várias características magnéticas de tais sistemas.

Devido a Skyrmions terem energia finita [1,56], tais estruturas podem ser excitadas em materiais através de diferentes métodos para que se possa estudá-las. Mesmo energia térmica poderia criar tais quasi-partículas em determinados ferromagnetos, de modo que boa parte de sua termodinâmica e propriedades magnéticas devam ser afe-

## 2. Introdução

---

tado por estes.

Matematicamente, skyrmions podem surgir a partir do modelo sigma não-linear (que em Matéria Condensada, representa o limite contínuo de um magneto de Heisenberg isotrópico). Este modelo define qualquer sistema que possua sua Lagrangeana dada por

$$L = \frac{1}{2}(\partial_\mu \vec{\phi}) \cdot (\partial^\mu \vec{\phi}), \quad (2.3)$$

adicionada do vínculo não linear  $\vec{\phi} \cdot \vec{\phi} = 1$ . Em uma análise geral, tal modelo descreve a projeção de qualquer campo escalar de várias componentes ( $\vec{\phi}$ ) em um espaço alvo  $n$ -dimensional [13].

Se usarmos como campos escalares as 3 componentes do spin, e ainda considerando a aproximação clássica, supondo o spin como vetor, a Lagrangeana do modelo sigma não-linear ganha um significado físico descrevendo um campo de spins.

No contexto do ferromagneto de Heisenberg isotrópico, o sistema é descrito pela interação de cada spin com seus vizinhos mais próximos. Se discretizarmos uma rede de spins e considerarmos esta rede quadrada e bidimensional teremos a Hamiltoniana de Heisenberg abaixo:

$$H = -J \sum \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.4)$$

Como somamos somente os quatro primeiros vizinhos do spin ( $\vec{S}_{x+}, \vec{S}_{x-}, \vec{S}_{y+}, \vec{S}_{y-}$ ) definimos:

$$T^\alpha = S_i^\alpha (S_{x+}^\alpha + S_{x-}^\alpha) + S_i^\alpha (S_{y+}^\alpha + S_{y-}^\alpha). \quad (2.5)$$

Aonde  $\alpha$  representa cada componente do spin. Usando agora a expansão em série de Taylor para cada spin vizinho em torno do spin central:

$$\begin{aligned} S_{x+}^\alpha &= S_i^\alpha + a \frac{\partial S_i^\alpha}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial x^2} + \dots \\ S_{x-}^\alpha &= S_i^\alpha - a \frac{\partial S_i^\alpha}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial x^2} + \dots \\ S_{y+}^\alpha &= S_i^\alpha + a \frac{\partial S_i^\alpha}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial y^2} + \dots \\ S_{y-}^\alpha &= S_i^\alpha - a \frac{\partial S_i^\alpha}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial y^2} + \dots, \end{aligned} \quad (2.6)$$

teremos que

$$\frac{T^\alpha}{2} = 2(S_i^\alpha)^2 + \frac{a^2}{2} \left[ \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S_i^\alpha}{\partial y^2} \right] S_i^\alpha \quad (2.7)$$

## 2. Introdução

---

Aproximando agora o somatório sobre todos os spins por uma integral no plano  $xy$  (lembre-se a Hamiltoniana possui spins tridimensionais mas a rede de spins é bidimensional) podemos fazer:

$$H = -J \sum \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \approx -J \int \sum_{\alpha=1}^3 T^\alpha \frac{d^2r}{a^2}. \quad (2.8)$$

Assim finalmente obtemos uma Hamiltoniana que pode ser relacionada com o modelo sigma não-linear, pois substituindo de volta todas as componentes de  $T^\alpha$  e somando-se sobre todos os spins teremos

$$H = -2J \int \vec{S}^2 \frac{d^2r}{a^2} - \frac{Ja^2}{2} \int \left[ \frac{\partial^2 S^\mu}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S^\mu}{\partial y^2} \right] S_\mu \frac{d^2r}{a^2}. \quad (2.9)$$

Ao tratar os spins pela aproximação clássica, devemos usar o vínculo  $\vec{S}^2 = 1$  o que implica numa soma infinita no primeiro termo da equação. Esse termo não corresponde a uma quantidade física, devendo ser subtraído do resultado final. Já através da integração por partes do segundo termo podemos transformar a derivada segunda de um campo em uma derivada ao quadrado. Assim:

$$H_\sigma = \frac{J}{2} \int \sum_{\alpha=1}^3 \left[ \left( \frac{\partial S^\alpha}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial S^\alpha}{\partial y} \right)^2 \right] d^2r = \frac{J}{2} \int (\partial^\mu \vec{S}) \cdot (\partial_\mu \vec{S}) d^2r \quad (2.10)$$

Note que a Hamiltoniana de Heisenberg pode então ser descrita como 3 campos escalares (componentes dos spins) que obedecem ao vínculo  $\vec{S}^2 = 1$ , sendo assim, análogos ao modelo sigma-não linear [25].

Porém, o modelo sigma não-linear descreve, em geral, a projeção estereográfica de uma variedade de  $N$  dimensões em um espaço alvo de  $D$  dimensões. No caso do ferromagneto de Heisenberg poderemos identificar qual é a “quantidade” mapeada usando a projeção estereográfica dos campos de spin. Ao final de tal projeção podemos identificar claramente que, na verdade, skyrmions são de fato soluções estáveis para o modelo de Heisenberg que correspondem ao mapeamento de uma esfera tridimensional de spins sobre um plano bidimensional [52].

De fato, se fizermos:

$$w = \frac{S^x + iS^y}{1 + S^z}, w_1 = \frac{S^x}{1 + S^z}, w_2 = \frac{S^y}{1 + S^z} \quad (2.11)$$

## 2. Introdução

---

Estaremos, matematicamente, projetando uma esfera que contém spins apontando em todas as direções espaciais em um plano bidimensional. Assim, a Hamiltoniana se tornará:

$$H_\sigma = \frac{J}{2} \int g_{ij} (\partial_\mu w^i) (\partial^\mu w^j) d^2r, \quad (2.12)$$

com a métrica  $g_{ij}$  descrevendo as propriedades de curvatura do sistema, sendo dada por:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 4/(1 + |w|^2) & 0 \\ 0 & 4/(1 + |w|^2) \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Fazendo essa substituição, encontramos:

$$H_\sigma = \frac{J}{2} \int d^2r \left[ \frac{4|\partial_\mu w|^2}{|1 + |w|^2|^2} \right] \quad (2.14)$$

Se fizermos as simplificações  $\partial_z = (\partial_x - i\partial_y)/2$ ,  $\partial_z^* = (\partial_x + i\partial_y)/2$ ,  $z = x + iy$ ,  $z^* = x - iy$ , então o numerador da integral poderá ser escrito como:

$$|\partial_\mu w|^2 = |\partial_\mu w \partial^\mu w| = |(\partial_x w)^2 + (\partial_y w)^2| = 4 \cdot (\partial_z w) \cdot (\partial_z^* w^*) \quad (2.15)$$

Assim podemos separar a Hamiltoniana em dois termos. O primeiro corresponde a integral, sobre todo o espaço, de  $\vec{S}^2$  tendo uma energia infinita devido ao vínculo  $\vec{S} \cdot \vec{S} = 1$  (devemos renormalizar esse termo, de modo que ele se torne nulo, para obtermos soluções fisicamente possíveis) e um segundo termo correspondendo a uma carga topológica conservada (pois tem uma relação intrínseca com a área da esfera de spins e quantas vezes ela é coberta, ou seja mapeada, pelo plano bidimensional).

$$H_\sigma = 8J \int \frac{|\partial_z^* w|^2}{|1 + |w|^2|^2} d^2r + JA|Q| \quad (2.16)$$

O termo  $A$  corresponde a área da esfera de spins e  $Q$  é a carga topológica, também chamada de número de Skyrmion, dada por:

$$Q = \frac{4}{A} \int \frac{(\partial_z w)(\partial_z^* w^*) - (\partial_z^* w)(\partial_z w^*)}{|1 + |w|^2|^2} d^2r \quad (2.17)$$

Assim, ao exigirmos que  $|\partial_z^* w| = 0$  encontramos algumas soluções estáticas e de energia finita para o modelo. De fato, como a energia vem inteiramente da interação dos spins com seus vizinhos, e a solução é o equivalente ao mapeamento de uma esfera de spins, temos que a energia de tais soluções será  $E = 4\pi|Q|J$ .

## 2. Introdução

Além da condição  $|\partial_z^* w| = 0$ , também devemos definir as condições de contorno. Como a energia depende do ângulo entre os spins vizinhos devemos ter que no infinito todos os spins estejam alinhados em uma mesma direção, caso contrário teríamos uma energia infinita. Essa exigência corresponde exatamente a relacionar todos os pontos no infinito a um único ponto na esfera de spins. As soluções que atendem tais exigências são chamadas Skyrmons de Belavin-Polyakov, que podem ser essencialmente de dois tipos, dependendo das condições de fronteira com  $r \mapsto \infty$ . Para  $r \mapsto \infty \Rightarrow \vec{S}_r \mapsto (1, 0, 0)$  obtemos a estrutura de dois núcleos; já para  $r \mapsto \infty \Rightarrow \vec{S}_r \mapsto (0, 0, 1)$  um Sóliton contendo apenas um núcleo surge [1, 25, 56].

Podemos ver a configuração para um Skyrmion de Belavin-Polyakov de um e dois núcleos na figura 2.5. Apesar de ambos possuírem a mesma carga topológica (+1Q) e mesma energia ( $E = 4\pi|Q|J$ ) a visão tridimensional deles difere exatamente por cada um corresponder a uma forma diferente de se mapear a esfera de spins (o skyrmion de um núcleo tem o pólo sul da esfera identificado como centro do plano enquanto o de dois núcleos tem um ponto do equador identificado como o centro do plano).

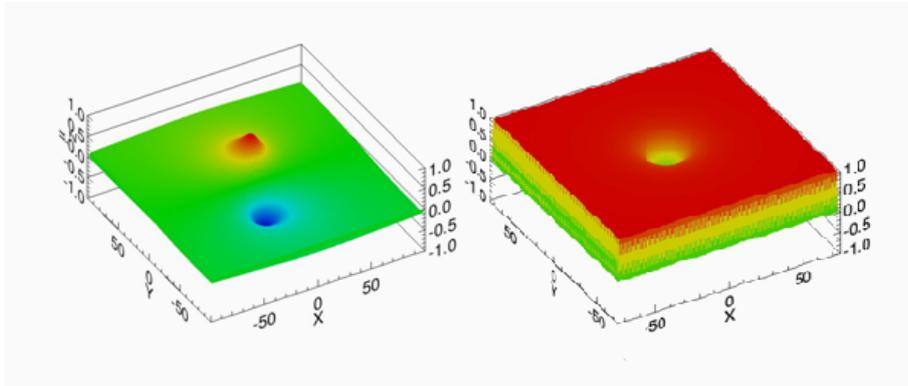


Figura 2.5: Projeção dos spins em Z para ambos tipos de Skyrmons em 3D.

É importante notar também que a exigência de que  $|\partial_z^* w| = 0$  nos daria exatamente as equações de movimento dos spins; a mesma equação de movimento de dinâmica de spins, que, ao se usar a aproximação clássica, deixa de ter um comutador e tem um operador de multiplicação vetorial:

$$\frac{\partial \vec{S}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\vec{S}, h_{sigma}] \Rightarrow \frac{\partial \vec{S}}{\partial t} = -\vec{S} \times \frac{\partial h_{sigma}}{\partial \vec{S}} \quad (2.18)$$

## 2. Introdução

---

Porém em uma perspectiva reducionista, as soluções do modelo seriam encontradas através da resolução de tais EDO's para cada spin da rede. Se substituirmos  $h_{sigma}$  pela Hamiltoniana de Heisenberg e parametrizarmos o spin como  $\vec{S} = (\text{sen}\theta\text{cos}\phi, \text{sen}\theta\text{sen}\phi, \text{cos}\theta)$  e  $\text{cos}\theta = m$  encontraremos as seguintes EDP's para resolver:

$$\frac{1}{J} \frac{\partial m}{\partial t} = -(1 - m^2) \nabla^2 \phi + 2m \vec{\nabla} m \cdot \vec{\nabla} \phi \quad (2.19)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{m^2 \nabla^2 m}{1 - m^2} + \frac{m (\vec{\nabla} m)^2}{(1 - m^2)^2} + m (\vec{\nabla} \phi)^2 \quad (2.20)$$

Podemos ver que a abordagem topológica, usando skyrmions como alguns dos tipos de “partículas” que geram a dinâmica do sistema, resulta em uma solução mais fácil e elegante que a tentativa de resolver analiticamente as equações dinâmicas para cada spin individualmente.

Especificamente, para o caso de uma excitação de carga topológica  $Q = +1$  (a esfera de spins mapeada uma vez no plano), as soluções explícitas de tais EDP's seriam:

$$m_s = \frac{r^2 - R^2}{r^2 + R^2}, \phi_s = \text{arctg}\left(\frac{y}{x}\right) \quad (2.21)$$

Estados estáveis de Skyrmions já haviam sido previstos [39, 42, 54] mesmo na década de 90, principalmente em gases de elétrons, mas somente recentemente foram encontrados estados estáveis em outros materiais. Em especial, ferromagnetos com termo de assimetria de Dzyaloshinsky-Moriya(DM) [57] a baixas temperaturas, demonstrando que tais excitações podem compor o espectro de baixa energia para determinados materiais [6–9, 11]. Pesquisas também demonstraram que podem existir materiais que possuem redes organizadas de skyrmions(ao invés de um estado de spins totalmente alinhados)como seu estado fundamental, os denominados “cristais de skyrmions” (também chamados fase SkX) [3, 4].

## 2.5 Métodos de simulação

Para simularmos ferromagnetos com skyrmions, usamos o método de dinâmica de spins, que corresponde a resolução numérica das equações de movimento dos spins sem utilizar efeitos de temperatura ou modelos estatísticos. Para encontrarmos as equações que regem o movimento dos spins, utilizamos a aproximação clássica da equação

## 2. Introdução

---

de movimento de Heisenberg:

$$\frac{\partial \vec{S}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\vec{S}, h_{sigma}] \Rightarrow \frac{\partial \vec{S}}{\partial t} = -\vec{S} \times \frac{\partial h_{sigma}}{\partial \vec{S}}. \quad (2.22)$$

A resolução dessa EDP para um campo de spins nos daria sua evolução, dadas as condições iniciais. O objetivo do trabalho atual não foi obter a solução analítica de tal problema, mas sua solução numérica através de métodos computacionais. Para isso, discretizamos a rede, fazendo com que cada sítio possua um spin de módulo unitário separado por uma distância de uma unidade de seus vizinhos mais próximos (primeiros vizinhos). A rede é ordenada de forma que cada spin tenha somente quatro vizinhos (rede quadrada) e este irá interagir somente com seus quatro vizinhos mais próximos. Ao substituírmos  $h_{sigma}$  pela Hamiltoneana de Heisenberg, obteremos as equações do ferromagneto de Heisenberg (usamos sempre  $J > 0$ ) bidimensional. Assim, deveremos resolver a EDP para cada spin  $i$ :

$$\frac{\partial \vec{S}_i}{\partial t} = \vec{S}_i \times \frac{\partial}{\partial \vec{S}_i} \left[ J \sum_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right], \quad (2.23)$$

sendo que a soma em  $j$  ocorre sobre todos os 4 vizinhos. Desse modo, as simulações constituirão a resolução de  $n$  EDPs por um método computacional, onde  $n$  é o número de spins da rede. A resolução de tais EDP's nos dará a evolução dos spins individuais; porém a partir da análise da rede como um todo poderemos observar o comportamento do Skyrmion. Este é inserido na simulação como a condição inicial da configuração de spins na rede. Sua solução analítica, infinita e contínua é colocada como estado inicial da rede discreta e finita e, a partir do método de dinâmica de spins, analisamos se a excitação é estável e quais são suas propriedades. Com essas equações e a rede já modelada com as condições iniciais, utilizamos um método de integração numérico para os experimentos.

Utilizamos especificamente o método de integração Preditor-Corretor por alguns motivos particulares. Os métodos de integração de Euler, Rungee-Kutta e Taylor são chamados de métodos de um só passo porque utilizam somente a informação de um ponto anterior para calcular os pontos sucessivos, isto é, em geral, é necessário somente  $Y_i$  para se calcular  $Y_{i+1}$ , sendo  $i$  o número do passo de integração. Já no método

## 2. Introdução

---

Preditor-Corretor, que é um método multi-passo, usamos vários pontos para calcular o próximo, ou seja, para se calcular  $Y_{i+1}$  serão necessários  $Y_i, Y_{i-1}, Y_{i-2}$  e  $Y_{i-3}$ . É importante notar que este método não tem capacidade de se iniciar sozinho, então utiliza-se inicialmente 4 passos de Runge-Kutta de quarta ordem para iniciar o algoritmo de Preditor-Corretor.

Uma característica importante do método utilizado é que podemos determinar se o tamanho do passo é pequeno o suficiente para que se tenha a precisão desejada na determinação de  $Y_{i+1}$  ainda que este seja grande o suficiente para evitar cálculos desnecessários e que consumam tempo. Isso foi extremamente proveitoso nas simulações, em especial porque podemos escolher o tamanho do passo de modo que a energia da excitação fique conservada, o que é muito importante para se obter resultados precisos e condizentes com os experimentos reais. Também devemos lembrar que trabalhamos com redes de tamanhos superiores a  $150a \times 150a$  (sendo  $a$  a distância entre spins). Visto que o aumento da rede faz com que o tempo de simulação cresça exponencialmente, um bom integrador foi essencial para a pesquisa.

Ao tentarmos simular filmes finos, é importante lembrar que apesar destes serem quasi-bidimensionais e possuírem tamanho finito, para a escala de um Skyrmion, o filme deve ser o mais similar possível a um plano infinito. Como as simulações são numéricas, evidentemente, não é possível fazer um plano infinito e por isso utilizamos condições de contorno sobre as bordas da rede. Tais condições de contorno periódicas podem ser interpretadas como se houvessem infinitos Skyrmions de mesma configuração enfileirados ao redor do Skyrmion principal ou, numa abordagem mais geométrica, como se nosso plano bidimensional confinasse o Skyrmion em um toro simples (frisamos aqui que esta é somente uma analogia, pois nosso espaço é bidimensional e não sofre efeito de curvaturas). Lembramos também que, por limitações da própria integração, nossa simulação não conserva a energia para tempos extremamente grandes. Todas as simulações foram realizadas através de recursos computacionais do Departamento de Física da UFV.

## Resultados: Skyrmions de dois núcleos

### 3.1 Conservação de energia e estabilidade

Começamos nossa simulação a partir do caso mais simples possível, assumindo um sistema fechado e sem dissipações. Desse modo, a integração das equações de movimento deve conservar a energia total do sistema. Sendo um método numérico, é esperado que a integração deixe de ser confiável a partir de tempos muito longos, de modo que usamos a energia total como um medidor da exatidão numérica. Todos os resultados apresentados foram obtidos somente para tempos de integração para os quais a energia se mantinha constante ou flutuava dentro de um limite mínimo menor que 0.001% de seu valor. Também é importante frisar que nosso sistema é finito, sendo que as bordas do sistema exigem uma atenção especial, pois podem gerar instabilidade da excitação ou flutuações de energia. De fato, a simulação inicial teve como objetivo verificar unicamente se Skyrmions seriam estáveis em redes discretas, pois, mesmo com os resultados de Skyrme a instabilidade de campos unitários já foi muito discutida [58], principalmente em duas dimensões e em sistemas discretos, nos quais simetrias contínuas deixam de ser existentes [1, 56, 59].

Em simulações de sistemas finitos podemos fixar as bordas em um valor específico (em geral o valor da condição de contorno no infinito), deixar as bordas totalmente livres ou usar condições de contorno periódicas. As simulações iniciais mostraram que as bordas totalmente livres causam a perda gradual de energia do sistema (ele não é fechado), enquanto bordas totalmente fixas se mostraram conservando a energia total,

### 3.Resultados: Skyrmions de dois núcleos

---

mas tornando os skyrmions totalmente instáveis. Assim usamos condições de contorno periódicas para as excitações, sendo que cada tipo de skyrmions exigiu um tipo específico de periodicidade da borda. Para o skyrmion de dois núcleos devemos levar em conta que

$$r \mapsto \infty \Rightarrow \vec{S}_r \mapsto (1, 0, 0) \quad (3.1)$$

nas bordas da rede, ou seja os spins tendem a apontar para uma direção qualquer no plano magnético (escolhemos, por simplicidade, a direção  $x$ ). Ao se mapear a esfera de spins com essa condição de contorno, obtemos o Skyrmion de dois núcleos. Apesar de possuir tais núcleos, é importante frisar que esta é somente uma quasi-partícula e que ela não é igual a dois skyrmions de um núcleo. De fato, os dois núcleos são partes da mesma estrutura e como veremos a destruição de um implica na destruição total da excitação.

Devido a todos os spins tenderem a apontar na mesma direção no infinito espacial, usamos uma condição de contorno periódica para que os spins de uma borda tendam a se alinhar paralelamente aos da borda oposta, mantendo assim a configuração desejada. A figura 3.1 mostra a configuração para um skyrmion de dois núcleos.

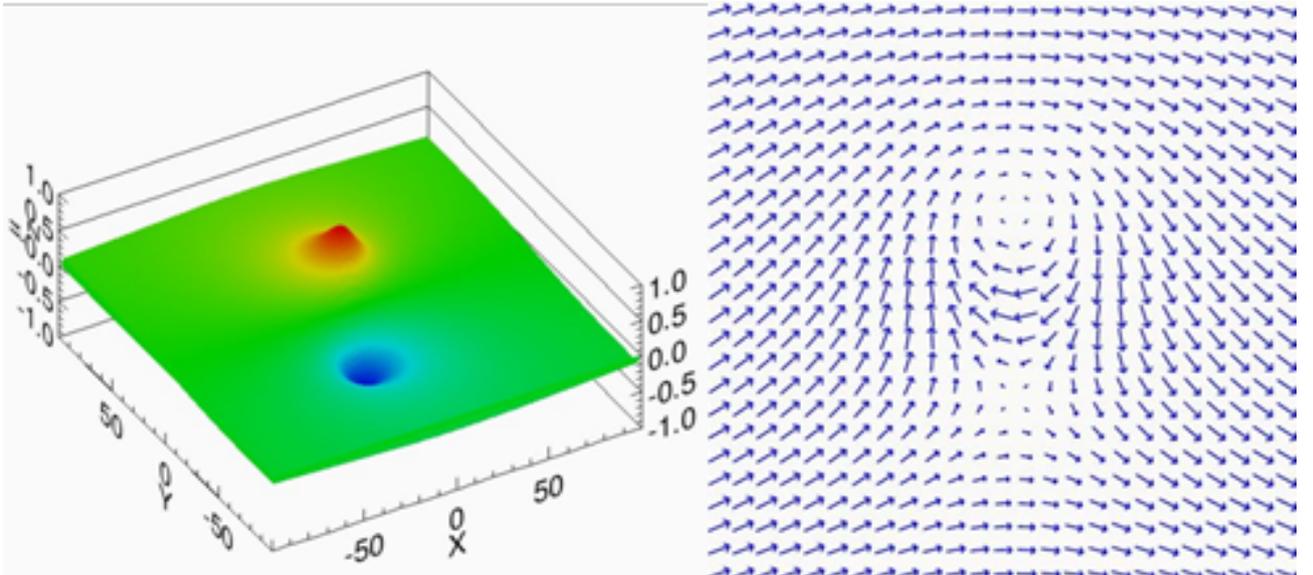


Figura 3.1: Visão tridimensional e projeção dos spins no plano  $xy$  de um skyrmion de dois núcleos.

## 3.2 Rede sem impurezas

Continuando nossa análise do modelo mais simples, considerando apenas um skyrmion de dois núcleos no centro de uma rede finita com condições de contorno periódica e sem nenhum campo externo ou defeito de rede, alguns novos dados em relação à sua energia foram obtidos. Lembramos que o estudo desse modelo também é de grande interesse devido ao fato de que em filmes magnéticos finos os spins tendem a se alinhar paralelamente ao plano do filme (na direção  $x$  por exemplo).

Vemos, através das simulações, que os dois núcleos da excitação se mantêm estáveis desde que a rede seja suficientemente grande para contê-los. Caso a rede seja pequena demais, os próprios núcleos do skyrmion estarão fora da rede, de modo que não fará sentido a análise de tal excitação como uma quasi-partícula. Obtivemos que para um skyrmion com a separação de  $R = 4a$  (sendo  $a$  o valor de espaçamento da rede) entre seus dois núcleos, a rede deve ser pouco maior que  $10a$ . Por outro lado, para skyrmions muito pequenos em relação ao tamanho da rede (cerca de um décimo do tamanho total da rede) o skyrmion parece ser instável e os dois núcleos colapsam.

Em sistemas infinitos, temos, por resultados analíticos, que a energia de um skyrmion de dois núcleos deve ser  $E_s = 4\pi JS^2$  [1, 56] independentemente do tamanho  $R$  do mesmo (o modelo sigma é invariante de escala fazendo a energia de suas excitações não depender do tamanho destas). Porém, para os sistemas finitos e discretos, encontramos um comportamento ligeiramente diferente. Os skyrmions de dois núcleos estudados tendem a ter uma energia maior que o valor esperado, sendo que essa energia tende a  $E_s = 4\pi JS^2$ , conforme aumentamos o tamanho  $L$  da rede. Podemos ver isso através do gráfico da figura 3.2.

Tal excesso na energia é extremamente interessante se notarmos a tendência observada dos núcleos girarem em torno do seu centro de massa. Essa rotação não é prevista para redes infinitas, visto que o sóliton é uma solução estática.

Em redes finitas, observamos que a frequência com que os núcleos giram decai rapidamente com o aumento do tamanho da rede, de modo que se fizermos a rede tender a infinito, teremos a solução esperada de um sóliton estático. Vemos assim que a energia

### 3.Resultados: Skyrmions de dois núcleos

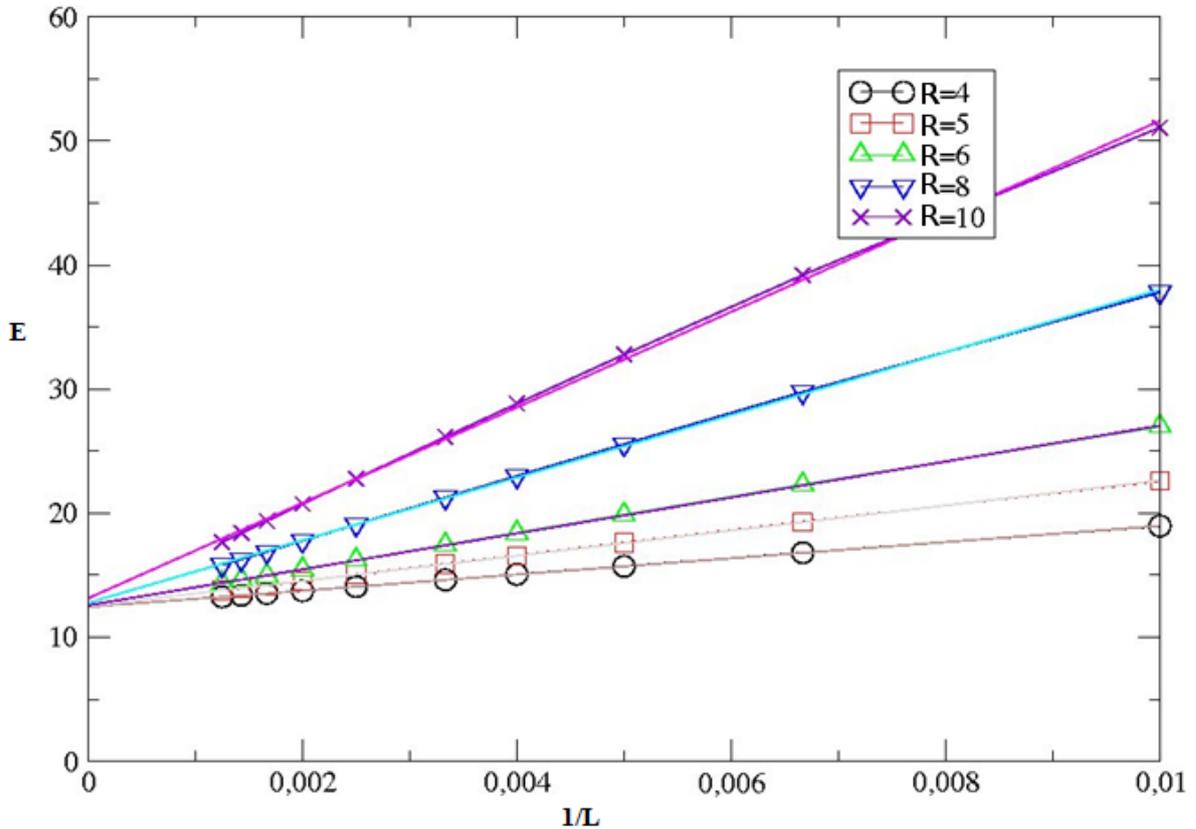


Figura 3.2: Gráfico de energia pelo inverso do tamanho da rede para um skyrmion de dois núcleos. Para uma rede infinita a energia tende ao valor esperado da teoria analítica.

excedente que o sóliton possui na rede discreta vem justamente de sua rotação. De fato a rotação dos núcleos possui uma frequência bem definida que se mantém constante através do tempo de integração. A figura 3.3 demonstra a posição do núcleo através do tempo de integração na coordenada  $x$  e sua respectiva transformada de Fourier.

Nota-se também que quanto menor a rede, mais as ondas de spin desfiguram a forma dos núcleos. Porém, numa rede grande, estas ondas quase não ocorrem. As simulações sugerem que o movimento de rotação do sóliton gere tais ondas de spin, de modo que estas não são observadas em uma rede grande por causa do sóliton ter uma frequência de giro extremamente baixa. Note também que nossas simulações não levam em conta efeitos de temperatura de modo que as ondas de spin não advêm de flutuações térmicas.

Vemos na figura 3.4 a imagem 3D de um skyrmion, evidenciando os dois núcleos

### 3.Resultados: Skyrmions de dois núcleos

---

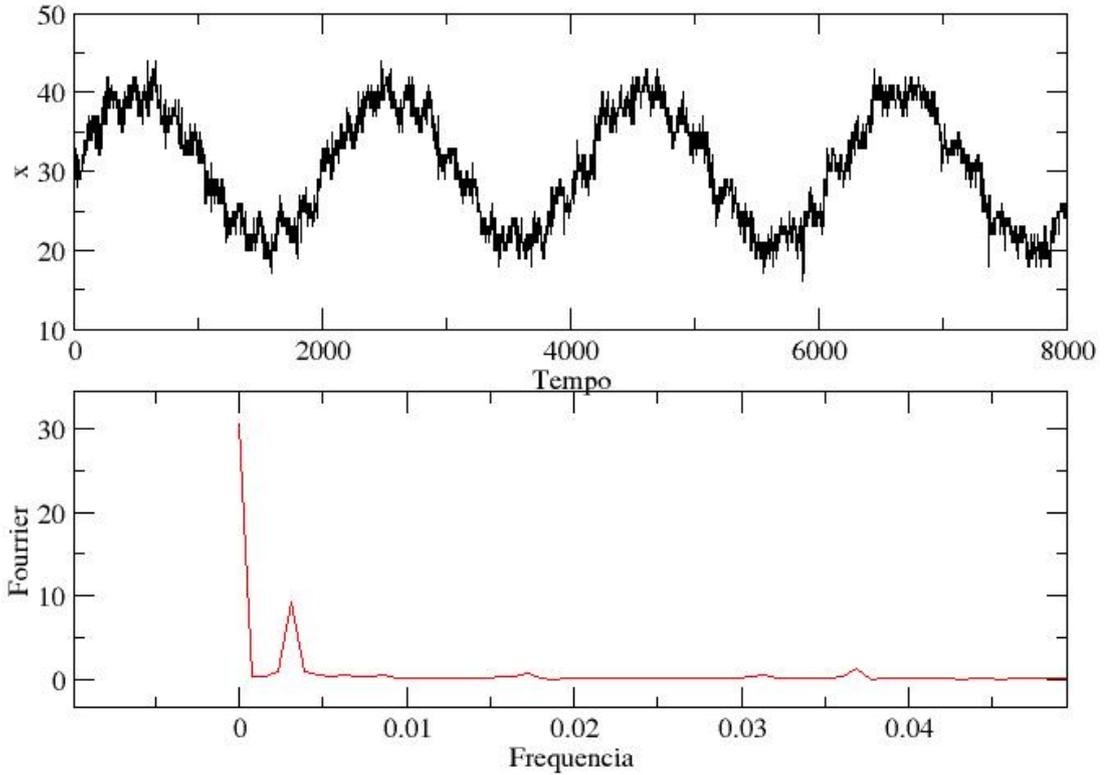


Figura 3.3: Gráfico mostrando a posição em  $x$  de um dos núcleos do skyrmion pelo tempo de integração e sua transformada de Fourier.

sendo deformados pelas ondas de spin da rede.

O estudo da relação entre a energia da excitação, sua frequência de giro e o tamanho da rede sugere que a energia total é dada por [1]:

$$E_t = 4\pi JS^2 + \alpha\varpi(L, R), \quad (3.2)$$

onde  $\alpha$  uma constante e  $\varpi(L, R)$  a frequência de rotação que depende somente do tamanho da rede e do tamanho do sóliton.

### 3.Resultados: Skyrmions de dois núcleos

---

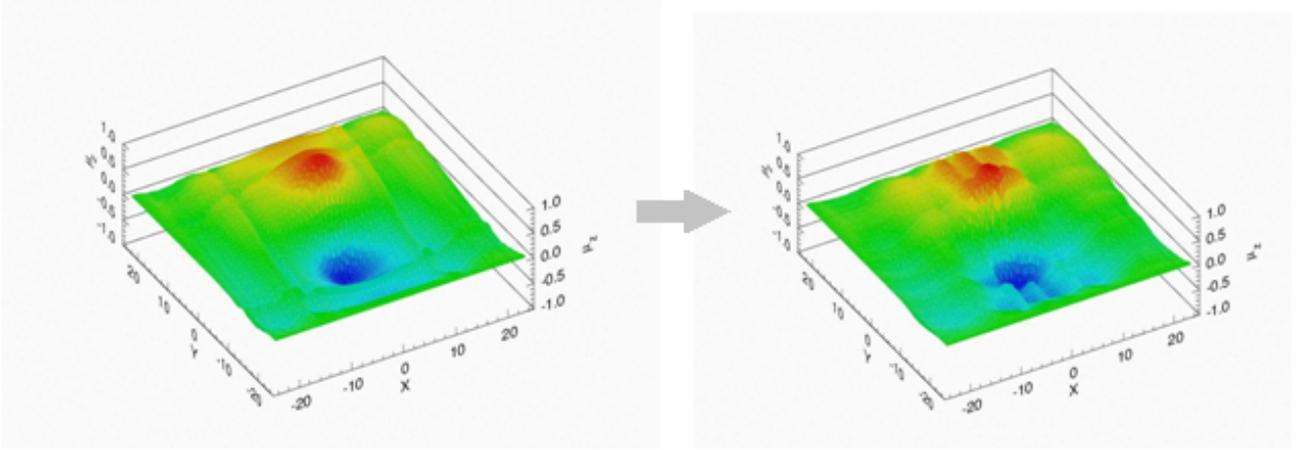


Figura 3.4: Comparação de um skyrmion estático e um skyrmion deformado por ondas de spin.

### 3.3 Rede com campo magnético aplicado

Ao colocarmos um campo de intensidade constante na direção e sentido do eixo  $x$  positivo, observamos que a frequência de rotação dos núcleos aumenta consideravelmente, dependendo da intensidade do campo, porém o centro do sóliton não se desloca e este continua a orbitar o centro da rede sem se mover como um todo. Esse comportamento é semelhante aos casos experimentais em que se aplica um campo alinhado com os spins da borda do skyrmion para estabilizar os mesmos [5–11]. Note que ao se tratar do skyrmion de dois núcleos os spins se alinham com o eixo  $x$  de modo que o campo nessa direção não os deformará, somente afetará a estrutura de vórtice/anti-vórtice do centro do skyrmion, ou seja, fará com que os dois núcleos girem mais rapidamente.

Para um campo de valor  $0.5J$ , vemos perfeitamente os núcleos orbitando rapidamente o centro da rede. A frequência da órbita continua a diminuir conforme diminuimos a amplitude do campo em  $x$  positivo. Com um valor de  $0.001J$ , o efeito do campo nos núcleos é quase imperceptível e estes passam a orbitar o centro da rede como se não houvesse influência externa.

Comparando as energias, vemos que quanto maior a amplitude do campo aplicado, mais negativa a energia da excitação. Porém, ela é constante enquanto o campo estiver ligado e assim que este é desligado a energia da excitação vai rapidamente para

### 3.Resultados: Skyrmions de dois núcleos

---

o valor esperado de um sóliton numa rede pura e sem campos externos.

Também analisamos a aplicação de um campo magnético senoidal em  $x$ . O campo oscilante, inicialmente acelera a rotação dos núcleos em torno do seu centro de massa e logo inverte essa aceleração, de modo que os núcleos freiam e começam a orbitar no sentido oposto (anti-horário no caso) até o campo voltar a inverter a aceleração e eles retornarem a girar no sentido horário. O movimento que os núcleos executam enquanto o campo está ligado é semelhante a um sistema de oscilador harmônico variando a aceleração angular senoidalmente.

Esse processo se repete até o momento em que o campo é desligado. Quando isso acontece os núcleos ficam parados no local onde estavam e voltam a ter a frequência de órbita esperada para o tamanho da rede atual. O efeito geral do campo senoidal é, então, fazer os núcleos oscilarem na órbita de seu centro de massa, sendo que a amplitude dessa oscilação será dada pela amplitude do campo aplicado enquanto a frequência do movimento dos núcleos será dada pela frequência do campo.

As energias e magnetizações, como no outro caso, caem ao valor esperado da excitação pura assim que o campo é desligado. Enquanto o campo está ligado, a energia da excitação varia senoidalmente como mostrado na figura 3.5.

Notamos também que a magnetização em  $x$  (direção do campo) e a magnetização total permanecem constantes, porém a magnetização em  $y$  e  $z$  variam senoidalmente .

### 3.4 Rede com impurezas não-magnéticas

Alguns super-condutores apresentam fases em que o campo magnético consegue penetrar superficialmente neles através da formação de pequenos vórtices magnéticos (super condutividade tipo-II). Tais vórtices podem ser manipulados por pequenas impurezas contidas no material que interagem com estas partículas de várias maneiras diferentes [31, 32, 60]. Além de tais fenômenos, relativamente bem compreendidos, recentemente foram propostos mecanismos para fixar skyrmions através de impurezas [14, 16]. A partir de tais fenômenos como fonte de motivação, tentamos estudar o efeito de impurezas em configurações de Skyrmions e estabelecer se haveriam mudanças drásticas no comportamento destes devido a impurezas. Para gerar a impureza não-

### 3.Resultados: Skyrmions de dois núcleos

---

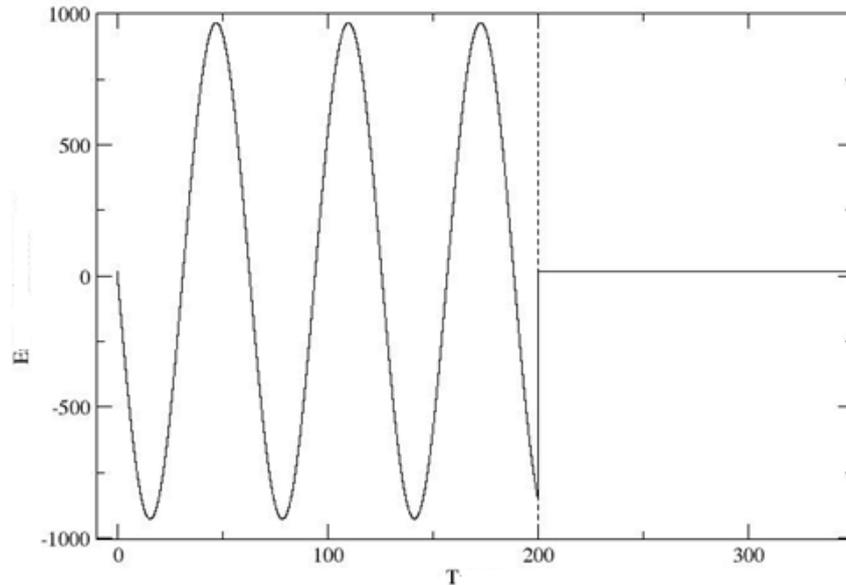


Figura 3.5: Variação senoidal da energia da excitação conforme o campo aplicado. Assim que o campo é desativado a energia cai ao valor normal da excitação.

magnética retiramos quatro spins vizinhos da rede. Esse defeito é colocado ao longo de um eixo perpendicular a linha que une os dois núcleos. A configuração inicial de nosso sistema com defeito de rede pode ser vista na figura 3.6.

Começamos colocando a impureza no centro do sóliton. Para pequenas distâncias entre os núcleos, o skyrmion colapsa quase instantaneamente gerando grandes ondas de spin. Conforme afastamos a impureza do centro da excitação, o núcleo fica estável por um período cada vez maior.

Ao colocarmos a impureza numa distância em  $X$  igual ao espaçamento dos núcleos, ou seja, sobre a órbita dos núcleos, o sóliton passa a ser estável até que um dos núcleos passe sobre a vacância e caia nela. Quando isso acontece, o outro núcleo orbita por um curto período o defeito e logo colapsa também [1]. A figura 3.7 mostra bem esse fenômeno.

Conforme a impureza é colocada mais afastada da órbita do sóliton este demora mais tempo para colapsar. É interessante notar que o skyrmion parece ter seus dois núcleos atraídos pela impureza fazendo assim com que ele não orbite o seu centro,

### 3.Resultados: Skyrmions de dois núcleos

---

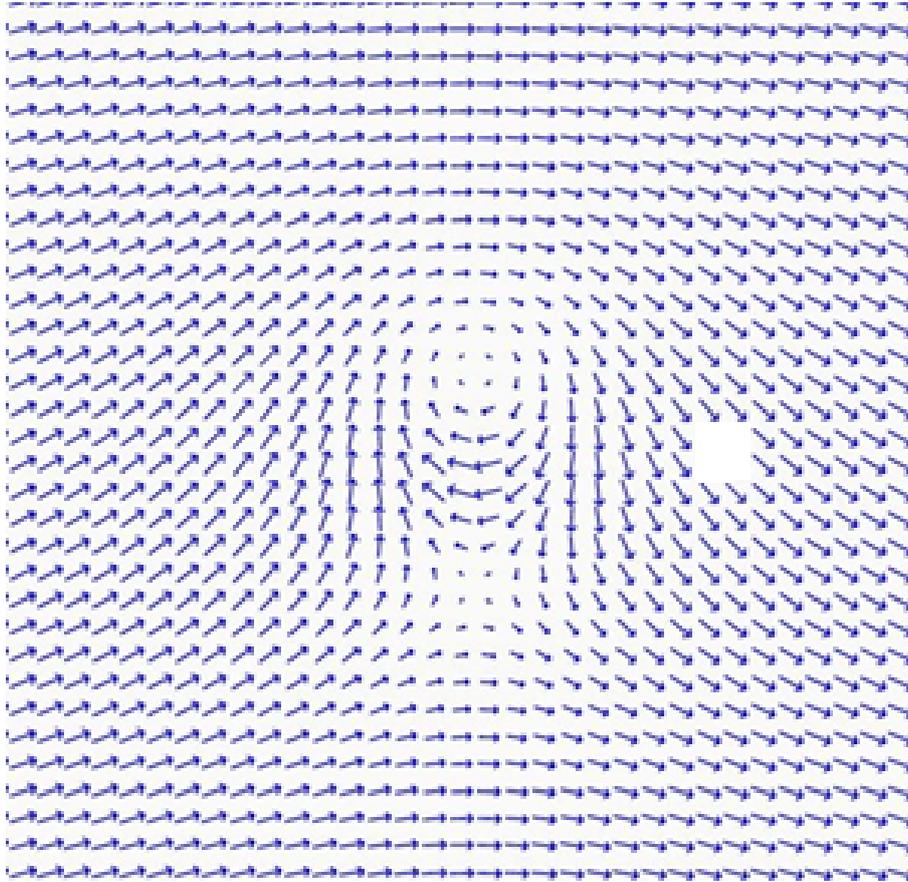


Figura 3.6: Projecção no plano XY dos spins. Note a vacância próxima ao centro do skyrmion.

mas vá em direção à vacância até colapsar. Note que tanto campos senoidais como constantes têm somente o efeito de alterar a frequência de giro dos núcleos, porém o defeito não-magnético atrai ambos núcleos.

O processo que leva à aniquilação da excitação sempre começa com um dos núcleos caindo na impureza, o que ocorre se sua órbita passar muito perto desta. Assim que um deles cai nesse buraco, ele é completamente destruído e sua polarização vai a zero, fazendo a carga topológica tender a  $\frac{1}{2}$ . No entanto, o meio-Skyrmion não dura muito tempo e cai também na vacância. Desse modo o Skyrmion completo decai em ondas de spin.

A partir de uma distância muito longa, como por exemplo, três vezes o tamanho  $R$  da separação dos núcleos, a vacância interage muito fracamente com o Skyrmion e

### 3.Resultados: Skyrmions de dois núcleos

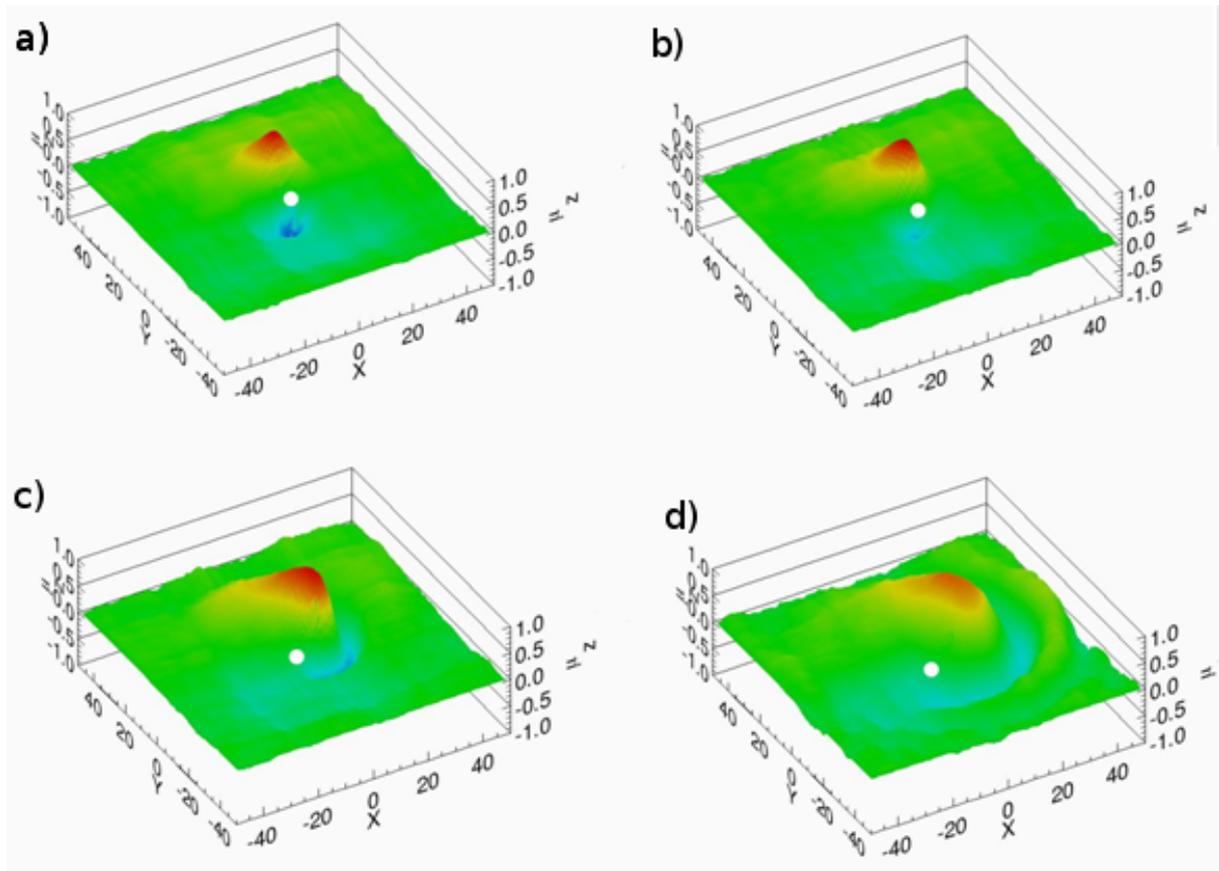


Figura 3.7: Comportamento de um skyrmion ao passar perto de uma impureza. a) O núcleo com polaridade -1 (azul) passa perto da impureza sendo capturado por esta. b) Ele colapsa sobre a impureza. c) O núcleo com polarização +1 começa a colapsar e se alongar. d) A excitação se desfaz em ondas de spin na rede e a polarização total volta a zero.

tem como efeito somente fazê-lo não girar, pois ambos os núcleos estão sendo atraídos, agora com a mesma força (apesar desta ser pequena) para o mesmo lado.

## Resultados: Skyrmions de um núcleo

### 4.1 Conservação de energia e estabilidade

As simulações para esse tipo de excitação foram feitas do mesmo modo que para o skyrmion de dois núcleos, mudando somente a condição inicial da rede de spins, pois mapeamos a esfera usando a condição de contorno

$$r \mapsto \infty \Rightarrow \vec{S}_r \mapsto (0, 0, 1), \quad (4.1)$$

nas bordas da rede, ou seja, os spins tendem a apontar para fora do plano, na direção  $z$ . Assim, obtemos o skyrmion de um núcleo. Como o algoritmo de integração para a equação de movimento foi o mesmo nesse caso (computacionalmente, estamos somente resolvendo a mesma EDO com uma condição inicial diferente), a conservação de energia total se manteve igual. Porém, apesar dos spins no infinito tenderem à mesma direção, eles formam uma configuração de vórtice no plano  $XY$  e, dessa forma, usamos no eixo  $z$  uma condição de contorno periódica para que a componente  $z$  dos spins de uma borda tenda a se alinhar paralelamente a componente  $z$  do spin da borda oposta. Enquanto isso, usamos no plano  $XY$  uma condição de contorno diagonal anti-periódica para as componentes  $x$  e  $y$  dos spins da borda, de modo que eles tendam a se alinharem anti-paralelamente com os spins diagonalmente opostos. Desse modo, usamos uma configuração de condição de contorno híbrida, sendo periódica em  $z$  e anti-periódica no plano magnético. A configuração inicial da rede para o skyrmion de um núcleo pode ser vista na figura 4.1.

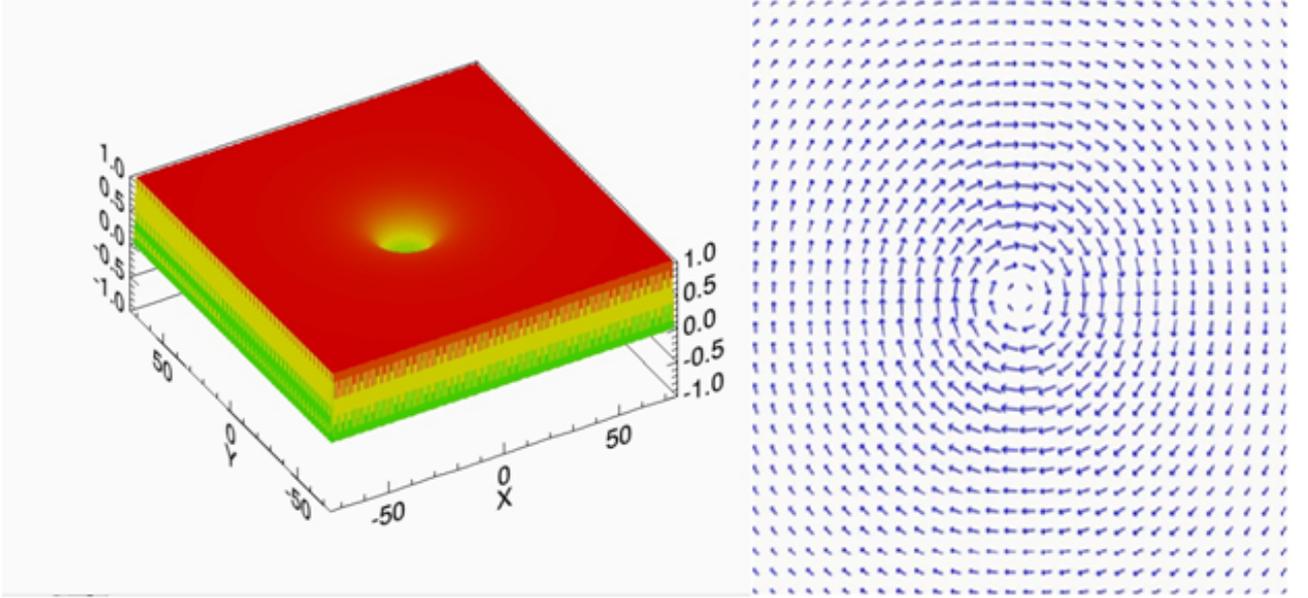


Figura 4.1: Visão tridimensional dos spins em  $z$  e projeção dos spins no plano  $xy$  para um skyrmion de um núcleo.

### 4.2 Rede sem impurezas

Usamos inicialmente redes discretas, finitas e sem nenhuma anisotropia intrínseca. Skyrmions de um núcleo se mostraram estáveis e conservando sua energia, dadas as condições de contorno apropriadas. No entanto a rede deve ter um tamanho mínimo para conter o sóliton, em geral, cerca de dez por cento maior que o raio ( $R$ ) do próprio sóliton. Não parece haver limitações superiores para o tamanho da rede em relação ao sóliton, diferente do que acontece com o caso de dois núcleos. Analisando a energia da excitação topológica, vimos que o skyrmion de um núcleo se comporta como o de dois núcleos em relação ao tamanho  $L$  da rede: quanto menor a rede maior será a energia da excitação. Para vários tamanhos de skyrmions diferentes, descobrimos que a energia em uma rede discreta tende, conforme  $L$  tende a infinito, ao valor esperado de  $E_s = 4\pi JS^2$ , como previsto teoricamente para uma rede contínua e infinita. Verificamos também que, para um mesmo valor de  $L$ , quanto maior o raio do skyrmion, maior será sua energia, porém, para a rede tendendo a infinito, essa energia independe do tamanho da excitação. Os resultados obtidos que permitiram essa análise são apresentados na figura 4.2.

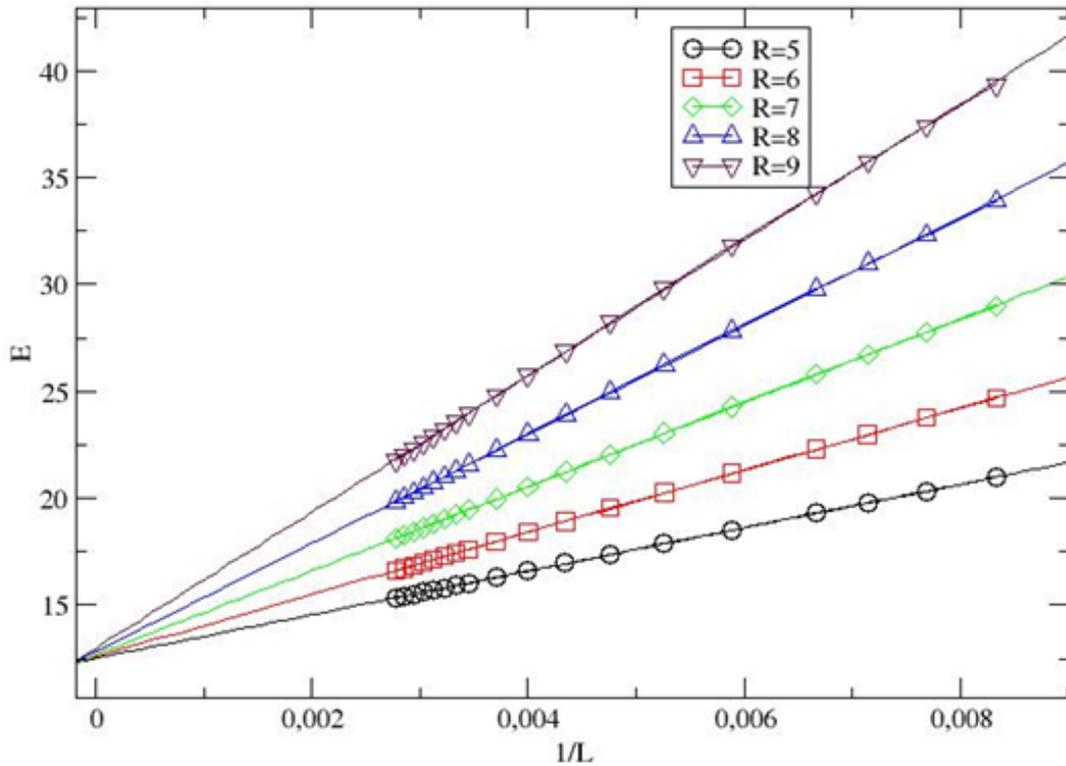


Figura 4.2: Gráfico da energia pelo inverso do tamanho da rede para um skyrmion de um núcleo.

Tais resultados demonstram que o limite termodinâmico é recoberto pela simulação em relação a energia, como previsto no modelo sigma não-linear.

### 4.3 Efeitos de borda

Apesar de Sólitons classicamente não interagirem entre si, já foram propostos modelos de perturbação que permitiriam tal interação [61]. Além disso a discretização da rede tem efeitos profundos em qualquer simetria contínua que exista no sistema contínuo e sua relação com quebras de simetrias contínuas [1] (o que, possivelmente, geraria bósons de Goldstone), de modo que novas interações podem surgir. A dependência da energia em relação a proximidade do skyrmion com a borda da rede também

#### 4.Resultados: Skyrmions de um núcleo

foi analisada. Colocamos inicialmente um skyrmion no centro da rede e analisamos como a energia varia para um certo deslocamento horizontal  $\Delta$ . Os resultados obtidos, mostrados na figura 4.3, indicam que o local de mínima energia para o skyrmion é o centro da rede, como esperado.

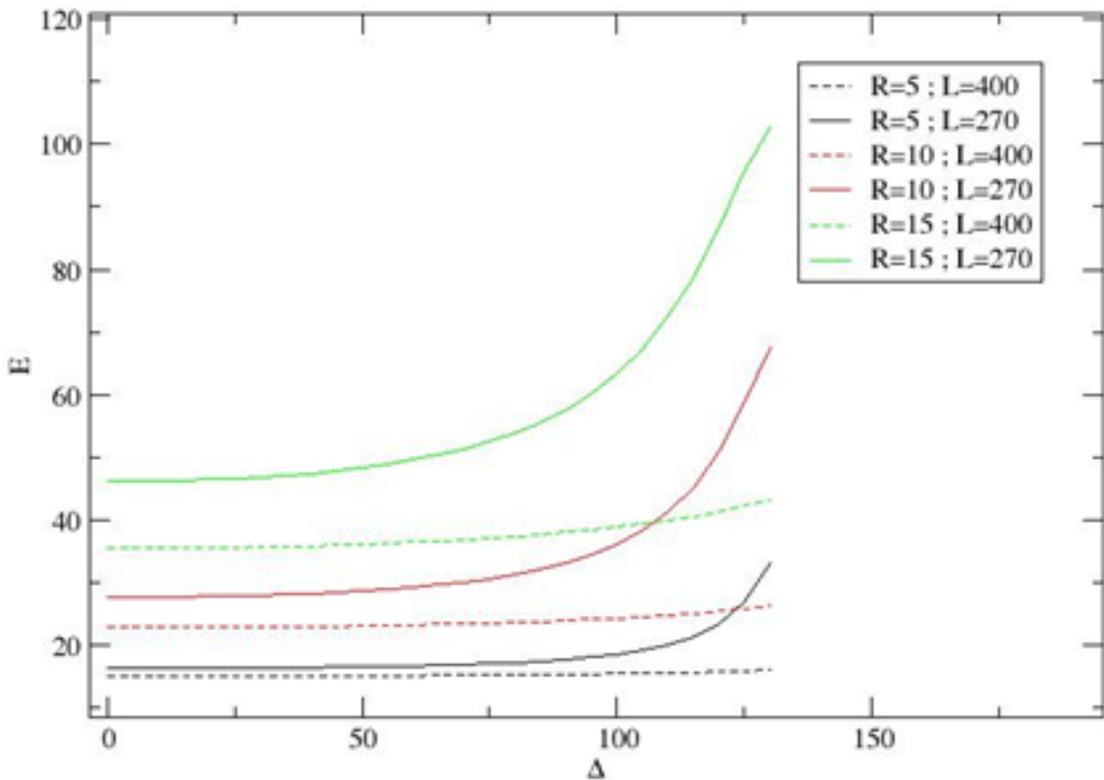


Figura 4.3: Gráfico da energia pelo deslocamento em relação ao centro da rede para um skyrmion de um núcleo.

Apesar das condições de contorno, a borda da rede representa um efeito de discretização que é mais destacado conforme o centro do skyrmion se aproxima dele. Notamos Também que o efeito das bordas na energia do skyrmion se torna mais forte para um skyrmion maior colocado em uma rede de mesmo tamanho  $L$ .

### 4.4 Rede com dois Skyrmions

A partir de tais resultados passamos a analisar o comportamento de dois skyrmions com a mesma carga topológica em uma rede finita e discreta. A solução analítica para tal excitação, além de se estender até o infinito, independentemente do raio do núcleo, também é altamente não linear no sentido de se somar soluções. Assim, encontramos o problema de que não podemos simplesmente sobrepor duas soluções do tipo skyrmion de um núcleo para obtermos dois skyrmions afastados entre si. Para uma rede com apenas duas excitações, dividimos esta em duas partes. Assim, colocamos sobre cada metade da rede a solução analítica de um skyrmion. Note que o meio da rede possuirá uma descontinuidade em linha vertical cortando a rede. Porém, as duas soluções têm a mesma condição de contorno no infinito, ou seja, os spins de ambos os skyrmions tendem a  $z$  conforme se afastam do centro da solução. Desta forma, colocamos um skyrmion em  $L/4$  e o outro em  $3L/4$  ao longo do eixo  $x$ , cada um exatamente no centro de sua metade da rede. Assim, para tamanhos de  $L$  muito grandes, tanto nas bordas da rede quanto na descontinuidade do centro da rede, os spins tenderão a  $z$ . Os tamanhos de rede usados foram tais que a descontinuidade nunca fosse maior que 1% do valor do spin. A figura 4.4 mostra o perfil da rede com as duas soluções, o pequeno degrau perto do centro surge devido a descontinuidade entre as duas soluções.

Notamos que, conforme a rede tende a infinito, a energia tende a  $E_s = 2(4\pi JS^2)$ , independentemente do tamanhos dos Skyrmions. Porém, para valores finitos de  $L$ , a energia (além de superior ao valor analítico de  $E_s = 2(4\pi JS^2)$ ) é superior a duas vezes a energia de uma rede finita e discreta com um skyrmion de mesmo raio  $R$  como visto na figura 4.5. O grupo de linhas  $S=1$  representa as energias de um skyrmion discreto e finito (multiplicadas por dois para que se possa comparar somente a energia por excitação), enquanto  $S=2$  representa as energias para dois skyrmions na rede de mesmo tamanho  $L$ . As linhas contínuas representam os pontos experimentais, enquanto as pontilhadas são extrapolações dos dados. Note que a diferença entre os conjuntos de retas  $S=1$  e  $S=2$  se deve a energias extras que não tem relação com  $R$  ou  $L$  visto que essas diferenças permanecem mesmo para o mesmo valor desses parâmetros. Frizamos

#### 4. Resultados: Skyrmions de um núcleo

---

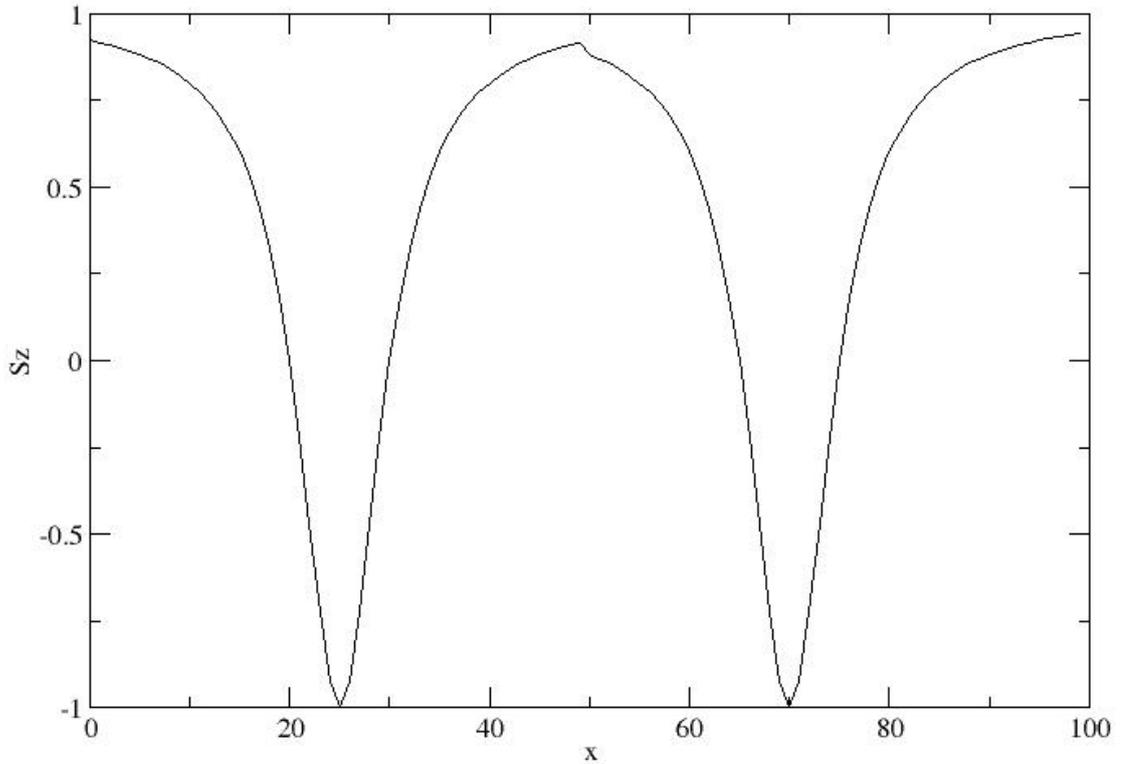


Figura 4.4: Perfil da rede contendo dois skyrmions afastados. O centro da rede possui uma pequena descontinuidade na componente z dos spins.

que a diferença entre  $S=1$  e  $S=2$  não advém da energia das bordas pois ambos possuem tal energia. Isso nos deu indícios de que em redes finitas possa de fato existir algum tipo de interação entre skyrmions que tenda a zero para redes infinitas. Tais interações entre skyrmions já foram propostas via teorias de perturbação [61].

Procurando analisar tal energia de interação, passamos nossa análise para a dependência da energia com a posição dos skyrmions na rede com dois destes.

Uma vez arranjados os skyrmions sobre a rede, variamos a distância  $\Delta$  entre eles, aproximando ou afastando horizontalmente um deles enquanto o outro se mantinha fixo. Isso nos possibilitou visualizar melhor as possíveis energias de interação entre eles. Os resultados obtidos estão na figura 4.6.

#### 4.Resultados: Skyrmions de um núcleo

---

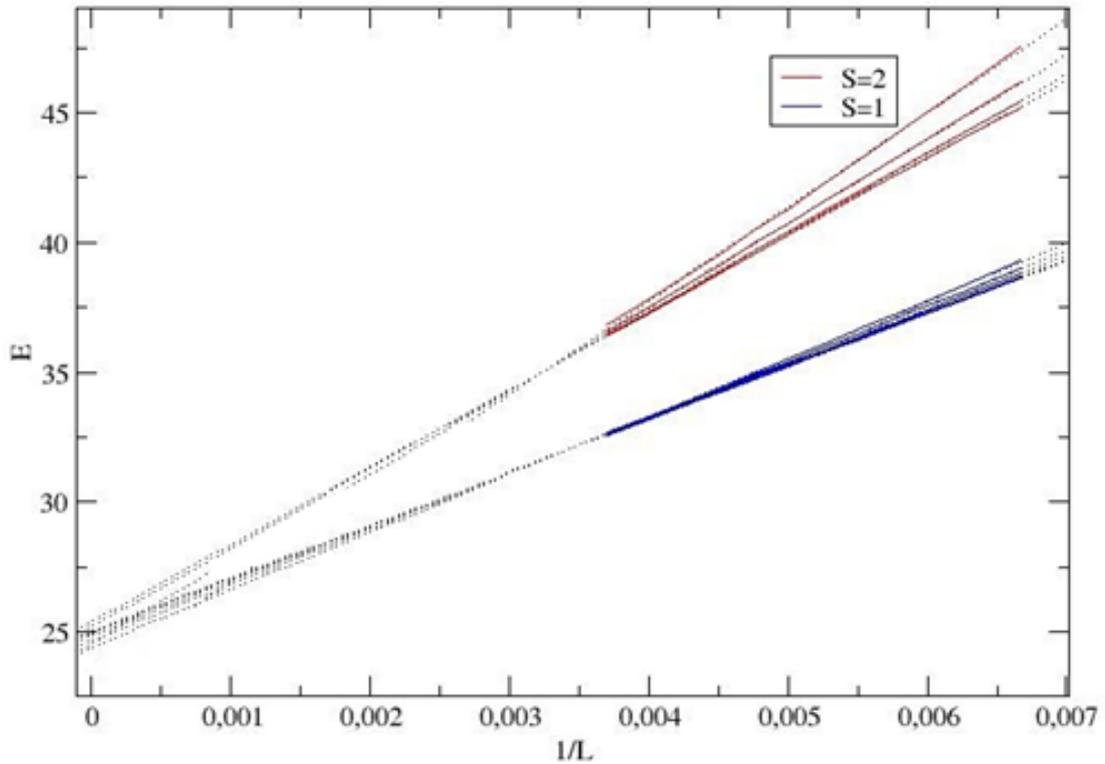


Figura 4.5: Energia pelo inverso de L para um e dois skyrmions de um núcleo. Sendo  $S=1$  os dados para um Skyrmion na rede e  $S=2$  para a rede contendo dois destes. A energia da rede com um skyrmion foi multiplicada por 2 para que possamos comparar as energias.

Vimos que a energia total por skyrmion se comportava de maneira semelhante a energia da rede com um skyrmion se a distância entre estes fosse suficientemente grande, i.e. para ambos os casos ao se aumentar  $\Delta$  a energia aumenta (energia repulsiva nas bordas) além de que esse aumento é pronunciado principalmente para redes pequenas. Porém, para  $\Delta$  pequeno (ou seja aproximando muito os skyrmions uns dos outros) notamos que a energia cresce muito para a rede com dois skyrmions enquanto não é alterada na rede com um skyrmion. Em especial esse pico central na energia ocorre tanto em redes grandes quanto pequenas e pode formar um potencial confinante.

Esse aumento na energia parece indicar que exista uma certa tendência de re-

#### 4.Resultados: Skyrmions de um núcleo

---

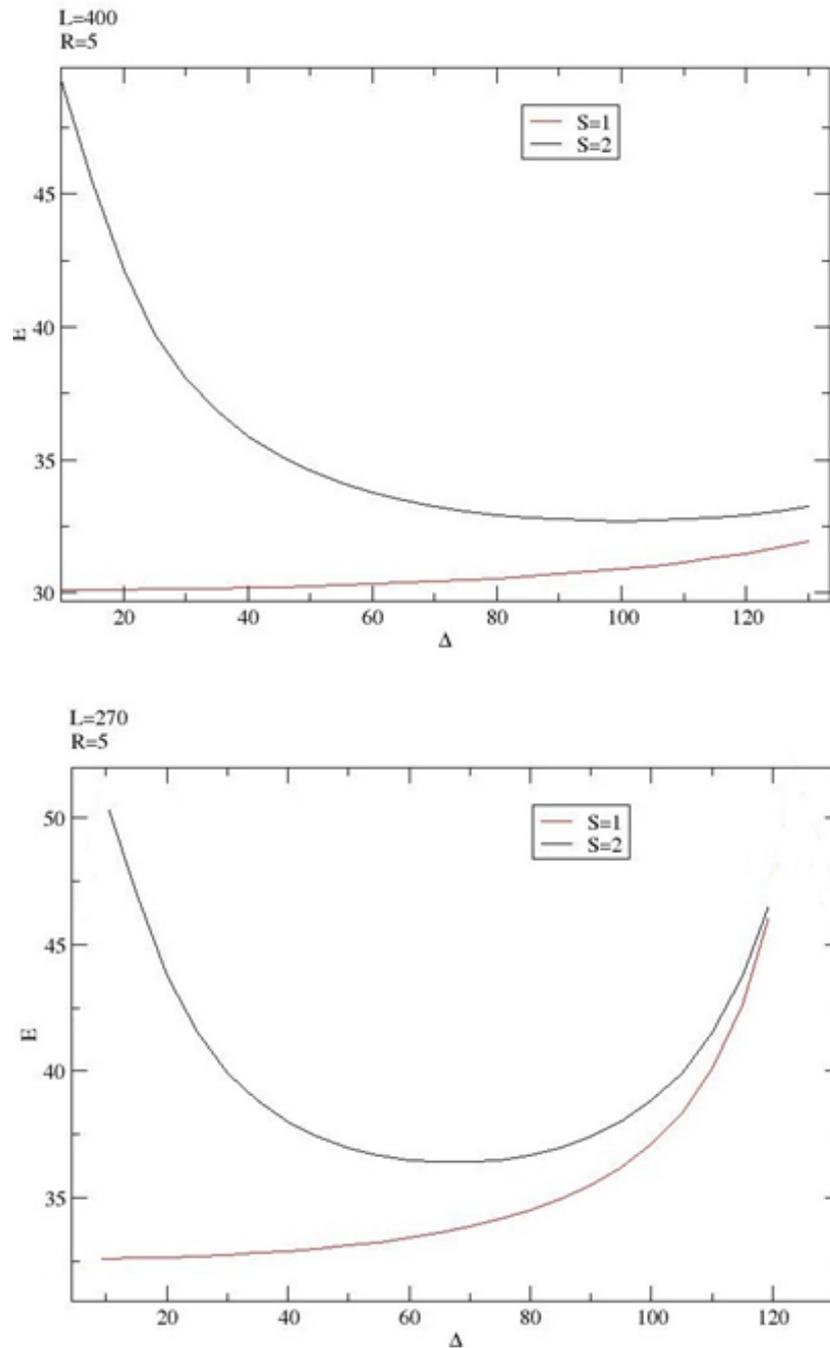


Figura 4.6: Gráficos da energia pela distância do skyrmion ao centro da rede para um e dois skyrmions. A energia de interação com a borda da rede existe em todos os casos, porém de torna menor em redes grandes. Porém o pico central, que indica uma interação no caso da rede com dois skyrmions, permanece independentemente do tamanho da rede.

pulsão entre os skyrmions para distâncias muito pequenas de separação. De fato, se aumentarmos o tamanho da rede, mantendo o tamanho do skyrmion fixo, notamos que

## 4. Resultados: Skyrmions de um núcleo

---

o aumento na energia devido a proximidade com as bordas desaparece; porém o pico de energia para  $\Delta$  pequeno permanece independentemente. Apesar de  $R$  influenciar na energia, o efeito de proximidade dos skyrmions ocorre para qualquer valor de  $L$  ou  $R$ . Vemos isso claramente na figura 4.6. Tais efeitos indicam uma possível interação de repulsão entre skyrmions.

### 4.5 Cristais de Skyrmions

Recentemente descobriram-se formações de skyrmions de um núcleo em filmes finos que se mantêm estáveis formando entre si redes geométricas, os chamados “cristais de skyrmions” [6–10]. Tais configurações foram diretamente observadas em materiais que apresentam em geral quebra de simetria de inversão na forma de um termo de acoplamento spin-órbita em sua Hamiltoneana, o chamado termo de Dzyaloshynsky-Morya ( $\vec{S} \cdot (\nabla \times \vec{S})$ ) [57]. Acreditamos que tal termo seja muito importante para a formação dos skyrmions a partir de um estado de menor energia, favorecendo interações quirais que eventualmente formarão a estrutura em vórtice de cada skyrmion da rede. Porém, tal interação não explicaria o motivo da formação de redes com posições fixas para cada skyrmion. Devido aos indícios de interações encontrados, podemos supor que tais formas de cristais sofrem um efeito de auto-organização graças às interações mútuas inter-skyrmions. Desse modo, proseguimos nossas análises para tais configurações, mas sem considerar a interação de Dzyaloshynsky-Morya.

Dispusemos quatro núcleos em uma rede, com a mesma separação entre si, formando um losango com um ângulo menor  $\theta$ , como pode ser visto na figura 4.7.

Para tal configuração, vemos que a evolução temporal dos Skyrmions os leva a colapsarem caso as redes tenham tamanho inferior a cerca de  $5R$ . Este seria o tamanho mínimo da rede para que esta comporte pelo menos 4 núcleos sem que nenhum se sobreponha a outro ou à borda. Porém, para redes maiores, vimos que eles se mantêm estáveis e estáticos, diferentemente dos Skyrmions de dois núcleos, formando assim uma “rede de skyrmions” estável.

A energia da rede excede o valor de  $E_s = 4\pi JS^2$  por excitação. Esse excesso depende do ângulo do losango formado pelos núcleos, sendo tal dependência relacionada

#### 4.Resultados: Skyrmions de um núcleo

---

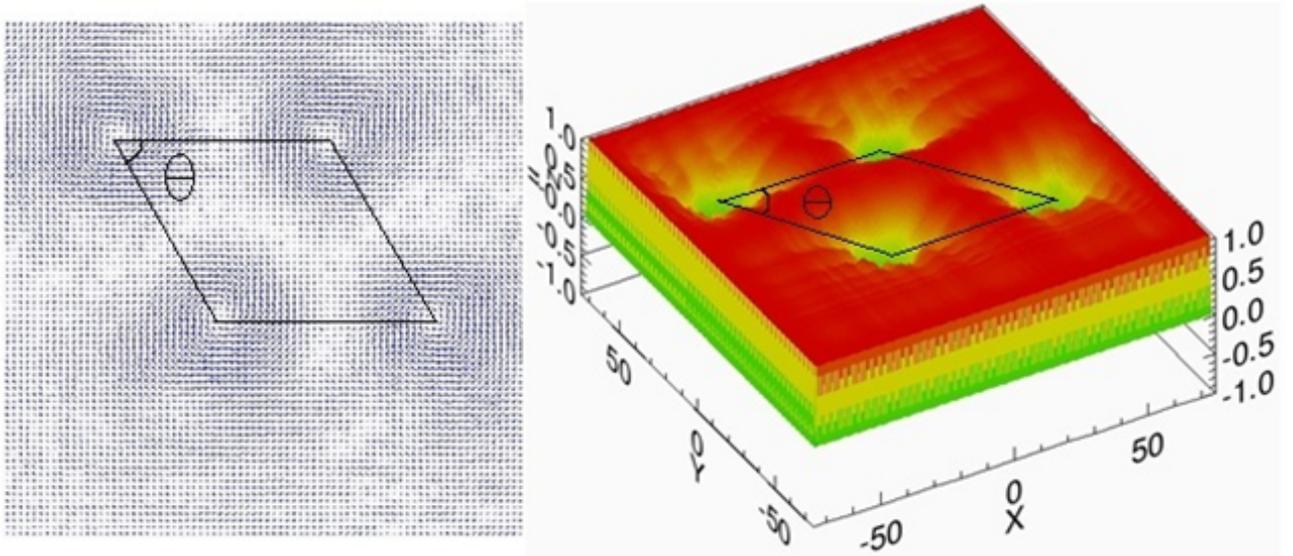


Figura 4.7: Visão 2D e 3D da rede em losango de skyrmions de um núcleo.

com a possível interação entre skyrmions e entre as bordas.

Variando-se o ângulo  $\theta$  para vários tamanhos de  $L$ , obtivemos que a energia mínima para tal configuração corresponde a  $\theta = 90^\circ$ , como pode ser visto na figura 4.8.

Devido aos efeitos de borda e ao excesso de energia, a configuração de menor energia na rede discreta e finita é um quadrado, já que a rede é disposta com bordas quadradas.

Também simulamos as chamadas redes do tipo *honeycomb* de skyrmions, na qual 6 excitações se distribuem em um hexágono de lados iguais e uma sétima se situa no centro, como mostrado na figura 4.9. Devido a possuímos, analiticamente, somente a solução de um skyrmion que se estende até o infinito, criamos o cristal confinando cada solução de um skyrmion em um círculo de raio  $D$  e arranjamos tais círculos no padrão de *honeycomb*. O restante da rede foi preenchido com spins apontando na direção de  $z$ . Note que o raio  $D$  foi escolhido de forma que a solução de skyrmion tenha o spin quase totalmente apontado na direção de  $z$  na borda do círculo, ou seja,  $2R < D$ . A descontinuidade do campo de spins na borda de cada círculo não ultrapassou 1% do valor do spin.

Em uma rede do tipo *honeycomb* com infinitos skyrmions, cada excitação possui 6 vizinhos. Note que nossa rede possui 7 skyrmions, sendo que somente o central possui

## 4. Resultados: Skyrmions de um núcleo

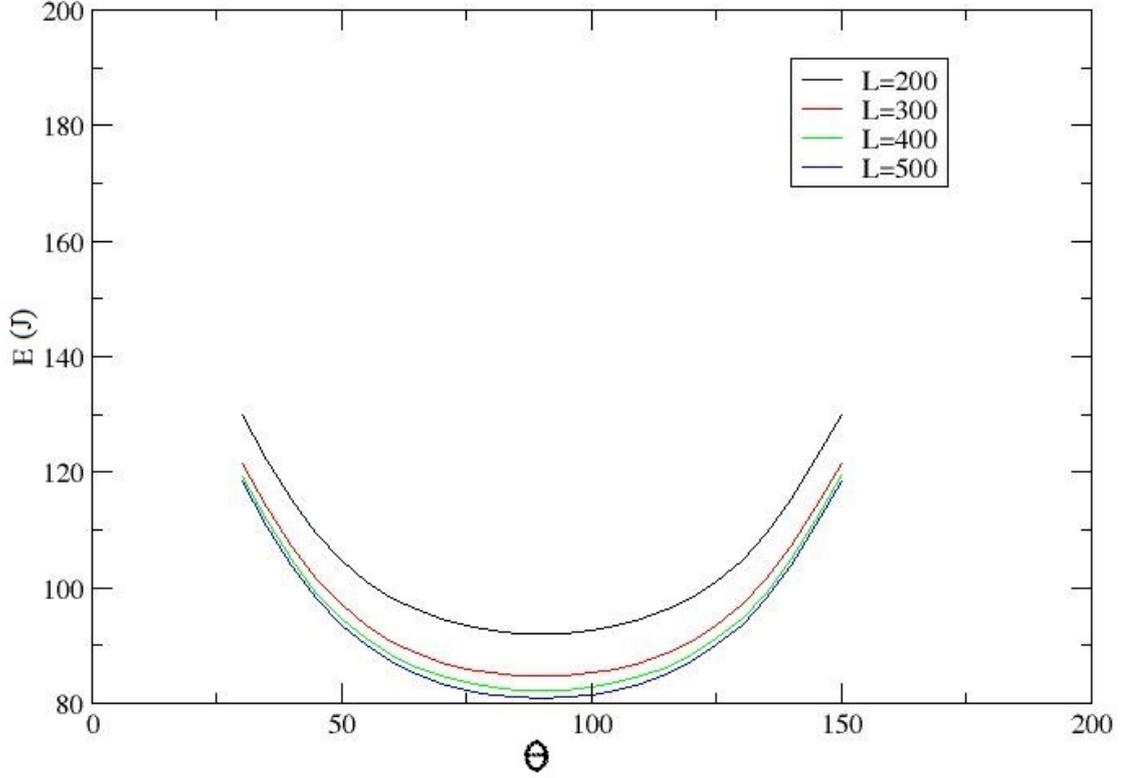


Figura 4.8: Energia total das excitações versus  $\theta$ . O ângulo de menor energia é  $\theta = 90^\circ$ .

de fato 6 vizinhos.

Tal tipo de rede foi encontrado em [4, 6, 7], sendo que [3] mostrou que, dependendo de condições do material e campo aplicado, pode-se obter tanto a rede quadrada quanto a rede hexagonal de skyrmions. Nossa análise procurou evidenciar a interação inter-Skyrmions. Usamos o arranjo do tipo *honeycomb* com 7 skyrmions para diversos tamanhos de rede e de skyrmions. Notamos que a energia por skyrmion " $e$ " para diferentes tamanhos, tendia ao valor analítico de  $4\pi JS^2$ , porém, simulando a mesma rede e removendo alguns dos skyrmions (e deixando todos os outros parâmetros iguais, incluindo a posição dos skyrmions restantes), vimos que existe uma energia extra em todos os casos simulados. A figura 4.10 mostra esse resultado para redes com 7, 6, 4 e 1 skyrmion. Linhas de diferentes cores agrupadas representam o mesmo tamanho de

#### 4. Resultados: Skyrmions de um núcleo

---

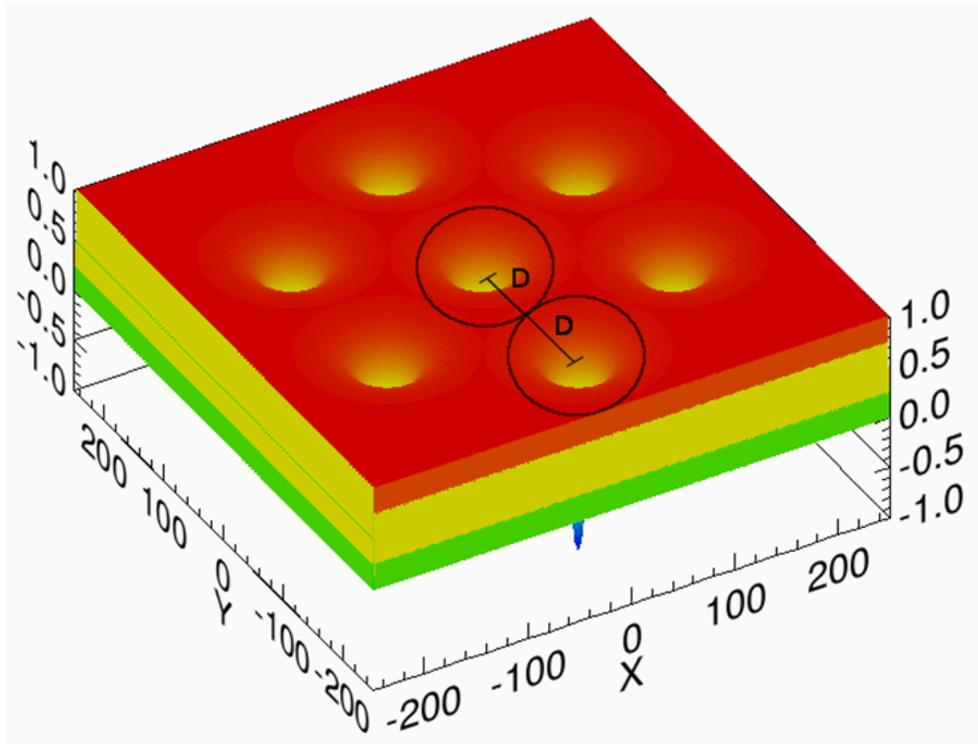


Figura 4.9: Arranjo de skyrmions formando entre si uma rede do tipo *honeycomb*.

skyrmion para as redes. Redes com mais skyrmions possuem uma energia por excitação maior, o que é uma indicação da interação de tais partículas.

Analisamos agora redes iguais e com a mesma quantidade de skyrmions, porém com uma quantidade de vizinhos diferentes entre si. Simulamos dois tipos de rede, ambas com somente 6 excitações e com o padrão *honeycomb*, sendo que no primeiro tipo (rede *A*) removemos a excitação central da rede, que possui 6 skyrmions vizinhos mais próximos para interagir. No segundo tipo (rede *B*), removemos a uma excitação da borda, que possui somente 3 skyrmions vizinhos para interagir. As configurações usadas e suas respectivas energias totais podem ser vistas na figura 4.11. Note que a energia de interação entre skyrmions é sempre positiva de acordo com nossas simulações. Desse modo, existe uma pequena diferença de energia entre a rede *A* e a rede *B*, que surge devido a segunda ter mais interações entre skyrmions (logo, uma energia ligeiramente maior). Pode-se ver também que a diferença de energia se mantém independentemente do tamanho da rede ou dos skyrmions.

Mesmo contendo a mesma quantidade de excitações solitônicas, a energia total

#### 4.Resultados: Skyrmions de um núcleo

---

depende da configuração da rede. Como visto, as energias parecem ser repulsivas entre skyrmions e entre as bordas. Tais interações inter-skyrmion e interações de borda poderiam se mostrar responsáveis pelas redes organizadas de sólitons já observadas experimentalmente. Frisamos que nos modelos analíticos, sólitons não interagem, de modo que eles formariam um "gás de sólitons" semelhante a um gás de fótons ao invés de estruturas com posições determinadas como visto em [3, 4, 6, 7].

#### 4.Resultados: Skyrmions de um núcleo

---

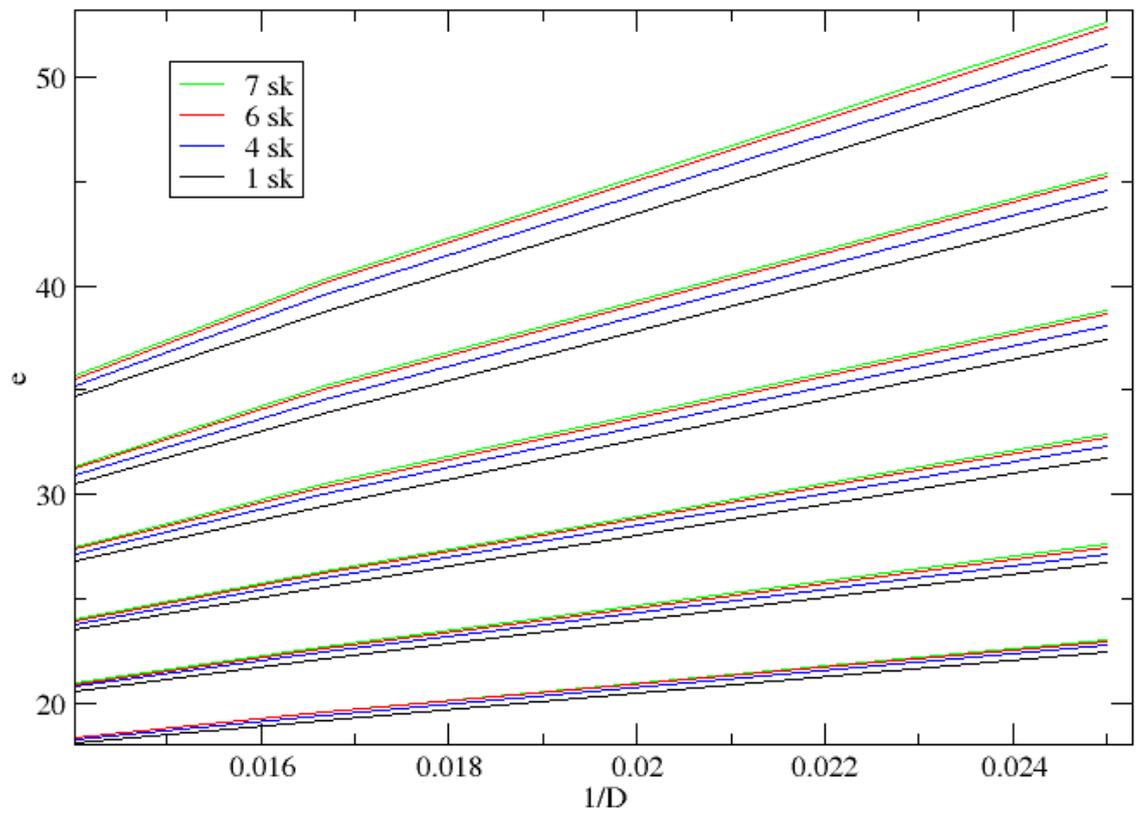


Figura 4.10: Energia por excitação de configurações do tipo *honeycomb* de skyrmions contendo 7,6,4 e 1 skyrmion. Mesmo com valores de parâmetros iguais para tamanho de skyrmion e tamanho de rede, estas apresentam excesso de energia ao se adicionar mais excitações.

#### 4. Resultados: Skyrmions de um núcleo

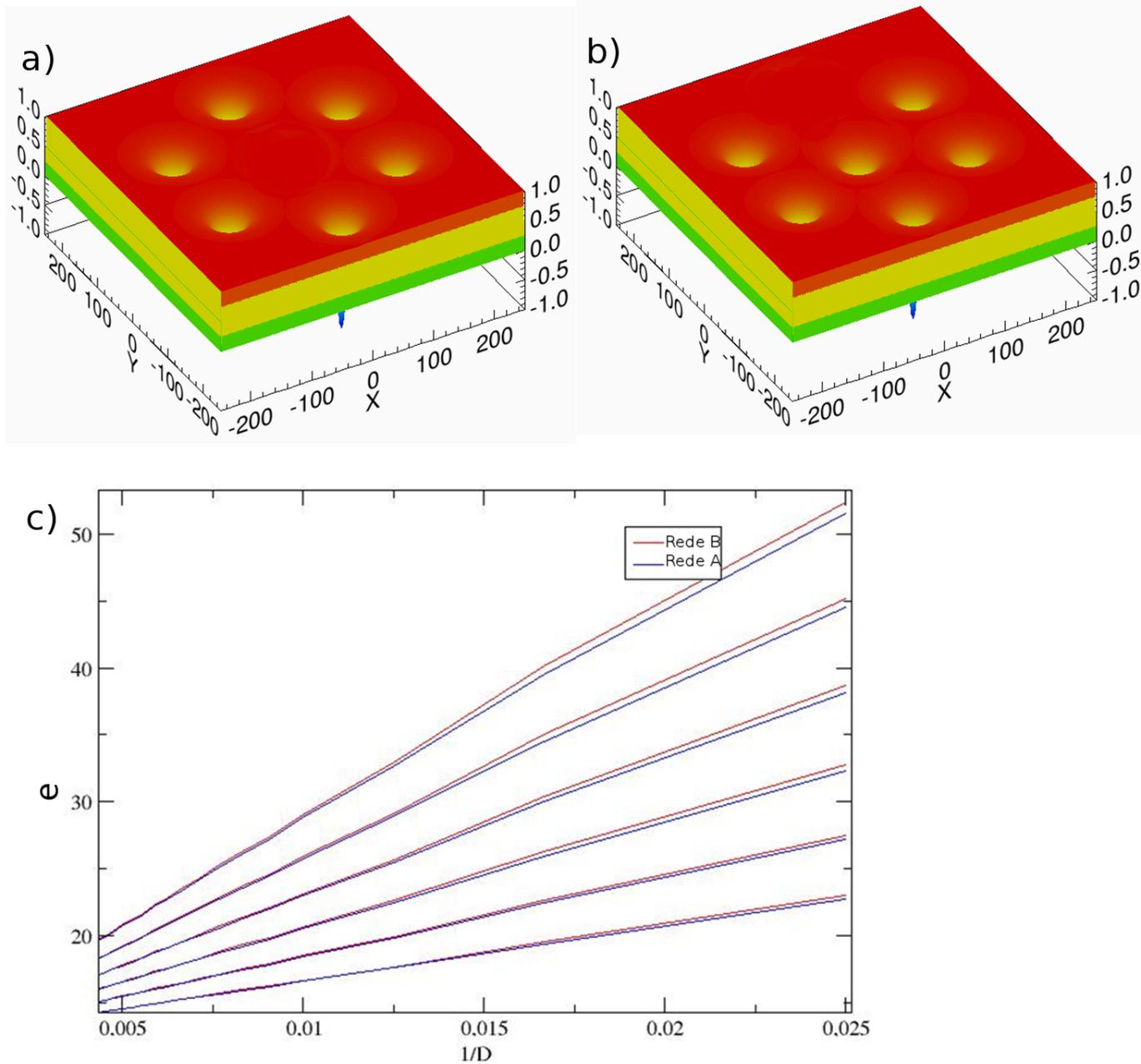


Figura 4.11: Redes com a mesma quantidade de excitações, porém, com energia que se comporta ligeiramente diferente dependendo da configuração. a) Rede A com o skyrmion central, que possui 6 vizinhos, faltando. b) Rede B com um skyrmion periférico, que possui somente 3 vizinhos, faltando. c) Gráfico comparando as energias de ambas as redes; a rede B, que possui menos skyrmions vizinhos, tem a energia maior.

## Conclusões e perspectivas

Recentemente, a atenção dada a dinâmica de skyrmions solitários e cristais de skyrmions tem alcançado destaque tanto em áreas teóricas quanto experimentais. Tais quasi-partículas são interessantes pela sua significativa participação em fenômenos como o efeito Hall Quântico [3, 24, 53], transições de fase de materiais quirais a baixas temperaturas [3, 4, 6, 7, 15] (apesar de determinadas fases de cristais de skyrmions também já serem possíveis perto da temperatura ambiente) e seu possível uso nos dispositivos de armazenamento de dados com alta densidade magnética [2, 12, 14, 52]. Tais configurações, por terem uma estabilidade topológica, conseguem se manter intactas mesmo em escala de microns [9, 12], fazendo delas fortes candidatas para armazenamento de informações no lugar de domínios magnéticos.

Nossa pesquisa analisou, através de métodos numéricos de dinâmica de spins [1], a possível estabilidade de skyrmions em redes discretas e limitadas, suas interações com defeitos magnéticos- que ocorrem com frequência em filmes finos- o efeito de campos magnéticos aplicados no plano da rede e possíveis interações entre skyrmions -que podem levar em última análise a formação de cristais de skyrmions (SkX).

Nossas análises mostraram vários efeitos não previstos por teorias analíticas de modelos contínuos [13, 52], mas que parecem ocorrer experimentalmente em materiais discretos (em especial a interação entre skyrmions). Análises relacionadas à discretização do modelo e de impurezas contidas na rede são importantes visto que tais características, que aparecem com frequência em materiais reais, podem alterar significativamente o comportamento de quasi-partículas contidas no sistema, bem como suas

## 5. Conclusões e perspectivas

---

propriedades termodinâmicas [14,22,23,31,60]. Apesar de em um campo infinito e contínuo o skyrmion ser uma solução estável e estática, trabalhos anteriores previam que a discretização do modelo poderia tornar o skyrmion instável [58, 59]. Nosso modelo demonstrou que apesar de condições de contorno fixas ou abertas tornarem de fato a excitação instável, condições de contorno periódicas tornam o skyrmion estável numa rede finita e discreta. Porém, ele apresenta uma dinâmica de spins que o faz girar em torno de seu centro de massa, sendo que tal efeito é mais evidente no skyrmion de dois núcleos (apesar de também existir no de um núcleo). Dessa forma, a energia da excitação cresce consideravelmente comparada ao resultado analítico; esse aumento de energia dependerá do tamanho da rede, sendo que, quanto menor a rede, mais rápido os núcleos irão girar, fazendo com que a energia total da excitação fique maior. Girando mais rápido os núcleos também irão gerar uma grande quantidade de ondas de spin, que, ao serem refletidas nas bordas da rede, retornam e deformam o skyrmion, podendo até mesmo aniquilar a excitação. Campos magnéticos no plano da rede também foram analisados, obtendo como resultado a aceleração do movimento de giro do skyrmion sem deslocar centro do mesmo.

Por outro lado, para uma rede grande, os skyrmions têm uma frequência de giro muito baixa e as ondas de spin praticamente não aparecem. Conforme a rede cresce, a excitação tende a ficar estática e sua energia tende ao valor analítico para uma rede infinita. Esse fato é muito importante pois conecta o modelo infinito ao modelo discreto mostrando que um tende ao outro, porém apresentando novas características da quasi-partícula.

Sobre os skyrmions de um núcleo, vimos que estes permanecem estáveis também em redes losangulares e hexagonais suficientemente grandes. Tais redes apresentam uma energia de interação entre skyrmions não prevista para soluções do tipo sóliton. A interação parece ser sempre repulsiva, independentemente da carga de skyrmion, e é radialmente simétrica, o que explicaria as redes de skyrmion experimentais no formato *honeycomb*. A energia total da rede parece convergir para um mesmo valor em redes muito grandes independentemente do raio das excitações, como ocorre no sistema de Skyrmion de dois núcleos. Porém, tal energia se mostra superior ao valor analítico e

## 5. Conclusões e perspectivas

---

depende da quantidade de skyrmions no sistema. Assim, acreditamos que para redes pequenas e discretas exista uma energia de interação que depende de tal discretização, mas que essa energia de interação se mantém mesmo em redes infinitas.

Temos como perspectivas futuras adicionar em nossas simulações o termo de Dzyaloshinsky-Moriya que representa uma tendência natural para os spins formarem estruturas helicoidais bem como flutuações térmicas. Apesar de nossas simulações indicarem que a solução de skyrmion seja estável uma vez que ela esteja construída, o termo DM parece ser essencial para que tais configurações surjam a partir do vácuo ferromagnético. Tal termo poderia também gerar novos efeitos dinâmicos nas redes de skyrmions. Efeitos de temperatura também seriam importantes para verificar como as redes de skyrmions podem afetar a termodinâmica de sistemas.

# Bibliografia

- [1] M. A. Amaral, R. L. Silva, A. R. Pereira, W. A. Moura-Melo; *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 321, (19), 2009;
- [2] U. K. Rößler, A. N. Bogdanov, C. Pfleiderer; *Nature*, 442, (7104); 2006;
- [3] S. D. Yi, S. Onoda, N. Nagaosa, J. H. Han; *Phys. Rev. B*; 80(5); 2009;
- [4] J. H. Han, J. Zang, Z. Yang, J. Park, N. Nagaosa; *Phys Rev. B*; 82(9); 2010;
- [5] C. Pfleiderer, A. Rosch; *Nature*, 465, (880881), 2010;
- [6] S. Mhlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, P. Bñil; *Science*, 323, (5916); 2009;
- [7] X. Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. H. Park, J. H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa, Y. Tokura; *Nature*, 465, (901904); 2010;
- [8] S. Seki, J. H. Kim, D. S. Inosov, R. Georgii, B. Keimer, S. Ishiwata and Y. Tokura; *Phys. Rev. B*, 85, (220406(R)), (2012);
- [9] Stefan Heinzl, Kirsten von Bergmann, Matthias Menzel, Jens Brede, André Kubetzka, Roland Wiesendanger, Gustav Bihlmayer and Stefan Blügel; *Nature Physics*; 7, (713–718); 2011;
- [10] Han Zhu, G. Sambandamurthy, Yong P. Chen, P. Jiang, L. W. Engel, D. C. Tsui, L. N. Pfeiffer, and K. W. West; *Physical Review Letters*; 104, (226801); 2010;

## 9. Bibliografia

---

- [11] W. Münzer, A. Neubauer, T. Adams, S. Mühlbauer, C. Franz, F. Jonietz, R. Georgii, P. Böni, B. Pedersen, M. Schmidt, A. Rosch, and C. Pfleiderer; Physical Review B; 81, (041203); 2010;
- [12] N. S. Kiselev, A. N. Bogdanov, R. Chäfer, U. K. RöBler; J. Phys. D: Appl. Phys.; 44. (392001); 2011;
- [13] F. D. M. Haldane;Physical Review Letters; 61, (8); 1988;
- [14] Ye-Hua Liu and You-Quan Li; J. Phys.: Condens. Matter; 25. (076005); 2013;
- [15] Y. Onose, Y. Okamura, S. Seki, S. Ishiwata, and Y. Tokura; PRL, 109, (037603); 2012;
- [16] A R Pereira, E Ercolessi and A S T Pires; J. Phys.: Condens. Matter; 19,(156203); 2007;
- [17] S. D. Bader; Review of Modern Physics; 78, (1);2006;
- [18] A. K. Geim, K. S. Novoselov; Nature Materials; 6, (183), 2007;
- [19] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim ;Review of Modern Physics, 81, (190), 2009;
- [20] A. K. Geimm; Science, 324(5934); 2009;
- [21] H. A. Kramers, G. H. Wannier; Physical Review; 60, (252); 1941;
- [22] E. Brizin and J. Zinn-Justin; Physical Review B; 14, (7);1976;
- [23] J. Goldstone, A Salam and S. Weimberg;Physical Review; 127, (3); 1962;
- [24] A. Neubauer, C. Pfleiderer, B. Binz, A. Rosch, R. Ritz, P. G. Niklowitz and P. Boni; Physical Review Letters; 102, (186602); 2009;
- [25] A. R. Pereira,A. S. T. Pires ;Teoria quântica de campos em sistemas magnéticos de baixas dimensões;
- [26] P. W. Anderson ;Science, New Series, 177, (4047),Aug. 4, 1972;

## 9. Bibliografia

---

- [27] Mile Gu, Christian Weedbrook, Alvaro Perales and Michael A. Nielsen ;“More really is diferent”; <http://arxiv.org/pdf/0809.0151v1.pdf>; 2008;
- [28] G. H. Derrick; J. Math. Phys.; 5 (1252); 1964;
- [29] R. Rajaramam; Solitons and Instantons; (North-Holland, Amsterdam) 1984;
- [30] J. L. Gervais, B. Sakita; Physical Review D;11 (10); 1975;
- [31] A. Tonomura, H. Kasai, O. Kamimura, T. Matsuda, K. Harada, Y. Nakayama, J. Shimoyama, K. Kishio, T. Hanaguri, K. Kitazawa, M. Sasasek & S. Okayasuk; Letters to Nature; 412 (622); 2001;
- [32] G. M. Wysin; Physical Review B; 68, (184411); 2003;
- [33] Weinberg, S. Dreams of a Final Theory (Pantheon Books); 1993;
- [34] Laughlin, R.B. and Pines; Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.; 97 (28) 2000;
- [35] Alwyn Scott; Encyclopedia of Nonlinear Science; Taylor & Francis Group; 2004;
- [36] Clifford S. Gardner, John M. Greene, Martin D. Kruskal, and Robert M. Miura; Phys. Rev. Letters; 19 (1095); 1967;
- [37] Sascha Vongehr; “sólitons” [http://physics1.usc.edu/vongehr/sólitons\\_html/sólitons.pdf](http://physics1.usc.edu/vongehr/sólitons_html/sólitons.pdf); 1997;
- [38] G. H. Derrick;J. Math. Phys.;5 (1252); 1964;
- [39] S. E. Barrett, G. Dabbagh, L. N. Pfeiffer, K. W. Westand R. Tycko; Physical Review Letters; 74 (25); 1995;
- [40] R. Durrer, M. Kunzb , A. Melchiorri; Physics Reports; 364 (1); 2002;
- [41] M. Kutschera,C. J. Pethick, D. G. Ravenhall; Physical Review Letters; 53, (11); 1984;
- [42] Usama Al Khawaja & Henk Stoof;Letters to Nature; 411, (918); 2001;

## 9. Bibliografia

---

- [43] C. Pappas, E. Lelievre-Berna, P. Bentley, P. Falus, P. Fouquet, and B. Farago; “Magnetic Fluctuations and Correlations in MnSi Evidence for a Skyrmion Spin Liquid Phas”; <http://arxiv.org/abs/1103.0574v1>; 2011;
- [44] Alwyn C. Scot; Physical Review A; 31, (5); 1985;
- [45] Anne Porter, Noel F. Smyth; J. Fluid Mech; 454, (1) ;2002;
- [46] N. H. Christ and T. D. Lee;Physical Review D; 12 (6);1975;
- [47] J. Goldstone, R. Jackiw;Physical Review D; 11 (6);1975;
- [48] T.H.R. Skyrme; Nucl. Phys.; 31(556-569); 1961;
- [49] K. Perring, T. H. R. Skyrme; Nuclear PHysics; 31 (550);1962;
- [50] T. H. R. Skyrme; Proc. R. Soc. Lond. A; 260 (127); 1961;
- [51] T. H. R. Skyrme; Proc. R. Soc. Lond. A; 262 (237); 1961;
- [52] Christian Pfleiderer; Nature Physics; 7,(673);2011;
- [53] S. L. Sondhi, A. Karlhede, S. A. Kivelson, E. H. Rezayi; Physical Review B; 47 (24); 1993;
- [54] L. Brey, H. A. Fertig, R. Cote, and A. H. MacDonald; Physical Review Letters; 75 (13); 1995;
- [55] A. A. Belavin, A. M. Polyakov; JETP Lett; 22(245); 1975;
- [56] Z. Nazairo, D. I. Santiago; ”On Spin 1/2 Excitations and Quantum Criticality in Two Dimensional O(3) Antiferromagnets”; <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0411204v2>; 2008;
- [57] Y. Ishikawa, K. Tajimat, D. Bloch, M. Roth; Solid State Communications; 19 (525); 1976;
- [58] R. H. Hobart; Proc. Phys. Soc; 82 (201); 1963;

## 9. Bibliografia

---

- [59] Liufei Cai, Eugene M. Chudnovsky, D. A. Garanin; "Collapse of Skyrmions in 2d Ferro- and Antiferromagnets" <http://arxiv.org/abs/1204.4848v1>; 2012;
- [60] A. R. Pereira, S. A. Leonel, P. Z. Coura, B. V. Costa; Physical Review B; 71 (014403); 2005;
- [61] A. R. Pereira, A. S. T. Pires, M. E. Gouva; Phys. Rev. B; 15(974); 1995;