

RODRIGO LOPES FERNANDES

**O MODELO DE HEISENBERG BIDIMENSIONAL:
SKYRMIONS DE DOIS MERONS EM
ANTIFERROMAGNETOS E O FERROMAGNETO COM
INTERAÇÃO DIPOLAR**

Dissertação apresentada à Universidade
Federal de Viçosa, como parte das exi-
gências do Programa de Pós-Graduação
em Física, para a obtenção do título de
Magister Scientiae

Orientador: Afrânio Rodrigues Pereira

VIÇOSA - MINAS GERAIS

2020

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

T

F363m
2020
Fernandes, Rodrigo Lopes, 1993-
O modelo de Heisenberg bidimensional : skyrmions de dois
merons em antiferromagnetos e o ferromagneto com interação
dipolar / Rodrigo Lopes Fernandes. – Viçosa, MG, 2020.
90 f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Inclui anexo.

Inclui apêndices.

Orientador: Afrânio Rodrigues Pereira.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 75-83.

1. Magnetismo. 2. Matéria condensada. 3. Spin nuclear.
4. Filmes finos. I. Universidade Federal de Viçosa.
Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física.
II. Título.

CDD 22. ed. 538.4

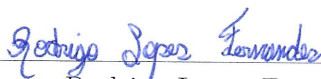
RODRIGO LOPES FERNANDES

**O MODELO DE HEISENBERG BIDIMENSIONAL:
SKYRMIONS DE DOIS MERONS EM
ANTIFERROMAGNETOS E O FERROMAGNETO COM
INTERAÇÃO DIPOLAR**

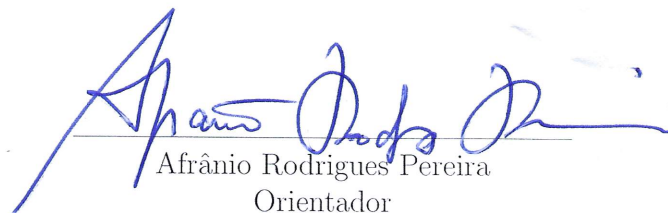
Dissertação apresentada à Universidade
Federal de Viçosa, como parte das exi-
gências do Programa de Pós-Graduação
em Física, para a obtenção do título de
Magister Scientiae

APROVADA: 10 de fevereiro de 2020.

Assentimento:



Rodrigo Lopes Fernandes
Autor



Afrânio Rodrigues Pereira
Orientador

Aos meus pais, José Arimathea Fernandes e
Maria Aparecida Lopes Fernandes.

AGRADECIMENTOS

Ao longo desse mestrado, meu projeto nunca se dava, de fato, por concluído. A sensação é que o trabalho não se esgotava e que sempre era possível extrair mais. Acho que esse é o efeito de estarmos rodeados por pessoas que nos amparam e nos motivam a ir além. Assim, uma vez finalmente concluída, dedico esta dissertação a essas pessoas que, direta e indiretamente, me deram suporte durante toda essa trajetória. Sem elas, esse trabalho não se sustentaria.

De maneira especial, quero agradecer aos meus pais, que com muita dificuldade e luta me proporcionaram a possibilidade de estudar. Os valores que hoje carrego e grande parte daquilo que sou como indivíduo são graças à minha família. Me sinto privilegiado de tê-la.

Agradeço também ao Prof. Afrânio, meu orientador desde a graduação. Seu vasto conhecimento de física, somado à sua enorme capacidade pedagógica, consegue tornar lúdicos os assuntos mais complexos, mostrando-os de inúmeras perspectivas diferentes. Devo a ele boa parte do meu aprendizado ao longo desses anos.

Agradeço ao meu coorientador Ricardo, uma das pessoas mais inteligentes que tive o prazer de conhecer e que me acompanhou durante boa parte da graduação e também do mestrado. Ele foi uma das pessoas cruciais para o término desse trabalho.

Agradeço também a todos os meus amigos que, em meio a boas conversas e muitas saídas aos fins de semana, tornaram muito prazerosa essa caminhada. O suporte dos amigos é essencial. Agradeço também ao Robson Filho pelo carinho e atenção durante todo esse tempo e por gentilmente ter revisado meus textos. Mais luz e ordem foi levada à dissertação.

Finalmente, agradeço a todos os professores e funcionários do DPF que das mais variadas formas contribuíram para minha formação através de um ensino de excelência. Um agradecimento especial ao professor Leandro Rizzi que, com muito entusiasmo e rigor, ajudou a enriquecer o presente estudo. Enfim, carregarei com orgulho o nome desse departamento.

Não poderia deixar de agradecer também as nossas principais agências de fomento CAPES e FAPEMIG pelo suporte financeiro.

RESUMO

FERNANDES, Rodrigo Lopes, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2020. **O modelo de Heisenberg bidimensional: skyrmions de dois merons em antiferromagnetos e o ferromagneto com interação dipolar.** Orientador: Afrânio Rodrigues Pereira.

Na primeira parte desse trabalho, investigamos a estabilidade de skyrmions constituídos de dois merons (skyrmions $2CS$) no modelo de Heisenberg $2D$ via integração das equações de movimento para cada spin. O estudo se deu na rede antiferromagnética (AFM). A influência de um campo magnético e de impurezas não magnéticas na dinâmica desses sólitons também foram investigadas. Nossos resultados indicam que os skyrmions de dois núcleos na rede AFM são mais instáveis do que os seus contrapares ferromagnéticos e que estes, ao contrário do que se observa na rede FM , não possuem um movimento de rotação ao redor de seu centro. Também obtivemos que skyrmions $2CS$ são atraídos por impurezas magnéticas e colapsam ao atingi-la, semelhante ao que ocorre na rede ferromagnética. A aplicação de um campo magnético também influenciou na sua dinâmica com a deformação da textura em um skyrmion do tipo $1CS$. Já na segunda parte do trabalho estudamos via método de Monte Carlo o modelo de Heisenberg dipolar bidimensional ($Hd2D$), considerando a constante dipolar $D = 0.2J$. Técnicas como repesagem de histogramas e o método de Ewald foram empregados para melhor eficiência da simulação, reduzindo o custo computacional. Como previsto teoricamente, uma fase ferromagnética planar foi estabilizada a baixas temperaturas. A transição para o estado ordenado se deu a uma temperatura crítica de $T_c = 0.975 \pm 0.010$, resultado estimado pela análise de escala de tamanho finito (FSS). Além disso, pela FSS estimamos os seguintes expoentes críticos para a transição: $\nu = 1.21(3)$, $\gamma = 2.09(5)$, $\beta = 0.184(6)$, e $\alpha = -0.44(2)$. Esses valores estão próximos dos encontrados para modelos dipolares semelhantes, embora haja uma pequena discrepância com o resultado obtido para modelo XY dipolar. Levantamos a hipótese de que essa discrepância possa ter origem na anisotropia quadripolar da interação dipolar assim como se observa nos modelos dipolares puros. Também observamos que o expoente β do modelo $Hd2D$ se encontra na janela de universalidade do modelo quadripolar XYh_4 , sugerindo que sistemas dipolares possam pertencer à universalidade XYh_4 .

Palavras-chave: Skyrmions. Merons. Modelo de Heisenberg. Interação dipolar.

ABSTRACT

FERNANDES, Rodrigo Lopes, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2020. **The two-dimensional Heisenberg model: two merons skyrmions in antiferromagnets and the ferromagnets with dipolar interaction.** Advisor: Afrânio Rodrigues Pereira.

In the first part of this work, we investigated the stability of two merons skyrmions (skyrmions $2CS$) in the Heisenberg $2D$ model by integrating the equations of motion for each spin. The study took place in the antiferromagnetic lattice (AFM). The influence of a magnetic field and non-magnetic impurities on the dynamics of these solitons were also investigated. Our results indicate that the two-core skyrmions in the AFM lattice are more unstable than their ferromagnetic counterparts and that, unlike the FM lattice, they do not rotate around their center. We also found that $2CS$ skyrmions are attracted by magnetic impurities and when one of the cores falls into the vacancy, the $2CS$ collapses completely, similar to what occurs in the ferromagnetic lattice. The application of a magnetic field also influenced its dynamics with texture deformation in a $1CS$ skyrmion. Already in the second part of the work we studied via Monte Carlo method the two-dimensional dipolar Heisenberg model ($Hd2D$), considering the dipolar constant $D = 0.2J$. Techniques such as histogram re-weighting and the Ewald method were employed for better simulation efficiency, reducing the computational cost. Just as in theoretically predicted, a planar ferromagnetic phase was stabilized at low temperatures. The transition to the ordered state took place at a critical temperature of $T_c = 0.975 \pm 0.010$, the result estimated by finite size scale analysis (FSS). In addition, by FSS we estimate the following critical exponents for the transition: $\nu = 1.21(3)$, $\gamma = 2.09(5)$, $\beta = 0.184(6)$ and $\alpha = -0.44(2)$. These values are close to those found for similar dipolar models, although there is a slight discrepancy with the result obtained for XY dipolar model. We hypothesized that this discrepancy may originate from the quadripolar anisotropy of dipolar interaction as observed in pure dipolar models. We also note that the β exponent of the $Hd2D$ model falls into the universality window of the quadripolar model XYh_4 , suggesting that dipolar systems may belong to the XYh_4 universality.

Keywords: Skyrmions. Merons. Heisenberg model. Dipolar interaction.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – a) Mapeamento da esfera dos spins no plano físico bidimensional (x,y) e b) Resultado desse mapeamento formando o skyrmion do tipo 1CS. Figuras extraídas de [1] e [2].	19
Figura 2 – Configuração de skyrmion 1CS em uma rede ferromagnética.	20
Figura 3 – Representação esquemática de uma rede de skyrmions estabilizada a partir da aplicação de um campo magnético. Figura extraída de [3].	21
Figura 4 – Configuração de skyrmion 2CS em uma rede ferromagnética.	22
Figura 5 – Rede quadrada de (anti)merons em um filme de Co8Zn9Mn3 observado experimentalmente via Lorentz TEM. Figura retirada de [4].	23
Figura 6 – Visão esquemática de um bimeron. As setas indicam a magnetização no plano enquanto as cores referem-se a componente z do spin. Figura retirada da referência [5].	23
Figura 7 – Configuração de skyrmion 2CS em uma rede antiferromagnética.	26
Figura 8 – Energia do Skyrmion como função do comprimento L da rede.	28
Figura 9 – Evolução do skyrmion 2CS na rede AFM, indicando a aproximação dos merons com subsequente colapso da estrutura. As cores indicam a componente z do spin em uma subrede.	30
Figura 10 – Evolução do tamanho R(t) e da carga topológica Q(t) do skyrmion. Observe que enquanto seu tamanho decresce gradativamente com o tempo, sua carga topológica permanece constante até ir a zero no colapso.	30
Figura 11 – Evolução do skyrmion 2CS na rede FM indicando a rotação dos merons em relação ao centro do skyrmion. As cores indicam a intensidade da componente z do spin.	31
Figura 12 – (a) Tamanho do skyrmion R(t) em função do tempo de simulação t para diferentes tamanhos iniciais R0. No gráfico em inserção indicamos em escala log-log o tempo de colapso tc da estrutura em função do seu tamanho inicial R0. (b) Evolução da carga topológica Q(t) como função do tempo de simulação t para diferentes tamanhos iniciais R0.	32
Figura 13 – Evolução temporal do skyrmion na rede AFM com uma impureza magnética localizada no sítio (12a,10a). As cores indicam a intensidade da componente z do spin na subrede A. O círculo preto corresponde a localização da vacância de spin.	33
Figura 14 – Componente z do spin SzA em função da posição ao longo do eixo y (mantendo x = 0) por dois instantes diferentes de tempo (t = 0 e t = 2π).	35
Figura 15 – Componente z do spin SzA em função da posição ao longo do eixo y (mantendo x = 0) por dois instantes diferentes de tempo (t = 0 e t = 2π).	35
Figura 16 – Em (a): estado fundamental de uma rede de dipolos puros. Em (b): rotação global dos spins gerando outros possíveis estados fundamentais. Figuras extraídas de [6].	43
Figura 17 – Alguns dos estados fundamentais possíveis para uma rede quadrada de dipolos. Efeitos térmicos destroem a degenerescência contínua, selecionando estados com φ = 0 ou φ = π/2 em detrimento dos demais. Figura extraída de [7].	44

Figura 18 – Fase ferromagnética planar pFM em sistemas descritos pelo modelo $Hd2D$	45
Figura 19 – Comportamento das principais grandezas termodinâmicas de interesse, nomeadamente, energia (a), calor específico (b), magnetização (c) e suscetibilidade (d), como função da temperatura.	62
Figura 20 – Duas configurações típicas do sistema, correspondentes a duas temperaturas distintas, nomeadamente, $t = 0.15$ (figura à esquerda) e $t = 1.3$ (figura à direita).	63
Figura 21 – Dependência com a temperatura do cumulante de Binder U_4 Eq.(51), para vários tamanhos de rede L . No ponto crítico, curvas dessa quantidade para diferentes tamanhos de rede, se cruzam em um mesmo ponto fixo U^*	64
Figura 22 – Dependência da suscetibilidade χ (Eq.(55)) com a temperatura próxima à região crítica, obtida pela técnica de repesagem de histogramas. Na inserção: máximos de χ como função de L em escala logarítmica. A declividade da reta fornece uma estimativa de γ/ν	65
Figura 23 – Comportamento do parâmetro de ordem m Eq.(54) na região crítica. Em inserção, o valor de m em $T = T_c$ como função de L , em escala logarítmica. A declividade da curva fornece uma estimativa para β/ν	65
Figura 24 – Valores dos picos de dU_4/dT Eq.(52) e $d \ln m/dT$ Eq.(53) como função do tamanho L da rede em escala log-log. A declividade das curvas fornecem uma estimativa para $1/\nu$	66
Figura 25 – Funções de escala para a suscetibilidade, magnetização e cumulante de Binder em função da variável de escala $x = tL^{1/\nu}$	68
Figura 26 – Histograma de valores β para todos os sistemas magnéticos bidimensionais reportados em [8]. Extraído de [8].	70
Figura 27 – Auto-correlação $C(i)$ das séries de magnetização m amostradas na região $T_c = 0.975$	87
Figura 28 – Tempo de autocorrelação integrado τ_{int} correspondentes às séries temporais da magnetização obtidas à temperatura $T_c = 0.975$	88

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	– Energia dipolar por spin de diferentes configurações de spins, em uma rede quadrada. Tabela adaptada de [6].	42
Tabela 2	– Expoentes críticos para alguns modelos dipolares obtidos via Método de Monte Carlo. Na última linha encontram-se os resultados teóricos de Maier e Schwabl [9] utilizando grupo de renormalização. Tabela extraída de [10].	45
Tabela 3	– Temperaturas T_0 para cada tamanho L da rede utilizadas para a re- sagem de histogramas.	61
Tabela 4	– Expoentes críticos para alguns modelos dipolares com simetria contínua de spin. Os resultados desse trabalho encontram-se na primeira linha. Na última linha encontra-se os resultados teóricos de renormalização de Maier e Schwabl [9]. Tabela adaptada de [10].	67
Tabela 5	– Resultados da análise de convergência para a soma de Ewald. Os erros foram calculados via Eq.(56).	86

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	12
I SKYRMIONS E MERONS NO ANTIFERROMAGNETO DE HEISENBERG	16
1 SKYRMIONS NO HEISENBERG ISOTRÓPICO	17
1.1 O MODELO SIGMA-NÃO-LINEAR	17
1.2 SOLUÇÕES DE SKYRMIONS	18
1.3 SKYRMIONS 1CS E 2CS	20
1.4 OBJETIVOS	23
2 METODOLOGIA	25
2.1 DINÂMICA DE SPIN	25
2.2 VERSÃO DISCRETA DE Q E R	27
3 RESULTADOS E DISCUSSÕES	28
3.1 ENERGIA	28
3.2 DINÂMICA	29
3.3 REDE COM IMPUREZAS	33
3.4 SKYRMION 2CS EM UM CAMPO MAGNÉTICO	34
II O FERROMAGNETO DE HEISENBERG BIDIMENSIONAL COM INTE- RAÇÃO DIPOLAR	37
4 O HEISENBERG DIPOLAR	38
4.1 INTRODUÇÃO	38
4.2 INTERAÇÕES DE LONGO ALCANCE VS. CURTO ALCANCE .	39
4.3 DESCRIÇÃO DO MODELO	40
4.3.1 Fase planar antiferromagnética <i>pAF</i>	42
4.3.2 Fase planar ferromagnética <i>pFM</i>	44
4.4 OBJETIVOS	46
5 MÉTODOS DE SIMULAÇÃO	47
5.1 O MÉTODO DE MONTE CARLO	47
5.2 ALGORITMO DE METROPOLIS	48
5.3 TRATAMENTO DOS DADOS	50
5.3.1 O método de Jackknife	50
5.3.2 Repesagem de Histogramas	52
5.4 A SOMA DE EWALD	53
5.5 FINITE SIZE SCALING	56
5.6 O PARÂMETRO DE ORDEM	59
6 RESULTADOS E DISCUSSÕES	60
6.1 DADOS DA SIMULAÇÃO	60
6.2 GRANDEZAS TERMODINÂMICAS	61

6.3 EXPOENTES CRÍTICOS	63
6.4 DISCUSSÃO	68
CONCLUSÕES GERAIS E PERSPECTIVAS	72
REFERÊNCIAS	75
APÊNDICES	84
APÊNDICE A DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DA SOMA DE EWALD	85
APÊNDICE B ESTUDO DAS CORRELAÇÕES DAS SÉRIES TEMPORAIS .	87
ANEXO	89
ANEXO A ARTIGO PUBLICADO	90

INTRODUÇÃO

Neste quase um século de física da matéria condensada, magnetismo consolidou-se como uma das áreas de maior interesse, tanto do ponto de vista da ciência fundamental quanto de aplicações tecnológicas. Com o advento da eletrodinâmica em 1880 e, principalmente, da mecânica quântica no início do século 20, o magnetismo passou a ser bem compreendido, possibilitando grandes avanços tecnológicos ligados, sobretudo, ao desenvolvimento de dispositivos de memória. A sua origem está relacionada à interação entre spins dos elétrons que constitui o material de modo que o fenômeno é intrinsecamente quântico. Atualmente, um novo ramo do magnetismo tem despertado muito interesse entre os pesquisadores, a spintrônica, que utiliza, além da carga do elétron, o seu spin, no desenvolvimento e aprimoramento de dispositivos eletrônicos [11].

Muitas das propriedades magnéticas dos materiais pode ser entendida com o uso de modelos para descrevê-los. Em uma versão simplificada, um sistema magnético constitui-se de spins dispostos no sítio de uma rede D dimensional, interagindo com os outros spins do sistema. Essa interação pode ser dada de várias maneiras. A principal delas é a interação de troca (exchange), resultado da superposição das funções de onda dos elétrons. Essa interação é de curto alcance e tende a alinhar o spin com seus vizinhos. A Hamiltoniana que descreve o modelo é dada abaixo [1]:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1)$$

onde $\langle i,j \rangle$ indica que a soma é realizada somente entre os primeiros vizinhos e J é a constante de troca cujo sinal determina o estado fundamental do modelo, sendo ferromagnético ($J > 0$) ou antiferromagnético ($J < 0$). Considerando que o spin dos íons que constitui o material possui valor elevado, podemos aproximá-lo por um vetor clássico com três componentes sujeito ao vínculo,

$$|\vec{S}_i| = 1. \quad (2)$$

Assim, defini-se nas Eq.(1) e Eq.(2) o modelo de Heisenberg clássico isotrópico. Esse modelo (com a inclusão de anisotropias, etc) é usado como ponto de partida para

descrever as propriedades magnéticas de muitos sistemas em matéria condensada e será o modelo base para esse trabalho.

A versão contínua do modelo de Heisenberg é o modelo sigma não linear $O(3)$. Conforme será mostrado no capítulo 1, as equações de campo para esse modelo conduzem a interessantes soluções não lineares do tipo sólitons (energia finita) cuja textura é diferente do vácuo ferromagnético. Esses sólitons são conhecidos como skyrmions de Belavin-Polyakov e possuem a característica de serem topologicamente protegidos [1, 12]. Grosso modo, significa que essas configurações não podem ser levadas ao estado fundamental (com todos os spins alinhados) via deformação contínua do campo de spins. Na década de 1990, a presença desses objetos em magnetos planares foi analisada por suas possíveis contribuições indiretas para alguns observáveis, como o calor específico [13, 14] e função dispersão de nêutrons [15–17]. Hoje em dia, skyrmions individuais e cristais de skyrmions são vistos diretamente em magnetos quirais [4, 18].

Com o desenvolvimento da spintrônica, o interesse nessas estruturas cresceu devido, sobretudo, à alta estabilidade que esses objetos apresentam. Cogita-se, entre outras aplicações, a utilização de skyrmions como bits em dispositivos de armazenamento de informações. Além disso, skyrmions podem ser manipulados via corrente de spin polarizada, possibilitando sua utilização em memórias do tipo “racetrack”, onde quem move são os bits, superando muitos problemas que as memórias mecânicas como os *HDs* apresentam [11, 19–21].

A maioria dos estudos relacionados à textura de skyrmions em materiais magnéticos refere-se àqueles de um centro (1CS) e, particularmente, em ferromagnetos (FM) quirais. Contudo, um outro tipo de skyrmion, formado por um meron e um anti-meron (skyrmion 2CS), também é possível numa teoria contínua e muito menos atenção tem sido dedicada a ele. No entanto, recentemente, o interesse em texturas do tipo meron e anti-meron cresceu devido a predições teóricas de sua emergência em magnetos quirais com alta anisotropia planar [22, 23]. Em 2018, Yu et al., através de sofisticados experimentos envolvendo microscopia de Lorentz de transmissão de elétrons em filmes finos magnéticos, observaram experimentalmente, pela primeira vez, uma textura de spins do tipo meron e anti-meron [24]. Assim sendo, nesse trabalho vamos investigar alguns problemas associados à estabilidade desses solitons topológicos em redes discretas e finitas. Concentramos nosso estudo no sistema antiferromagnético *AFM* visto que o caso ferro já foi estudado

por Amaral et al. em [25].

Conforme ficará evidente ao longo desse trabalho, skyrmions $2CS$ em redes AFM discretas são muito instáveis, mesmo para grandes sistemas. Portanto, além do termo de Heisenberg isotrópico, outras interações são necessárias para estabilizar a textura. Pensamos inicialmente que a interação dipolar fosse capaz de estabilizar a excitação. É fato conhecido na literatura que a interação dipolar, apesar de muito menor que a interação de troca, desempenha um papel importante em magnetos planares, uma vez que essa favorece configurações onde os spins tendem a permanecer no plano do filme [6, 26]. Uma vez que o tipo de skyrmion estudado nesse trabalho apresenta majoritariamente spins apontando paralelamente ao plano, acreditávamos que a interação dipolar pudesse estabilizá-lo. No entanto, quando considerada, o skyrmion tornava-se ainda mais instável. Mesmo assim, como a interação dipolar é negligenciada na maioria dos modelos que descrevem sistemas magnéticos, sobretudo por ser uma interação de longo alcance e, portanto, complexa de se tratar, tanto de forma analítica quanto através de simulações, resolvemos estudá-la no modelo de Heisenberg do ponto de vista termodinâmico e estatístico. Portanto, esse trabalho pode ser dividido em duas partes: na primeira, utilizamos simulações de dinâmica de spin para estudar a estabilidade de skyrmions no antiferromagneto de Heisenberg isotrópico e na segunda parte, usamos técnicas de Monte Carlo para estudar a termodinâmica do modelo de Heisenberg com interação dipolar.

O modelo de Heisenberg isotrópico, conforme explicaremos mais à frente, não apresenta ordem de longo alcance em qualquer temperatura finita T e, portanto, nenhuma transição do tipo ordem-desordem [27]. Já considerando a interação dipolar, uma fase ordenada a baixas temperaturas é estabilizada e, conseqüentemente, uma transição se manifesta. No entanto, a natureza dessa transição ainda é controversa. Enquanto os resultados numéricos de Mol e Costa [10, 28, 29] indicam um decaimento algébrico da magnetização e do comprimento de correlação na região crítica, Maier e Schwabl [9], usando técnicas de renormalização, obtêm um comportamento exponencial para essas quantidades (semelhante ao modelo XY) [30].

Desse modo, apesar dos estudos numéricos e teóricos concordarem com a existência de uma transição de fase induzida pela interação dipolar, eles obtêm expoentes críticos muito distintos um do outro. Assim, para corroborar com a discussão, performamos simulações de Monte Carlo para o modelo Heisenberg dipolar bidimensional $Hd2D$ e, através

de técnicas de repesagem de histogramas, procuramos estudar o comportamento crítico do sistema. Pretendemos comparar nossos resultados com modelos semelhantes na literatura, principalmente os estudados por Mol e Costa, nomeadamente o Heisenberg anisotrópico dipolar AHd [10] e o Heisenberg anisotrópico dipolar bilayer $AHd_{bilayer}$ [28]. Devido à anisotropia planar da interação dipolar, acredita-se que o modelo $Hd2D$ apresente o mesmo comportamento crítico do modelo XY dipolar, no entanto, de acordo com Tomita [31], no contexto dos sistemas dipolares puros (sem a interação de troca) essa inferência não é verdadeira. Portanto, também vamos comparar nossos resultados com os obtidos por Mol e Costa para o XY dipolar [29] para verificarmos se algo semelhante também ocorre nesses sistemas.

PARTE I

SKYRMIONS E MERONS NO ANTIFERROMAGNETO DE HEISENBERG

1 SKYRMIONS NO HEISENBERG ISOTRÓPICO

Neste capítulo introduzimos o modelo sigma-não-linear $O(3)$ e em sequência, mostramos como suas equações de campo conduzem a soluções do tipo skyrmions. A diferença entre as texturas 1CS e 2CS foi enfatizada. Trazemos também algumas justificativas para o estudo de skyrmions, principalmente aqueles do tipo 2CS na rede *AFM*. Na última seção, sintetizamos os principais objetivos da primeira parte desse trabalho.

1.1 O MODELO SIGMA-NÃO-LINEAR

O estado fundamental ($T = 0$) do modelo de Heisenberg, como definido na Eq.(1), corresponde a um alinhamento de todos os spins em paralelo ou anti-paralelo consoante o sinal da interação J . Uma vez que o modelo possui invariância rotacional, o sistema é continuamente degenerado sob rotação global dos spins [12]. Acima de $T = 0$ e no regime de baixas temperaturas, os spins apresentam pequenas flutuações em relação aos seus vizinhos, formando as ondas de spin, também conhecidas como magnons ou modos de Goldstone. Esses modos possuem grandes amplitudes e baixas energias e, quando excitados, tendem a restaurar a simetria perdida do sistema, similar aos fônons em sólidos cristalinos. De fato, em dimensões $D \leq 2$, a excitação térmica desses modos levam à divergência das flutuações do campo de spin, causando a destruição da ordem de longo alcance (OLA). Assim, o modelo de Heisenberg isotrópico em $D \leq 2$ não apresenta ordem de longo alcance em qualquer temperatura finita T . Esse resultado foi provado rigorosamente por Mermin-Wagner [27] num importante teorema:

Teorema de Mermin-Wagner: Não existe quebra espontânea de uma simetria contínua, a qualquer temperatura finita T , em sistemas com interação de curto alcance em dimensões $D \leq 2$.

Salienta-se que esse teorema é geral, não estando limitado somente a sistemas magnéticos. Qualquer modelo com uma simetria contínua em baixas dimensões não exibe ordem de longo alcance em uma temperatura finita T . Já sistemas com simetria discreta, como por exemplo o de Ising, *OLA* pode ser estabilizada.

Para investigarmos as excitações de mais baixa energia do modelo, começamos

reescrevendo a Hamiltoniana Eq.(1) da seguinte forma [32]:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(1 - \frac{(\vec{S}_i - \vec{S}_j)^2}{2} \right). \quad (3)$$

Uma vez que em baixas temperatura as flutuações entre os spins vizinhos são pequenas, a diferença na Eq.(3) pode ser substituída por um gradiente para sistemas suficientemente grandes. Assim, no limite contínuo, obtemos o famoso modelo sigma não linear O(3):

$$H_\sigma = \frac{J}{2} \int d^2x (\nabla \mathbf{S})^2, \quad (4)$$

onde \vec{S} é um campo vetorial com três componentes $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ sujeito ao vínculo $\vec{S} \cdot \vec{S} = 1$. Aqui, redefinimos o estado fundamental somando uma constante. O gradiente do campo \vec{S} na equação acima é calculado como $\sum_{i=1}^3 \sum_{\sigma=1}^2 = \partial_\sigma S_i \partial_\sigma S_i$, onde o índice σ refere-se às coordenadas espaciais x, y . Além desse modelo ser invariante sob rotações globais O(3) no espaço dos spins, ele também é invariante de escala com respeito à transformação $\vec{r} \rightarrow k\vec{r}$, onde k é uma constante arbitrária. Como veremos a seguir, esse modelo possui interessantes soluções estáticas e com energia finita designada de sólitons.

1.2 SOLUÇÕES DE SKYRMIONS

Com base na Hamiltoniana Eq.(4), demonstra-se que equação de campo no regime estático e em $D = 2$ dimensões é dada por [12]:

$$\nabla^2 \vec{s} - (\vec{s} \cdot \nabla^2 \vec{s}) \vec{s} = 0. \quad (5)$$

A presença do vínculo $\vec{S} \cdot \vec{S}$ é de fundamental importância na obtenção das equações não lineares acima. Trataremos agora das soluções da (5). Vamos inicialmente considerar as soluções triviais, de energia zero. Claramente pela Hamiltoniana Eq.(4), para se ter uma configuração com energia zero, o campo deve satisfazer para todo \mathbf{x} a condição $\partial_\sigma \vec{s} = 0$, ou seja, o campo deverá ser uniforme em todo o espaço das coordenadas. Isso corresponde a todos os spins apontando numa mesma direção. Esse estado é conhecido como vácuo ferromagnético e por causa da simetria rotacional é altamente degenerado, ou seja, temos uma família de soluções com $E = 0$ correspondente a diferentes direções em que \vec{S} aponta [1, 12].

Já soluções mais interessantes, com energia diferente de zero, são obtidas considerando que o campo \vec{S} deva satisfazer, quando $\mathbf{x} \rightarrow \infty$ a condição de que $\partial_\sigma \vec{s} = 0$, evitando, assim, que sua energia dada pela Eq.(4) divirja. Logo, \vec{S} deve tender a uma constante no infinito, ou seja, o campo \vec{S} deve apontar na mesma direção e sentido em todos os pontos do infinito espacial. Isso permitirá definirmos um mapeamento único do espaço físico \mathbf{R}^{fis} no espaço interno dos spins \mathbf{S}_2^{int} , resultando nas famosas soluções de skyrmions.

Uma vez que temos $\lim_{r \rightarrow \infty} \vec{S}(x) = \vec{S}^{(0)}$ ($\vec{S}^{(0)}$ é um vetor constante), o plano de coordenadas \mathbf{R}^{fis} pode ser compactado em uma superfície esférica \mathbf{S}_2^{fis} , onde o círculo no infinito é reduzido ao polo norte da esfera (projeção estereográfica). Do mesmo modo, o espaço interno \mathbf{S}_2^{int} , isto é, o espaço dos campos \vec{S} sujeito ao vínculo $\vec{S} \cdot \vec{S} = 1$ é também uma superfície esférica de raio unitário. Então, qualquer configuração do campo \vec{S} com energia finita é apenas um mapeamento de \mathbf{S}_2^{fis} em \mathbf{S}_2^{int} . Os skyrmions de Belavin-Polyakov são o resultado desse mapeamento, ilustrado na Fig. 1, e possuem uma energia finita de $4\pi J$. Em 1975, usando um elegante truque, Belavin e Polyakov demonstraram que tais configurações satisfazem as equações de campo Eq.(5), para o modelo $O(3)$ [1, 33].

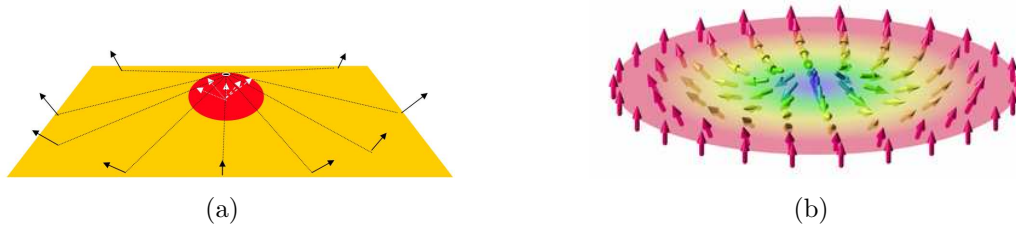


Figura 1 – a) Mapeamento da esfera dos spins no plano físico bidimensional (x,y) e b) Resultado desse mapeamento formando o skyrmion do tipo 1CS. Figuras extraídas de [1] e [2].

Um resultado bem conhecido em topologia, o qual apresentaremos sem provas, diz que qualquer mapeamento não singular de uma superfície \mathbf{S}_2 em outra \mathbf{S}_2 pode ser classificado em setores homotópicos [12]. Configurações de um dado setor não podem ser transformados em configurações do outro via deformações contínuas do campo. Cada setor é, portanto, topologicamente protegido. Além disso, existe um número infinito de tais setores caracterizados por um conjunto de inteiros positivos, negativos ou nulos. Esses setores homotópicos formam um grupo no qual são isomorfos ao grupo dos inteiros.

Assim, as configurações de skyrmions definidas pelo mapeamento $\mathbf{S}_2^{fis} \rightarrow \mathbf{S}_2^{int}$ são agrupadas em setores topologicamente distintos, caracterizados por um índice topológico Q designado de carga ou número topológico do skyrmion. Essa quantidade corresponde

a quantas vezes a esfera de spins \mathbf{S}_2^{int} cobre o espaço físico \mathbf{S}_2^{fis} e é matematicamente expressa por [34]:

$$Q = -\frac{1}{4\pi} \int d^2x \mathbf{s} \cdot (\partial_x \mathbf{s} \times \partial_y \mathbf{s}) = N \frac{s^z(\infty) - s^z(0)}{2} = N \cdot P, \quad (6)$$

em que N é o *winding number* relacionado à vorticidade do núcleo do skyrmion e $P = (s^z(\infty) - s^z(0))/2$ é chamado de polaridade, definida como a diferença entre a componente z do spin na fronteira da excitação e no seu núcleo [34]. Assim, a carga topológica pode ser definida como um produto entre sua vorticidade N e sua polaridade P e assume valores inteiros de $Q = \pm 1 \pm 2 \pm 3 \dots$. A energia de cada configuração é dada por $E = 4\pi J|Q|$. Em física da matéria condensada, estamos mais interessados em skyrmions com carga topológica $Q = 1$, uma vez que possuem menor energia e, portanto, são mais fáceis de serem excitados.

1.3 SKYRMIONS 1CS E 2CS

Observe que as soluções de skyrmions obtidas anteriormente requerem condições de fronteira em $\mathbf{x} \rightarrow \infty$, portanto sua geometria está intimamente relacionada a esse fato [1]. Por exemplo, considerando $\vec{S} = (0,0,1)$ em $\mathbf{x} \rightarrow \infty$, isto é, considerando que os spins da fronteira apontam perpendicularmente ao plano do filme, obtemos o skyrmion de um núcleo (1CS) ilustrado na Fig. 2.

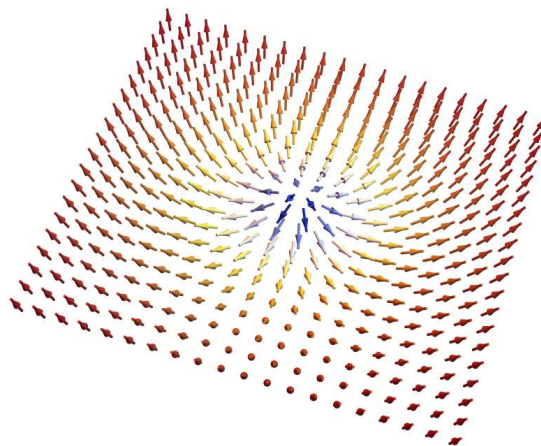


Figura 2 – Configuração de skyrmion 1CS em uma rede ferromagnética.

Nos últimos anos, essas estruturas foram observadas experimentalmente em vários sistemas magnéticos, especialmente em magnetos quirais como $MnSi$, $FeGe$, $Fe_{1-x}Co_xSi$ [35]. A ausência de simetria de inversão nesses materiais ativa

a interação de Dzyaloshinski-Moriya que favorece uma textura de spins do tipo hélice, como ilustrado na Fig. 3 a seguir. Aplicando um campo magnético perpendicular ao plano do filme, skyrmions são estabilizados [11, 19–21]. Em materiais centro simétricos, a interação Dzyaloshinski-Moriya não é relevante, mas skyrmions ainda podem ser estabilizados pela competição entre a interação dipolar e uma anisotropia de eixo fácil [3].

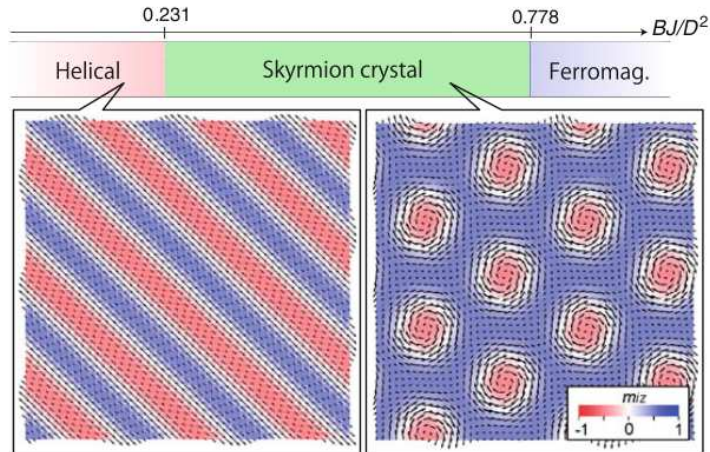


Figura 3 – Representação esquemática de uma rede de skyrmions estabilizada a partir da aplicação de um campo magnético. Figura extraída de [3].

Outra textura de spins completamente diferente (mas com mesma energia) pode ser obtida considerando $\vec{S} = (1,0,0)$ em $\mathbf{x} \rightarrow \infty$, ou seja, com os spins nas bordas da estrutura apontando paralelamente ao plano do filme. Isso resulta no skyrmion de dois núcleos ($2CS$) ilustrado na Fig. 4. Basicamente, essa estrutura consiste de dois merons, um meron tem quiralidade $q = 1$ para configurações do tipo vórtice e $q = -1$ para configurações do tipo anti-vórtice, além de uma polaridade p que pode ser de ± 1 . Portanto, pela Eq.(6) cada meron possui uma carga de skyrmion fracionária dada por $\frac{pq}{2} = \pm 1/2$. Assim, um meron $(1,p)$ e um anti-meron $(-1, -p)$ se juntam formando um skyrmion com carga topológica $Q = 1$. Essa textura pertence a um setor topologicamente distinto do trivial de tal maneira que não pode ser deformado continuamente no estado fundamental. Na Fig. 4, o meron é indicado pela cor azul e o anti-meron pela cor vermelha. O campo \vec{S} para a textura $2CS$ é dado por:

$$\vec{S} = \left(\frac{r^2 - R^2}{r^2 + R^2}, \frac{2Rx}{r^2 + R^2}, \frac{2Ry}{r^2 + R^2} \right), \quad (7)$$

onde $r^2 = x^2 + y^2$ e R é o tamanho do skyrmion. Sua energia é de $4\pi J$ e é independente de R .

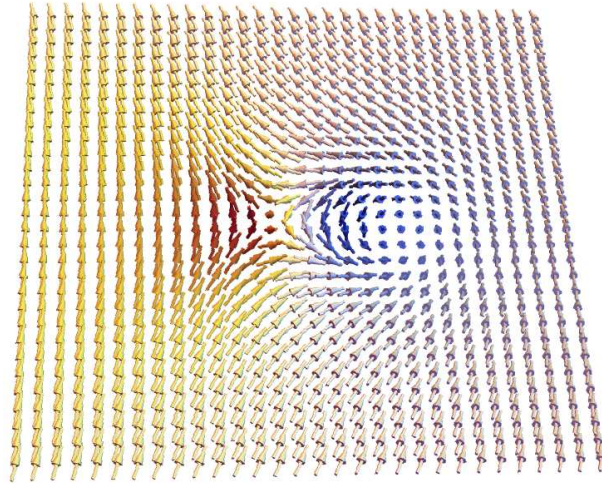


Figura 4 – Configuração de skyrmion $2CS$ em uma rede ferromagnética.

Skyrmions têm recebido muita atenção no meio técnico científico por pelo menos três razões [11, 36]. Primeiro, essas estruturas são bastante estáveis devido a sua proteção topológica. Segundo, skyrmions são extremamente finos, da ordem de nanômetros, possibilitando sua utilização em futuras nanotecnologias. Por fim, essas texturas podem ser facilmente movidas por corrente de spins polarizadas com alta eficiência energética. Assim, considera-se promissor sua utilização na área de spintrônica, mais especificamente em dispositivos de armazenamento e transmissão de informações.

Mais recentemente, Parkin et al. [37] propuseram um novo tipo de memória baseada em bits móveis, designada de memórias “racetrack”. Esses dispositivos são formados basicamente por um fio ferromagnético no qual as informações são associadas à direção de domínios magnéticos. Através de uma corrente de spin polarizada, esses domínios são movidos pelo fio. Estudos indicam que a substituição desses domínios por skyrmions magnéticos podem trazer grandes vantagens tecnológicas, como a redução da energia e da densidade de corrente necessária para mover os bits [38]. A presença ou não dessa textura em um local específico de memória estaria associada à informação não-volátil de 0/1 bit.

A maior parte dos estudos teóricos e experimentais envolvendo skyrmions referem-se àqueles do tipo $1CS$, os primeiros detectados experimentalmente em sistemas de matéria condensada. No entanto, muito recentemente, texturas magnéticas do tipo merons e anti-merons começaram a receber maior interesse dos pesquisadores. Em 2018, uma rede quadrada de merons e anti-merons foi observada experimentalmente pela primeira vez no espaço real via Lorentz TEM, em um filme fino do magneto quiral $Co_8Zn_9Mn_3$, mos-

trado na Fig. 5 [24]. Salienta-se que esse tipo de textura também já havia sido estudado em alguns trabalhos teóricos em anos anteriores [5, 23, 39]. Citamos aqui o trabalho de Ezawa [39], demonstrando a existência de compactos bimerons em filmes finos magnéticos com anisotropia planar, e também o trabalho de R. L. Silva et al. [5], que, através de simulações de Monte Carlo, demonstraram a emergência de redes de skyrmions e bimerons em filmes magnéticos quirais com impureza não magnética. A estrutura de um bimeron pode ser observada na Fig. 6, extraída de [5]. Espera-se, portanto, que além dos usuais skyrmions e anti-skyrmions, texturas do tipo merons como os skyrmions de dois núcleos possam receber cada vez mais atenção.

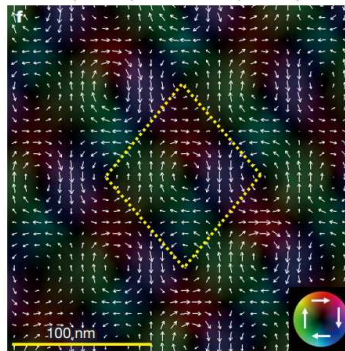


Figura 5 – Rede quadrada de (anti)merons em um filme de $\text{Co}_8\text{Zn}_9\text{Mn}_3$ observado experimentalmente via Lorentz TEM. Figura retirada de [4].

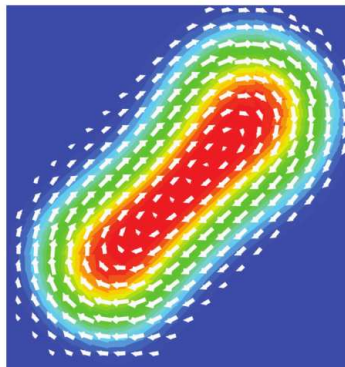


Figura 6 – Visão esquemática de um bimeron. As setas indicam a magnetização no plano enquanto as cores referem-se a componente z do spin. Figura retirada da referência [5].

1.4 OBJETIVOS

Pelo fato de as observações experimentais de texturas do tipo merons em magnetos serem recentes, pouca atenção tem sido dedicada aos skyrmions de dois núcleos. De fato, apesar dos skyrmions apresentarem uma estabilidade topológica, geralmente isso não

implica em uma estabilidade física. As propriedades topológicas estão intimamente relacionadas ao caráter contínuo do campo, de modo que os efeitos de discretização e finitude dos sistemas reais levam à perda dessas propriedades. Para uma completa estabilização dessas texturas, interações adicionais como a Dzyaloshinski-Moriya (caso dos skyrmions $1CS$) e anisotropias são necessárias. Entretanto, à parte dessas interações, é útil estudar a dinâmica de skyrmions isolados em filmes finos reais de modo a compreender quais efeitos a discretização, as anisotropias e as impurezas têm sobre essa textura. Para o skyrmion $2CS$ Amaral et al. [25] realizaram simulações de dinâmica de spin em redes discretas no ferromagneto (FM) de Heisenberg isotrópico $2D$. Seus resultados indicam uma alta estabilidade dessa estrutura no FM . No entanto, a característica estática da solução é perdida, uma vez que os merons passaram a girar em torno do centro do skyrmion com uma frequência bem definida ω que depende do tamanho L da rede [25].

Portanto, nesse trabalho, investigaremos numericamente alguns problemas associados à estabilidade de skyrmions $2CS$ em filmes finos magnéticos descritos pelo modelo de Heisenberg isotrópico Eq.(1). Como na referência [25] essa textura foi investigada na rede ferromagnética (FM), dedicaremos nosso estudo na rede antiferromagnética AFM quadrada, esperando obter algumas diferenças fundamentais. O interesse em sistemas AFM cresceu nos últimos anos, sobretudo pela descoberta de que skyrmions AFM não sofrem o efeito Hall de Skyrmion (SkHE) como os seus contrapares ferromagnéticos [40, 41]. Ou seja, impulsionados por uma corrente de spin polarizada, essas estruturas na rede AFM podem ser movidas por longas distâncias nos racetracks sem tocar suas bordas e colapsar, o que é bastante vantajoso tecnologicamente. De fato, antiferromagnetos têm emergido como um novo campo de interesse em spintrônica. Portanto, esperamos que esse trabalho possa contribuir futuramente para o entendimento das propriedades das excitações de dois núcleos em materiais AFM $2D$, estudados experimentalmente.

Como sistemas AFM apresentam intrinsecamente duas estruturas de sub-rede, toda a fundamentação teórica dessa seção, desenvolvida com base num sistema FM , ainda é válida, bastando substituir o campo \vec{S} pelo vetor de Néel, $\vec{n}_i = \frac{\vec{s}_{2i} - \vec{s}_{2i+1}}{2}$, onde os subscritos referem-se a diferentes sub-redes do sistema.

2 METODOLOGIA

Dedicamos esse capítulo para apresentação dos métodos numéricos adotados no estudo do skyrmion $2CS$ na rede AFM . Explicamos inicialmente o método predictor corrector, usado na integração das equações de movimento de cada spin do sistema e, por fim, definimos as versões discretas dos observáveis carga topológica Q e tamanho da textura R .

2.1 DINÂMICA DE SPIN

Como mencionado anteriormente, a primeira parte do nosso trabalho consiste em investigar como o skyrmion $2CS$ se comporta em redes discretas e finitas. Portanto, para explorarmos seu comportamento dinâmico, devemos realizar a integração numérica das equações de movimento para cada spin da rede. Essas equações são dadas por [42]:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{S}_i = -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}_i} \times \mathbf{S}_i, \quad (8)$$

onde $\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ é a Hamiltoniana do modelo de Heisenberg isotrópico. Como estamos lidando com um sistema AFM devemos ter $J = -1$.

Existem diversos métodos numéricos para a integração da Eq.(8), cada qual com diferentes erros de truncamento. Um bom método deve, além de ser eficiente, observar as leis de conservação do modelo. Por exemplo, como vamos impor condições de contorno periódicas, a energia deve ser uma quantidade conservada ao longo do tempo. Outra quantidade muito importante a ser conservada é o comprimento de spin $|\vec{S}_i| = 1$ visto que é parte importante da definição do modelo. Portanto, utilizaremos, nesse trabalho, o método predictor-corrector de quarta ordem. Esse método é bastante estabelecido na literatura pela sua boa performance em integração numérica de problemas de valor inicial [42, 43].

Para descrever o método, reescreveremos a Eq.(8) como $\dot{y} = f(y)$ onde y é uma notação simplificada para uma completa configuração de spins, ou seja, um vetor com $3N$ dimensões para uma rede com N sítios. A configuração inicial é representada por y_0 . O passo predictor do esquema é então dado (neste trabalho) pelo método explícito

Adams-Bashforth de quatro passos [43]:

$$y(t + \delta t) = y(t) + \frac{\delta t}{24}[55f(y(t)) - 59f(y(t - \delta t)) + 37f(y(t - 2\delta t)) - 9f(y(t - 3\delta t))] \quad (9)$$

que tem um erro local de truncamento de $(\delta t)^5$. O passo corrector consiste tipicamente em uma iteração do método implícito de três passos Adams-Moulton [42, 43]:

$$y(t + \delta t) = y(t) + \frac{\delta t}{24}[9f(y(t + \delta t)) + 19f(y(t)) - 5f(y(t - \delta t)) + 9f(y(t - 2\delta t))] \quad (10)$$

que também possui um erro de truncamento da ordem de $(\delta t)^5$. Observe que inicialmente precisamos saber o valor de $y(\delta t), y(2\delta t)$ e $y(3\delta t)$ à parte da condição inicial $y(0) = y_0$. Assim, executamos os primeiros três passos da integração com o método de Runge-Kutta, que não pode ser usado no processo inteiro devido ao rápido acúmulo dos erros de truncamento (a menos que utilizemos um valor muito pequeno para o passo δt) [42].

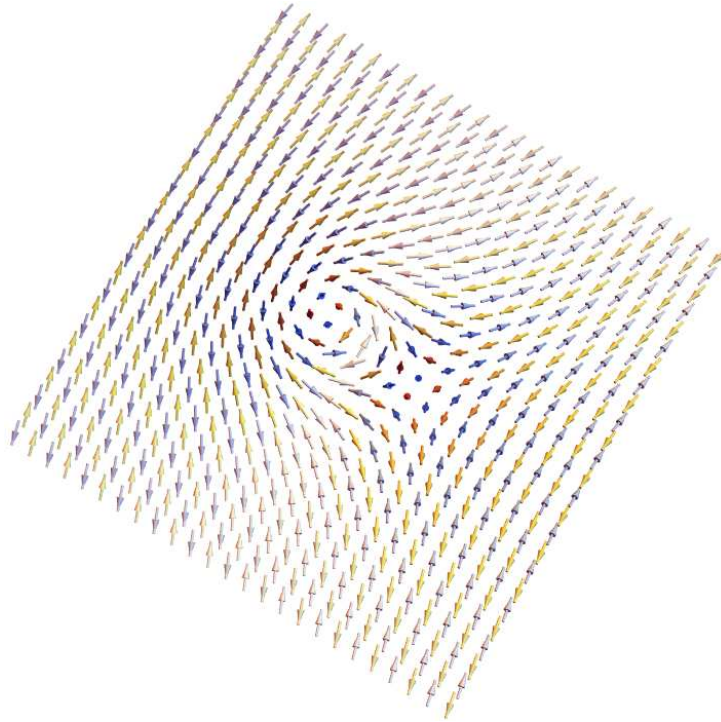


Figura 7 – Configuração de skyrmion $2CS$ em uma rede antiferromagnética.

O estado inicial $y(0) = y_0$ é dado pela textura de skyrmion Eq.(7). No entanto, como estamos tratando de um sistema antiferromagnético, devemos dividir a rede em duas sub-redes A e B. Na sub-rede A, a configuração é dada diretamente pela fórmula Eq.(7) e na sub-rede B, pela mesma equação, mas com sinal de menos. Se considerarmos o vector

de Néel \vec{n} , a configuração deverá ser similar a somente uma sub-rede A ou B. Na Fig. 7 acima mostramos a textura resultante considerando $R = 4a$ (a é o parâmetro de rede considerado 1 nesse trabalho).

2.2 VERSÃO DISCRETA DE Q E R

Skyrmions podem ser caracterizados pela sua carga topológica Q , como definido na equação (6), e pelo seu tamanho¹ R . Enquanto no limite contínuo essas quantidades são estáticas, em redes discretas e finitas elas podem variar com tempo, indicando a perda das propriedades topológicas da textura. Portanto, importantes informações sobre a dinâmica do skyrmion podem ser extraídas dessas duas quantidades. Numericamente, para o cálculo da carga topológica Q devemos empregar uma versão discreta da Eq. (6):

$$Q = \frac{1}{8\pi} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \left[\left(\vec{S}_{i+x} - \vec{S}_{i-x} \right) \times \left(\vec{S}_{i+y} - \vec{S}_{i-y} \right) \right] \quad (11)$$

onde N é o número de spins do sistema e o subscrito $(i \pm \sigma)$, com $\sigma = x, y$, indica o primeiro vizinho do spin \vec{S}_i na direção $\pm \hat{\sigma}$.

Já para uma estimativa numérica do tamanho R_d do skyrmion, utilizamos a componente S^x de todos os spins da textura, como definido abaixo:

$$R_d^2 = (m - 1)(2^m \pi)^{-1} \sum_i (1 - S_i^x)^m \quad (12)$$

onde $m > 1$ é um inteiro arbitrário e o somatório é sobre todos os spins do sistema. Essa expressão é motivada considerando o fato de que, no limite contínuo, substituindo o somatório em (12) por uma integral sobre $dxdy/a$ e usando a textura de skyrmion como definido em (7), obtemos a identidade $R_d = R$ [44].

¹ Para o skyrmion $2CS$, o tamanho R é definido como a distância entre o meron e o centro do skyrmion.

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesse capítulo apresentamos os principais resultados referente à dinâmica do skyrmion $2CS$ na rede antiferromagnética (AFM). Os resultados foram comparados com aqueles obtidos por Amaral et al. [25] na rede ferromagnética. Nas duas últimas seções investigamos o comportamento da textura próximo a uma impureza não magnética e na presença de um campo magnético externo.

3.1 ENERGIA

Conforme mencionado anteriormente, as propriedades topológicas estão intimamente relacionadas à característica contínua do campo, de modo que numa rede discreta e finita, esperamos que os skyrmions percam algumas de suas propriedades. A Fig. (8) apresenta o resultado da energia do Skyrmion E , calculada via Eq.(1), como função do inverso do comprimento da rede L . Diferentes curvas se referem a diferentes tamanhos R do skyrmion. A energia do estado fundamental foi redefinida a zero, subtraindo o valor de $-2NJ$.

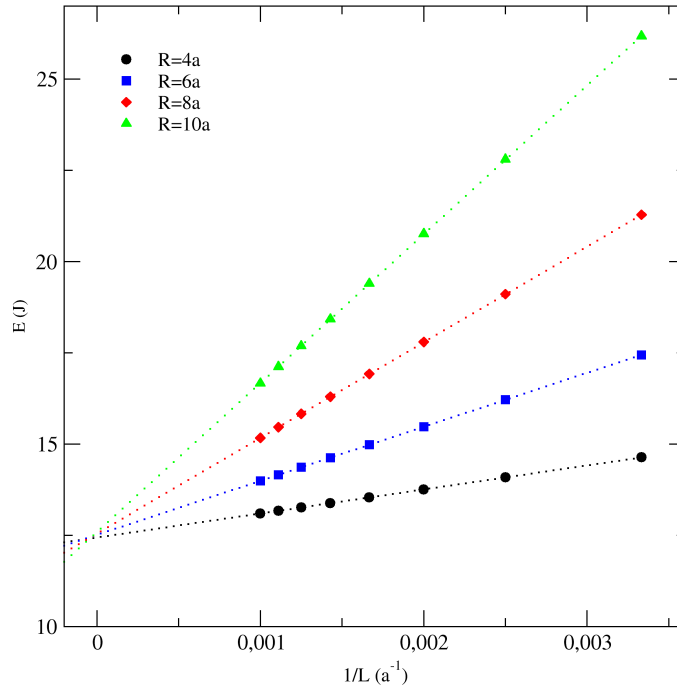


Figura 8 – Energia do Skyrmion como função do comprimento L da rede.

Observamos pelo gráfico Fig. (8) que a energia do skyrmion não é de longe cons-

tante, conforme dado na teoria contínua, mas passa a depender do tamanho L da rede. Assim, de acordo com o gráfico, para um comprimento fixo R , quanto menor a rede, maior a energia E da excitação. Observe também que a relação entre E e $1/L$ é aproximadamente linear. Outro fato importante é a quebra da invariância de escala do modelo, com a energia do skyrmion dependendo também de seu tamanho: para um L fixo, a energia da excitação E cresce com R .

Através de uma regressão linear, realizamos uma extrapolação dos resultados no limite $1/L \rightarrow 0$, o que corresponde ao tamanho L da rede indo a infinito. Neste limite, a aproximação contínua é recuperada e todas as retas referentes a distintos R se interceptam num mesmo ponto, correspondente ao valor de energia $E = 4\pi J \approx 12,57J$. Portanto, a invariância de escala é recuperada e a energia da textura passa a não depender do seu tamanho R nem do tamanho L da rede.

Não é surpresa a dependência da energia E da textura com o tamanho L do sistema. Uma vez que a rede é discreta, spins apresentam grandes diferenças em suas direções, tanto maior quanto menor for a rede. Isso implica em uma energia maior, como podemos notar facilmente pelo produto escalar entre spins dada em Eq. (1). Para uma rede infinitamente grande, essa diferença se reduz a pequenas flutuações e a energia da textura se aproxima do valor predito pela teoria contínua.

3.2 DINÂMICA

Passamos agora ao estudo de como o skyrmion $2CS$ evolui ao longo do tempo na rede AFM . Para isso, integramos as equações de movimento para cada spin como definido na Eq.(8). Os resultados foram comparados com os obtidos por Amaral et al. [25] para a rede ferromagnética FM .

Inicialmente fixamos o tamanho inicial do skyrmion em $R = 10$ e realizamos simulações para vários tamanhos de redes L . O primeiro resultado observado foi a grande instabilidade da textura, marcada pelo seu rápido colapso, sobretudo em pequenas redes. Por exemplo, na rede 1000×1000 , a excitação colapsou em um tempo de $125\hbar/J$, diferentemente do observado no sistema FM , onde a excitação é praticamente estável ao longo do tempo. Aqui, à medida que o tempo evolui, os dois merons se aproximam cada vez mais rápido, até se encontrarem no centro do skyrmion e a estrutura decair em ondas de spin. A perda da estabilidade topológica da textura se deve a efeitos de discretização e finitude

da rede. Com o aumento de L , gradativamente o tempo de vida do skyrmion aumenta, indicando que, possivelmente, no limite $L \rightarrow \infty$ a estrutura se estabilize. O processo de fusão e aniquilação dos merons pode ser visto na Fig. (9), na qual mostramos a evolução da textura nos tempos $t = 0\hbar/J$, $t = 100\hbar/J$, $t = 125\hbar/J$ e $t = 130\hbar/J$, numa rede de tamanho $L = 1000$.

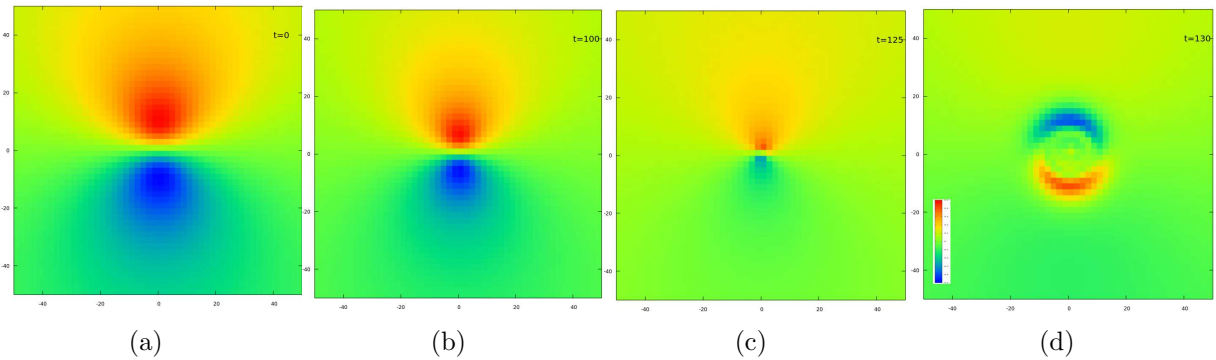


Figura 9 – Evolução do skyrmion $2CS$ na rede AFM , indicando a aproximação dos merons com subsequente colapso da estrutura. As cores indicam a componente z do spin em uma subrede.

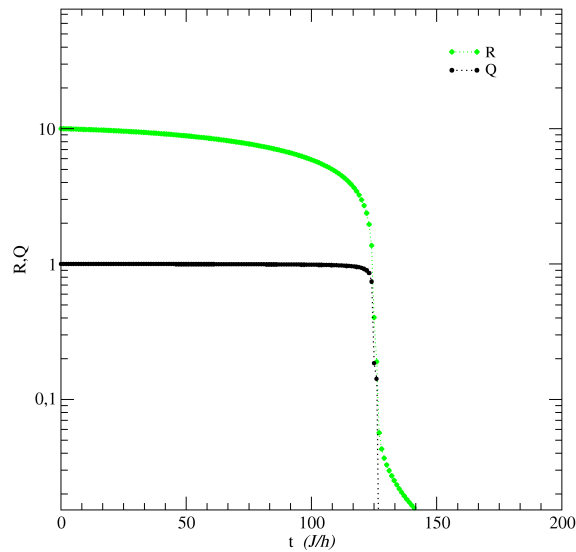


Figura 10 – Evolução do tamanho $R(t)$ e da carga topológica $Q(t)$ do skyrmion. Observe que enquanto seu tamanho decresce gradativamente com o tempo, sua carga topológica permanece constante até ir a zero no colapso.

Como consideramos condições de fronteira periódicas, durante toda simulação a energia do sistema permanece aproximadamente constante. Já o tamanho do skyrmion $R(t)$, que inicialmente é $R = 10$, diminui gradativamente com o tempo (resultado da atração dos merons), indo a zero no momento do colapso, conforme mostrado na Fig. (10). No mesmo gráfico, plotamos também a evolução da carga topológica Q . Esta permanece com valor igual a 1 durante todo o tempo, indo a zero somente quando o skyrmion colapsa.

Analisando a dinâmica do skyrmion $2CS$ na rede antiferromagnética, percebemos outra importante diferença com relação ao caso ferro: aqui, a textura não apresenta um movimento de rotação em relação ao seu centro. De fato, como obtido por Amaral et al. [25], skyrmions $2CS$ em redes discretas ferromagnéticas não são estáticos como prediz a teoria contínua. Ao contrário, os dois merons giram ao redor do seu centro com uma frequência característica ω que depende do tamanho L da rede. Os autores obtiveram também que no limite $L \rightarrow \infty$, a frequência ω tende a zero de modo que o skyrmion torna-se estático e com energia igual a $4\pi J$. Já na rede AFM , como vimos, os dois merons se aproximam cada vez mais rápido, sem qualquer movimento de rotação, até se encontrarem no centro da excitação. Na Fig. (11) a seguir mostramos a dinâmica do skyrmion na rede ferromagnética. É visível ao longo do tempo a rotação dos merons em relação ao centro do skyrmion.

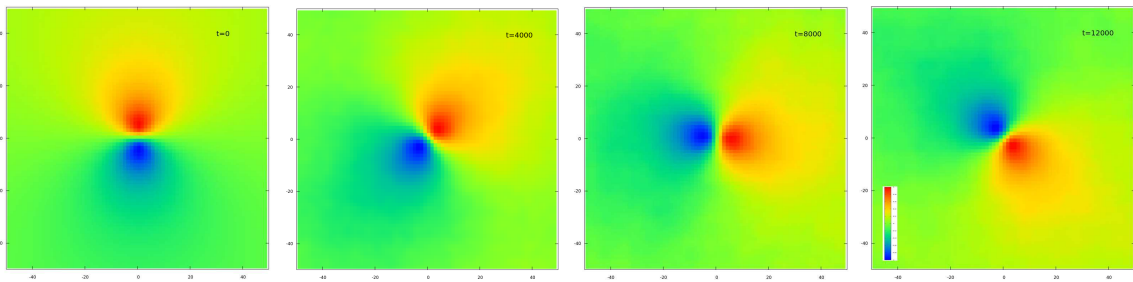
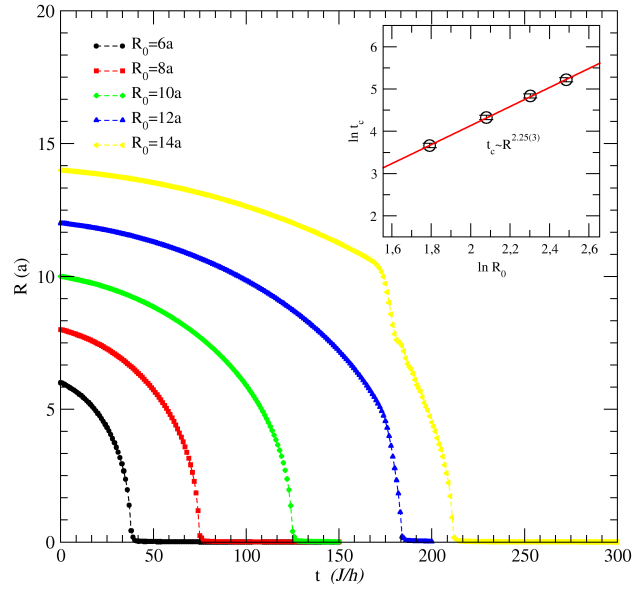


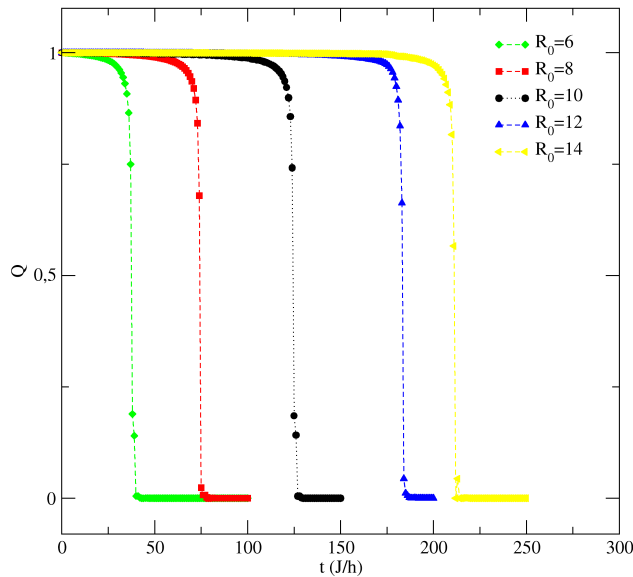
Figura 11 – Evolução do skyrmion $2CS$ na rede FM indicando a rotação dos merons em relação ao centro do skyrmion. As cores indicam a intensidade da componente z do spin.

Além do tempo de colapso t_c do skyrmion $2CS$ depender do tamanho da rede, ele também depende de seu tamanho inicial R_0 . Isso já era esperado, uma vez que merons mais separados demoram mais tempo para se encontrarem no núcleo. Portanto, quanto maior for o tamanho do skyrmion, maior é seu tempo de colapso. Para investigar de forma mais detalhada a relação entre t_c e R_0 , fixamos o comprimento da rede em $L = 1000$ e performamos simulações para vários tamanhos iniciais R_0 da textura. Os resultados obtidos para o tamanho $R(t)$ e para a carga topológica $Q(t)$ são sintetizados nos gráficos da Fig. (12) a seguir. Observe que para todos os valores de R_0 a carga topológica Q permanece constante até o colapso enquanto R varia continuamente a zero.

Através da variação de R_0 com t , estimamos como o tempo de colapso t_c do skyrmion escala com o tamanho inicial R_0 . Assim, para os cinco tamanhos de skyrmions simulados, indicamos na inserção do gráfico (12)(a) os valores de t_c , correspondente ao tempo em que a carga topológica vai a zero, em função de R_0 . Observamos que na escala



(a)



(b)

Figura 12 – (a) Tamanho do skyrmion $R(t)$ em função do tempo de simulação t para diferentes tamanhos iniciais R_0 . No gráfico em inserção indicamos em escala log-log o tempo de colapso t_c da estrutura em função do seu tamanho inicial R_0 . (b) Evolução da carga topológica $Q(t)$ como função do tempo de simulação t para diferentes tamanhos iniciais R_0 .

log-log, a relação entre essas grandezas é aproximadamente linear. Isso indica que podemos estimar t_c como uma lei de potência da forma $t_c \propto R_0^\alpha$ com $\alpha > 0$. Assim, realizando um ajuste linear, obtemos para o coeficiente α o valor de 2.25. Esse valor é muito próximo do obtido em [44] para o skyrmion de um núcleo na rede antiferromagnética. Isso sugere que skyrmions $1CS$ e $2CS$ possuem comportamentos similares. De fato, embora esses dois tipos de textura não sejam topologicamente distintos, as propriedades do material,

como por exemplo, suas anisotropias, podem favorecer a estabilização de uma estrutura em detrimento da outra. Por fim, salientamos que, para o caso ferromagnético, o valor do coeficiente α é aproximadamente 5 (segundo [44]), portanto muito maior que na rede *AFM*. Isso significa que para um mesmo tamanho R_0 , o tempo de vida do skyrmion na rede *FM* é cerca de três ordens de grandeza superior que na rede *AFM*.

3.3 REDE COM IMPUREZAS

Em adicional ao efeito da discretização na estabilidade e na dinâmica do skyrmion, é também útil verificar como essa textura se comporta na presença de impurezas não magnéticas. De fato, muitos estudos mostram que vacâncias afetam a dinâmica de sólitons, especialmente de skyrmions *1CS* [5, 25] e também de vórtices no modelo *XY* [45, 46]. A interação skyrmion-vacância pode ser útil na manipulação desses objetos, abrindo novas possibilidades para aplicações tecnológicas. Então, consideramos em nosso sistema uma configuração de skyrmion *2CS* com tamanho inicial $R_0 = 10$ localizado na origem da rede (0,0) e uma vacância de spin localizada no sítio (12,10). A simulação foi performada numa rede de tamanho $L = 1000$. A evolução temporal da estrutura está indicada na Fig. (13) até o tempo de $t = 130\hbar/J$.

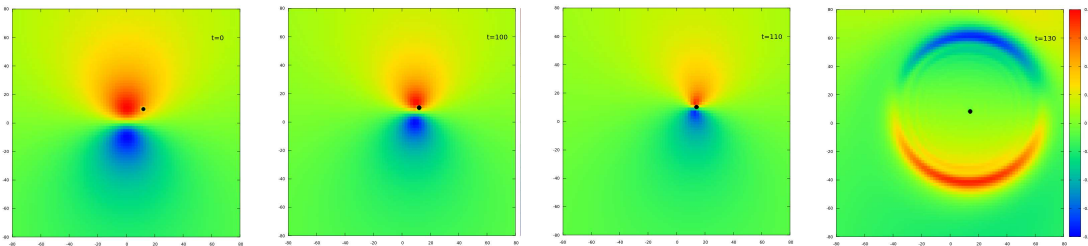


Figura 13 – Evolução temporal do skyrmion na rede *AFM* com uma impureza magnética localizada no sítio $(12a,10a)$. As cores indicam a intensidade da componente z do spin na subrede *A*. O círculo preto corresponde a localização da vacância de spin.

Como podemos ver na Fig. (13), o centro do skyrmion não é mais estático e, sim, vai em direção à impureza, ou seja, o skyrmion como um todo é atraído pelo defeito da rede. Durante esse processo, a vacância de spin não deforma os dois merons, apenas os atraiem. Um comportamento similar foi encontrado por Pereira *et al.* [47] no contexto de vórtices planares no modelo *XY*. Neste trabalho os autores encontraram tanto por simulações de Monte Carlo, quanto por cálculos analíticos que vórtices individuais planares são atraídos e aprisionados por impurezas não magnéticas, estes trabalhando como potencial atrativo

para os vórtices. Isso ocorre porque a interação de troca entre os spins é maior no centro do vórtice do que na sua periferia. Então, para minimizar a energia, é melhor que o centro do vórtice esteja localizado na vacância de spin. Eles também obtiveram que a estrutura do vórtice não muda apreciavelmente com a presença da impureza. No entanto, no caso do skyrmion temos encontrado uma importante diferença. Quando seu centro atinge a impureza, a sua estrutura colapsa em ondas de spin. Portanto, o tempo de vida da textura reduz consideravelmente. É importante pontuar que, à medida que o skyrmion é atraído, seu tamanho R vai reduzindo com o tempo devido aos efeitos de discretização, como previamente mencionado. Por fim, observamos que em distância superiores a $d = 2R$, o centro de massa da estrutura não move apreciavelmente, indicando uma fraca interação skyrmion-vacância.

3.4 SKYRMION 2CS EM UM CAMPO MAGNÉTICO

Nós também investigamos o skyrmion $2CS$ na presença de um campo magnético externo. Uma vez que essa textura não é cilindricamente simétrica, dois casos serão analisados, a saber: a) o campo é aplicado perpendicularmente à linha que une os dois merons; b) o campo é aplicado paralelamente à linha que une os dois merons. Em ambos os casos a dinâmica do skyrmion é fortemente afetada. Primeiro, nós apresentamos o caso a). Um campo magnético constante é aplicado ao longo da direção \hat{x} , isto é, alinhado com os spins da borda. Basicamente, o efeito desse campo é induzir uma rotação dos núcleos do skyrmion ao redor de seu centro de massa, com uma frequência definida $w \propto B_x$. Nesse processo, o centro do skyrmion não move. Além disso, o campo não afeta o tempo de vida da estrutura, a qual colapsa em um tempo t_c igual ao caso prévio, sem o campo.

Em contrapartida, aplicando um campo magnético ao longo da direção \hat{y} , (caso b)) nós observamos um comportamento mais interessante. Inicialmente, os núcleos do skyrmion estão localizados em $(0, -10)$ e $(0,10)$. Após aplicar um campo magnético, os spins começam a precessar ao redor do campo de modo que a estrutura é continuamente deformada em um skyrmion $1CS$. Como os spins permanecem precessando, o $1CS$ é continuamente transformado em $2CS$ e esse processo se repete periodicamente com uma frequência $\omega \propto B_y$ até se dar o colapso da estrutura.

A Fig. (14) indica a componente z do spin (pertencente à sub-rede A) como função da posição ao longo de y (mantendo $x = 0$) para dois diferentes instantes, nomeadamente,

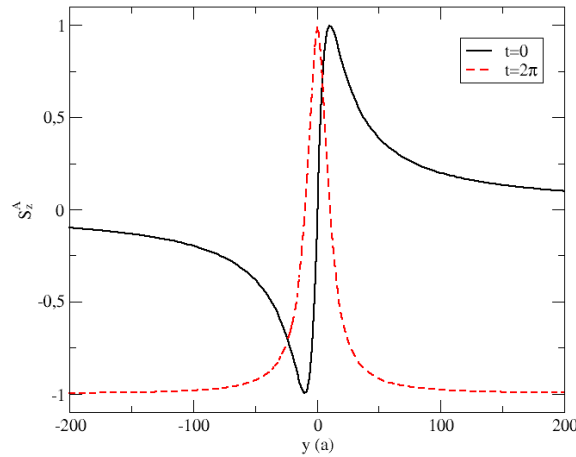


Figura 14 – Componente z do spin S_{z_A} em função da posição ao longo do eixo y (mantendo $x = 0$) por dois instantes diferentes de tempo ($t = 0$ e $t = 2\pi$).

$t = 0\hbar/J$ e $t = 2\pi\hbar/J$. Em $t = 0\hbar/J$ (linha preta), os dois picos no gráfico correspondem aos dois núcleos do skyrmion $2CS$. Com o tempo evoluindo, a sua configuração muda de tal forma que em $t = 2\pi\hbar/J$ esses picos tornam-se somente um (e os spins na borda do sistema passam a apontar na direção z). Esse é exatamente o skyrmion com somente um núcleo ($1CS$). Assim, a configuração $1CS$ torna-se $2CS$ e vice-versa em um processo cíclico. Topologicamente, isso é possível, pois, como já dito, essas estruturas pertencem a um mesmo setor topológico. Esse processo também está representado na Fig. (15) com a componente z do spin indicada por cores.

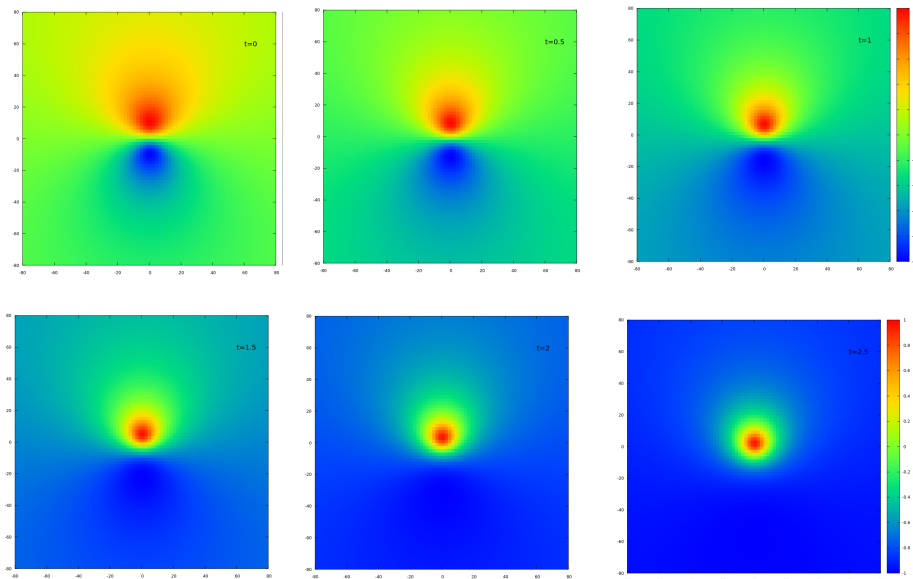


Figura 15 – Componente z do spin S_{z_A} em função da posição ao longo do eixo y (mantendo $x = 0$) por dois instantes diferentes de tempo ($t = 0$ e $t = 2\pi$).

Ressalta-se que algo similar a essa transformação foi recentemente observado por

Yu et al. em magnetos quirais que exibem uma anisotropia planar ($Co_8Zn_9Mn_3$) [24]. Nesse composto, uma rede bidimensional de merons e anti-merons emerge à baixas temperaturas de um estado de hélice. Com aplicação de um campo magnético, esse estado transforma-se em uma rede hexagonal de skyrmions $1CS$.

PARTE II

**O FERROMAGNETO DE HEISENBERG BIDIMENSIONAL COM INTERAÇÃO
DIPOLAR**

4 O HEISENBERG DIPOLAR

Dedicamos esse capítulo à apresentação do modelo de Heisenberg dipolar e alguns aspectos referentes à transição de fase nesse modelo. Também discutimos algumas características das interações de longo alcance, em especial a interação dipolar, e sua importância em sistemas de matéria condensada.

4.1 INTRODUÇÃO

Interações de longo alcance desempenham um papel importante no modelamento de diversos sistemas físicos. A força gravitacional, por exemplo, importante na formação das estruturas do Universo, é uma interação de longo alcance. Em escalas microscópicas, especialmente em sistemas de matéria condensada, interações de longo alcance como a força eletrostática, van der Waals, dipolar, etc, aparecem conectados, por exemplo, a problemas referentes à transição de fase em sistemas de matéria condensada [48], aos efeitos Casimir [49], Kondo [50], entre outros. Em sistemas magnéticos, como o Spin Ice, a interação dipolar é a principal responsável pelas propriedades exóticas exibidas por esses sistemas [51].

No entanto, a interação dipolar, geralmente por ser muito menor que a interação de troca (curto alcance), é, por vezes, desconsiderada na maioria dos modelos que descrevem sistemas magnéticos. No entanto, tem ficado claro na literatura que ela desempenha um papel importante nas propriedades de muitos sistemas, sobretudo em filmes finos magnéticos. Assim, o interesse em sistemas dipolares tem sido renovado nos últimos anos. A seguir, citamos alguns exemplos que ilustram a relevância dessa interação em alguns sistemas magnéticos: 1- Ocorrência da transição de reorientação [52]: experimentalmente observa-se que filmes finos de ferro (Fe) depositados sobre cobre (Cu) apresentam uma fase de baixas temperaturas onde todos os spins encontram-se alinhados perpendicularmente ao plano do filme. Aumentando-se a temperatura, o sistema sofre uma transição para uma fase onde os spins estão alinhados paralelamente ao plano. Essa transição, designada de transição de reorientação, é devida à interação dipolar que compete com a interação de troca e com uma anisotropia de eixo fácil. 2- Sistemas de Spin Ice: nesses materiais, a interação de troca é desprezível, de modo que as propriedades do sistema são

inteiramente descritas pela interação dipolar. Esses materiais possuem grande interesse tecnológico devido as suas excitações de mais baixa energia se comportarem como monopolos magnéticos [53]. 3- Emergência de texturas complexas de spin: estabilização em alguns materiais de texturas complexas de spins como as bolhas magnéticas [54] e stripes (isto é, fase laminar e modulada de spins), devido à interação dipolar.

Assim, dessa listagem não exaustiva, concluímos que, juntamente com termos de curto alcance, a interação dipolar leva a fenômenos interessantes e a diagramas de fases complexos em sistemas magnéticos. O interesse transcende o campo acadêmico com a possibilidade da utilização desses modelos para o desenvolvimento de novos dispositivos de memória [6].

Portanto, nesse trabalho estudaremos o modelo de Heisenberg $2D$ ferromagnético ($J > 0$) levando em consideração a interação dipolar entre os spins. Conforme mostraremos adiante, apesar de estudos teóricos e experimentais concordarem que esse sistema exiba uma fase ferromagnética planar a baixas temperaturas, aspectos referentes ao seu comportamento crítico ainda não foram totalmente elucidados.

4.2 INTERAÇÕES DE LONGO ALCANCE VS. CURTO ALCANCE

Antes de introduzirmos o modelo de Heisenberg dipolar, cabe fazer aqui uma rápida discussão sobre alguns aspectos envolvendo interações de curto e de longo alcance. Em primeiro lugar, na teoria de fenômenos críticos, define-se de forma rigorosa interações de longo alcance com base no comportamento dos seus momentos m_n definidos como [55]:

$$m_n = \int V(\vec{r}) r^n d^D r, \quad (13)$$

onde $V(\vec{r})$ é o potencial de interação. Assim, dadas duas partículas separadas por uma distância r em uma rede D dimensional, dizemos que a interação entre elas é de longo alcance caso para algum n suficientemente alto, m_n diverja [56]. Portanto, interações que decaem como lei de potência, isto é, r^{-p} com $p \geq 0$ são de longo alcance enquanto interações exponenciais e^{-r/r_0} são de curto alcance. Para além disso, dado o potencial de interação da forma $V(\vec{r}) = 1/r^{d+\sigma}$ admite-se uma subdivisão das interações de longo alcance em [57, 58]:

- **Forte:** quando $-d \leq \sigma \leq 0$

- **Fraca:** quando $0 < \sigma \leq \sigma_c(d)$

onde $\sigma_c(d) = 2$ para $d \geq 4$ e $\sigma_c(d) = d/2$ para $d < 4$. Para $\sigma > 2$ o caráter de longo alcance da interação não interfere nos valores dos expoentes críticos, de modo que estes exibem seus valores de curto alcance [56].

Enquanto sistemas com interações fracas seguem a estatística padrão de Boltzmann-Gibbs (BG) baseada na extensividade (aditividade) dos potenciais termodinâmicos (entropia, energia livre, energia interna, etc), o mesmo não é válido para sistemas com interações de longo alcance fortes [58]. Nesses sistemas, os potenciais termodinâmicos deixam de ser aditivos. Assim, por exemplo, a entropia do sistema composto não é mais igual à soma da entropia de suas partes. Com efeito, a estatística *BG* pode não ser válida. Portanto, esses sistemas devem ser abordados numa perspectiva da termodinâmica não extensiva, como na estatística generalizada de Tsallis [59]. Além disso, para que o limite termodinâmico seja bem definido, o sistema deve apresentar uma energia livre por partícula finita, ou seja, a energia livre F_N deve ser assintoticamente proporcional ao número de partículas N . No entanto, em sistemas cujas interações decaem muito lentamente com a distância, F_N cresce com potências superiores de N , implicando uma divergência de F_N/N , ou seja, o limite termodinâmico é indefinido [59].

No caso particular dos sistemas dipolares bidimensionais (foco desse trabalho), a interação entre spins é proporcional a $1/r^3$, ou seja, $d = 2$ e $\sigma = 1$ de modo que a interação é classificada como fraca. Por conseguinte, o sistema é extensivo e a estatística *BG* usual pode ser empregada. A mesma não é válida para sistemas dipolares em $d = 3$ dimensões ($\sigma = 0$).

4.3 DESCRIÇÃO DO MODELO

Conforme mencionado anteriormente, o modelo de Heisenberg isotrópico $2D$ não apresenta ordem de longo alcance (*OLA*) em qualquer temperatura finita T . Isso se deve à divergência das amplitudes das ondas de spins (teorema de Mermin-Wagner) que destroem a ordem magnética [27]. No entanto, *OLA* pode ser estabilizada quando consideramos a interação dipolar. De fato, mesmo sendo fraca, sua característica anisotrópica e de longo alcance quebra a invariância rotacional da interação de troca. Com efeito, o espectro das excitações é modificado, tornando as flutuações finitas, e conseqüentemente, estabilizando

ordem de longo alcance. De fato, numa abordagem de ondas de spins, considerando $J \ll D$ (D é a constante da interação dipolar) e para um suficiente pequeno vetor de onda \vec{k} , a energia das ondas de spins tem a forma não usual $\varepsilon(\vec{k}) \approx 2\pi D |\sin \phi(\vec{k})| \sqrt{2ak}$, isto é, proporcional a $k^{1/2}$ (em contraposição ao caso da interação de troca puro onde $\varepsilon(\vec{k}) \sim k^2$) [6]. Isso leva a flutuações pequenas em torno da magnetização de saturação em uma ampla variedade de temperaturas implicando ordem de longo alcance em $T \neq 0$, conforme mostrado rigorosamente por Maleev (1976) [6, 26]. Portanto, conclui-se que, mesmo inferior à interação de troca, o termo dipolar desempenha um papel importante nos espectros de excitações do sistema, por conseguinte, tal não deve ser negligenciado no estudo de sistemas magnéticos.

Desse modo, considerando a interação entre os momentos dos dipolos dos spins na Hamiltoniana de Heisenberg Eq.(1), definimos a seguir o modelo Heisenberg dipolar bidimensional ($Hd2D$) que estudaremos nesse trabalho:

$$H_d = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j + D \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right) \quad (14)$$

onde \vec{S} é um vetor de três componentes representando o spin de Heisenberg clássico e $\vec{r}_{i,j}$ é o vetor posição conectando o sítio i ao j . O parâmetro J é a constante de interação de troca, restrita somente aos primeiros vizinhos. Como estamos interessados num sistema ferromagnético, limitamos aqui ao caso $J > 0$. Já o parâmetro $D > 0$ é a constante de interação dipolar, proporcional aos momentos de dipolo μ_i de cada átomo. Enquanto o primeiro somatório é restrito aos primeiros vizinhos de cada spin, o segundo deve ser realizado sobre todas as partículas do sistema e suas infinitas imagens periódicas.

Importante notar que a parte dipolar da Eq.(14) apresenta termos ferromagnéticos e termos antiferromagnéticos. Portanto, qualquer arranjo de spins é incapaz de satisfazer por completo as interações, ou seja, o sistema é inerentemente frustrado. Isso leva a uma sensibilidade do sistema quanto ao seu arranjo espacial de modo que geometrias distintas apresentarão diferentes ordens magnéticas e comportamento crítico distintos [60, 61].

Ao passo que a interação de troca (com $J > 0$) em Eq. (14) favorece um alinhamento paralelo dos spins (fase ferromagnética), a interação dipolar favorece uma fase antiferromagnética [6]. Caso a interação de troca seja suficientemente forte para superar os efeitos da interação dipolar, o estado fundamental do modelo será ferromagnético (FM), do contrário, será antiferromagnético (AF). Além disso, podemos verificar diretamente

que o termo dipolar na Eq.(14) leva a uma quebra da simetria entre as componentes de spins no plano e fora do plano. Conseqüentemente, tanto para a fase *FM* quanto para a fase *AF*, a energia será menor para um arranjo planar dos spins. Na tabela a seguir, adaptada da referência [6], trazemos a energia dipolar (por spin) de diferentes configurações de spins, numa rede quadrada. De fato, as fases planares estão associadas às menores energias.

Sistema	Configuração de Spin	Energia dipolar
FM planar	$S_x = 1$	$E = -2.2584D$
	$S_y = 0$	
	$S_z = 0$	
AF planar	$S_x = (-1)^i$	$E = -2.5495D$
	$S_y = 0$	
	$S_z = 0$	
FM uniaxial	$S_x = 0$	$E = 4.5168D$
	$S_y = 0$	
	$S_z = 1$	
AF uniaxial	$S_x = 0$	$E = -0.4678D$
	$S_y = 0$	
	$S_z = (-1)^i$	

Tabela 1 – Energia dipolar por spin de diferentes configurações de spins, em uma rede quadrada. Tabela adaptada de [6].

Portanto, conforme está claro na tabela, espera-se que as fases planares, de menor energia, sejam favorecidas pela interação dipolar em detrimento às fases uniaxiais. A respeito de qual fase, FM ou AF, será estabilizada, isso dependerá dos valores relativos de J e D . De maneira grosseira, podemos estimar que para valores de $D < 2J/(-2.2584 + 2.5495) \approx 6.87J$ a estabilidade da fase *FM* é superior ao da fase *AF*. Discutiremos cada uma dessas fases a seguir.

4.3.1 Fase planar antiferromagnética *pAF*

No limite $D \gg J$ (aproximação de dipolos puros), a interação dipolar domina sob a interação de troca e em $T = 0$ a fase estabilizada (estado fundamental) é a antiferromagnética planar *pAF*, mostrada na Fig. 16(a). Esse estado é continuamente degenerado sob uma rotação global dos dipolos em direções opostas à rotação de seus vizinhos, conforme mostrado na Fig. 16(b) [61]. O modelo de dipolos puros foi investigado por Corruccini e White [62] no contexto da teoria linear das ondas de spins. Seguindo essa abordagem, os autores demonstraram que esse sistema não apresentava ordem de longo alcance (*OLA*). No entanto, este problema foi revisitado por outros autores, indicando que correções de

ordens superiores na teoria devem levar a uma estabilização da *OLA* [6, 63, 64].

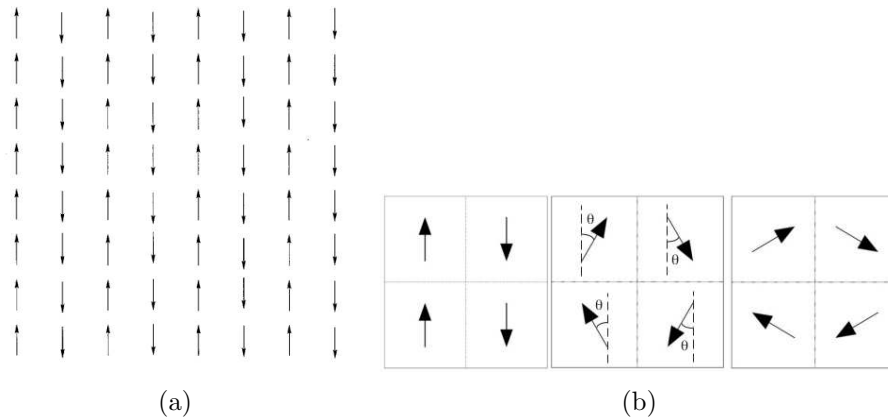


Figura 16 – Em (a): estado fundamental de uma rede de dipolos puros. Em (b): rotação global dos spins gerando outros possíveis estados fundamentais. Figuras extraídas de [6].

De fato, a anisotropia da interação dipolar parece desempenhar um papel crucial nas excitações do modelo de dipolos puros. Assim, apesar de o estado fundamental ser continuamente degenerado sob uma rotação global de todos os spins, as flutuações térmicas removem essa degenerescência e ordem antiferromagnética emerge a baixas temperaturas [61]. Os primeiros autores a demonstrarem esse fato foi Prakash e Henley [7], numa versão de curto alcance para interação dipolar (preservando o caráter anisotrópico da interação). Em um dado sítio da rede o estado fundamental *pAF* do sistema apresenta spins nas direções $\phi, -\phi, \pi + \phi, \pi - \phi$. Usando métodos aproximativos, os autores demonstraram que os efeitos térmicos produzem termos na energia livre que favorecem estados particulares na rede quadrada de dipolos, por exemplo, os estados $\phi = 0$ ou $\phi = \pi/2$, reduzindo a degenerescência contínua a uma simetria discreta quadrupolar (fourfold). Eles designaram o fenômeno de ordem magnética induzida termicamente [7]. Mais tarde, Bell et al. [63], baseado nos trabalhos de Prakash e levando em consideração a natureza de longo alcance da interação, demonstraram a existência de uma fase antiferromagnética em temperaturas finitas para a rede de dipolos.

Dado que o sistema é ordenado a baixas temperaturas, uma transição de fase para um estado paramagnético ocorre em uma temperatura crítica T_c . Devido à anisotropia da interação dipolar induzida termicamente, acredita-se que essa transição pertença à mesma classe de universalidade do modelo *XY* com campo cristalino quadrupolar $H_4 = -h_4 \sum (\sqrt{s_x^4 + s_y^4})$ (modelo *XYh4*) [8, 61]. Esse modelo apresenta um comportamento crítico convencional, com singularidades do tipo leis de potências nas quantidades termodinâmicas, mas com expoentes críticos não usuais. Além disso, o modelo é conhe-

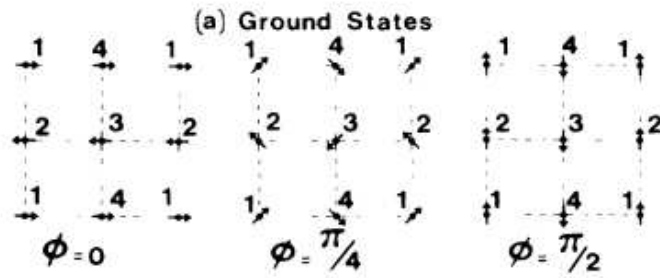


Figura 17 – Alguns dos estados fundamentais possíveis para uma rede quadrada de dipolos. Efeitos térmicos destroem a degenerescência contínua, selecionando estados com $\phi = 0$ ou $\phi = \pi/2$ em detrimento dos demais. Figura extraída de [7].

cido por apresentar expoentes não universais, ou seja, eles dependem da força efetiva do campo anisotrópico h_4 [8, 65]. Na referência [66] os autores estimaram para um sistema de dipolos planos um valor de $h_4 \approx 0.5$ para a anisotropia efetiva induzida termicamente. De fato, como notado por Bell et al. na referência [63] e também por F. Fernández e J. Alonso em [61], o modelo planar de dipolos puros e o modelo XYh_4 guardam muitas semelhanças, indicando o papel chave da anisotropia quadripolar no comportamento crítico do sistema.

4.3.2 Fase planar ferromagnética pFM

Embora existam sistemas que possam se comportar como dipolares puros (por exemplo o Spin Ice [51, 67]), a maioria dos sistemas magnéticos apresenta uma fraca interação dipolar comparado à intensidade da interação de troca. Assim, nesse trabalho, estamos interessados na região $D < J$, onde julgamos que a Hamiltoniana (14) providencia um modelo mais realístico para filmes finos magnéticos. Como mencionado anteriormente, apesar de pequena, a interação dipolar é responsável pela estabilização de uma fase ferromagnética planar pFM em sistemas descritos pelo modelo Hd_2D . A fase pFM é mostrada na Fig. 18 a seguir. Aqui, o estado fundamental é também degenerado sob uma rotação global dos spins.

Embora a estabilização de uma fase ferromagnética planar seja fato estabelecido tanto teoricamente quanto experimentalmente, a natureza da transição ainda é controversa. Mol e Costa realizaram extensivos estudos via simulação de Monte Carlo em vários modelos dipolares incluindo o Rotor Planar (dRP) e o Heisenberg anisotrópico (AHd) [10, 29]. De acordo com os autores, seus resultados corroboram a existência de

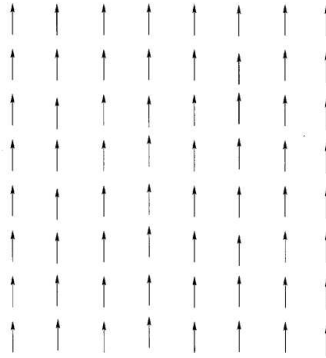


Figura 18 – Fase ferromagnética planar pFM em sistemas descritos pelo modelo $Hd2D$.

uma nova classe de universalidade, caracterizada por um calor específico não divergente e expoentes críticos não usuais [10]. Além disso, eles obtiveram que a magnetização e comprimento de correlação apresentam um comportamento do tipo leis de potência na região crítica. A tabela abaixo, extraída de [10], sumariza os resultados obtidos pelos autores.

Modelo	ν	γ	β	α
AHd	1.22(3)	2.15(5)	0.18(1)	-0.44(18)
AHd(bilayer)	1.22(9)	2.1(2)	0.18(5)	-0.55(15)
dPR	1.277(2)	2.218(5)	0.2065(4)	-1.1(1)
dPR(Maier)	-	1	1/2	-2

Tabela 2 – Expoentes críticos para alguns modelos dipolares obtidos via Método de Monte Carlo. Na última linha encontram-se os resultados teóricos de Maier e Schwabl [9] utilizando grupo de renormalização. Tabela extraída de [10].

No entanto, os resultados de Mol e Costa divergem consideravelmente dos resultados de Maier e Schwabl [9]. Usando técnicas de grupo de renormalização, esses autores obtiveram um diagrama de fluxo muito semelhante ao que se encontra para o modelo XY , com o comprimento de correlação e magnetização decaindo exponencialmente, semelhante ao que ocorre na transição do tipo Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) [30]. Entretanto, os autores apontam que, ao contrário do BKT , aqui, a transição é causada pela excitação da onda de spin e não pela desvinculação do par de vórtices-anti-vórtices. Além disso, um conjunto diferente de expoentes críticos foram obtidos por eles. Portanto, os resultados numéricos não concordam com os resultados de renormalização, indicando que o comportamento crítico de sistemas dipolares em rede quadrada ainda é considerado um problema em aberto [8]. Menciona-se aqui, ainda, o trabalho de Rapini et al. [68] que propõem uma transição do tipo BKT para estes sistemas. No entanto, conforme pontuado em [29], acredita-se que esse não é o caso, visto que, diferentemente do modelo XY , nos modelos dipolares, ordem de longo alcance é estabilizada [26]. Esse resultado equivocado

pode ter origem na adoção, pelos autores, de um raio de corte para a interação dipolar [29].

4.4 OBJETIVOS

Portanto, para trazer alguma luz sobre as questões mencionadas acima, realizamos extensas simulações de Monte Carlo no modelo de Heisenberg dipolar $2D$, na rede quadrada, com ênfase na sua região crítica. Esse modelo é pouco estudado na literatura, pois, como a interação dipolar possui uma anisotropia planar, acredita-se que efetivamente ele seja descrito pelo XY dipolar [9, 29]. No entanto, essa inferência pode não ser verdadeira. De fato, no contexto dos sistemas dipolares puros, Tomita [31] obteve para o Heisenberg dipolar, expoentes críticos distintos daqueles do XY dipolar, ou seja, apesar dos dois modelos apresentarem a mesma quebra espontânea de simetria, eles não compartilham os mesmos expoentes críticos. Assim, é interessante verificar se algo semelhante pode acontecer nos modelos dipolares com interação de troca. Portanto, este trabalho traz como principais objetivos:

1. Realizar extensas simulações de Monte Carlo no modelo Heisenberg dipolar bidimensional ($Hd2D$), buscando estimar seus expoentes críticos e compará-los com modelos semelhantes na literatura, principalmente o XY dipolar.
2. Sumarizar e discutir os principais resultados da literatura referente à transição de fase em sistemas dipolares de spins contínuos.

Neste estudo, o algoritmo de Metropolis foi empregado em associação com o método de repesagem de histogramas (ambos discutidos no próximo capítulo). Para evitar erros devido à introdução de raios de corte, utilizamos a soma de Ewald [69–71], um eficiente método para calcular a energia de sistemas de longo alcance. Salienta-se que o emprego de cortes nas interações já se mostrou bastante inapropriado, gerando erros significativos em vários observáveis físicos [72, 73].

5 MÉTODOS DE SIMULAÇÃO

Neste capítulo apresentamos de forma resumida aspectos básicos relacionados à simulação de Monte Carlo no contexto do Heisenberg dipolar, bem como do tratamento estatístico adequado das séries temporais geradas na simulação. Também apresentamos a soma de Ewald, uma técnica eficiente para computar a energia de sistemas de longo alcance. Por fim, introduzimos a análise de escala de tamanho finito, técnica amplamente utilizada em simulações para caracterização de transições de fase.

5.1 O MÉTODO DE MONTE CARLO

O formalismo da mecânica estatística é elegante na medida em que, a partir da função de partição, podemos derivar todas as suas propriedades macroscópicas de um sistema. Assim, considerando um sistema em equilíbrio termodinâmico com um reservatório térmico a uma temperatura T , a probabilidade de encontrá-lo em um dado estado microscópico μ é proporcional a $e^{-\beta E_\mu}$, onde E_μ é a energia do estado e $\beta = 1/k_B T$ (k_B a constante de Boltzmann) [74]. Já o valor médio de um observável A_μ é dado por:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} A_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \quad (15)$$

onde definimos

$$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \quad (16)$$

como a função de partição do sistema.

Entretanto, como a maioria dos modelos em física da matéria condensada envolve, além da interação entre as partículas, um grande número de graus de liberdade, geralmente não é possível encontrar uma expressão analítica para a função de partição. Poucas são as exceções, como o modelo de Ising $2D$, resolvido analiticamente por Onsager (1944) [75]. Assim, métodos aproximativos são requeridos, como as simulações computacionais.

Um dos métodos numéricos mais empregados para obter estimativas adequadas para as propriedades macroscópicas de um sistema é a simulação de Monte Carlo [76–79]. O princípio do método baseia-se na geração de um subconjunto de configurações, escolhidas por meio de um algoritmo aleatório, usando uma distribuição de probabilidade

p_μ . Esse subconjunto constitui a amostragem, a partir da qual as grandezas relevantes do problema são calculadas como médias estatísticas [77]. Assim, se um dado estado μ é gerado com probabilidade p_μ , a equação (15) toma a forma [80]:

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{\{\mu\}} A_\mu e^{-\beta E_\mu} p_\mu^{-1}}{\sum_{\{\mu\}} e^{-\beta E_\mu} p_\mu^{-1}} \quad (17)$$

onde $\{\mu\}$ é o conjunto de configurações amostradas.

A questão está, portanto, em como escolher a probabilidade p_μ para cada estado. Uma simples escolha consiste em amostrar todos os estados com igual probabilidade, ou seja, realizar uma amostragem homogênea do espaço de configurações. No entanto, isso não é adequado. Vejamos o porquê. Tomando como exemplo o modelo de Ising bidimensional em uma rede de dimensão linear $L = 20$, temos $N = 400$ spins. Como cada spin pode ter um valor de $+1$ ou -1 , temos o total de $2^{400} \approx 2,58 \times 10^{120}$ configurações possíveis [77]. Portanto, extrair desse número um conjunto representativo do sistema, ainda resultaria num número gigantesco de configurações. Por outro lado, atento ao fato de que numa dada temperatura, somente alguns estados irão contribuir significativamente para o cálculo das médias, podemos realizar uma amostragem de importância (importance sampling), que consiste em selecionar as regiões do espaço de configurações de onde vem as contribuições mais importantes para o cálculo das médias. Um procedimento que permite realizar tal amostragem é o algoritmo de Metropolis, que foi introduzido por Nicolas Metropolis e seus colaboradores no contexto de simulações de gases rígidos [77].

5.2 ALGORITMO DE METROPOLIS

Neste método, construímos uma cadeia de Markov, onde cada configuração x_{l+1} é obtida da configuração anterior x_l a partir de uma função de transição adequada $W_{(l \rightarrow l+1)}$. O comportamento no tempo desse processo estocástico é descrito pela seguinte equação Mestra [76]:

$$\frac{\partial P_l(t)}{\partial t} = -\left[\sum_{l \neq m} P_l(t) W_{(l \rightarrow m)} - P_m(t) W_{(m \rightarrow l)} \right], \quad (18)$$

onde $P_l(t)$ é a probabilidade de o sistema se encontrar no estado l no instante t . No equilíbrio, temos que $\partial P_l(t)/\partial t = 0$, ou seja, os dois termos do lado direito de Eq.(18)

devem ser iguais. A expressão resultante é conhecida como condição de balanço detalhado [80]:

$$P_l(t)w_{(l \rightarrow m)} = P_m(t)w_{(m \rightarrow l)}. \quad (19)$$

Na estatística de Boltzmann, temos que $P_n(t) = e^{-\beta E_n}/Z$ e, portanto, dada a condição de balanço detalhado (19), a função de transição deve satisfazer:

$$\frac{W_{l \rightarrow m}}{W_{m \rightarrow l}} = e^{-\beta(E_m - E_l)} \quad (20)$$

Como essa condição só fixa a taxa de $W_{l \rightarrow m}$, temos uma liberdade na escolha da função de transição, desde que esta obedeça o balanço detalhado [80]. O algoritmo de Metropolis consiste na escolha da seguinte função de transição [77]:

$$W_{(l \rightarrow l+1)} = \min \left[1, \exp \left(-\frac{\Delta E}{k_B T} \right) \right], \quad (21)$$

ou seja:

$$W_{(l \rightarrow l+1)} = \begin{cases} e^{-\Delta E/k_B T} & \text{se } \Delta E > 0 \\ 1 & \text{se } \Delta E < 0. \end{cases} \quad (22)$$

Assim, dada a rede de spins, uma nova configuração do sistema é obtida a partir da anterior por uma mudança na orientação do spin. Caso a energia do sistema diminua, aceitamos essa mudança com probabilidade igual a 1. No entanto, também aceitamos mudanças que aumentem a energia do sistema, mas com uma probabilidade baixa, dada pelo fator de Boltzmann.

Por conseguinte, substituindo p_μ em (17) pelo peso $e^{-\beta E_\mu}$, resulta:

$$A_\mu \approx \frac{\sum_{\{\mu\}} A_\mu}{\sum_{\{\mu\}} 1} = \frac{1}{X} \sum_{\{\mu\}} A_\mu \quad (23)$$

onde X é o número de configurações amostradas. Portanto, o problema reduz-se a obter um número X razoável de configurações donde possamos extrair os valores das quantidades termodinâmicas de interesse através de médias aritméticas.

Assim, para a simulação do modelo de Heisenberg dipolar, seguimos os seguintes passos do algoritmo de Metropolis: inicialmente definimos o comprimento L da rede e as

condições de contorno; especificamos também a configuração inicial dos spins. Em seguida, prosseguimos fazendo um varrimento da rede, executando os seguintes passos [77]:

1. Selecionamos um spin aleatório na rede e propomos uma nova orientação para este.
2. Calculamos a variação de energia ΔE associada com essa mudança.
3. Calculamos a função de transição W .
4. Geramos um número aleatório r uniformemente distribuído entre zero e 1.
5. Se $r < W$, aceitamos essa nova configuração, caso contrário, não. Em qualquer dos casos, a configuração de spins obtida no fim desse passo é contada como uma nova configuração.
6. Guardamos o resultado da configuração resultante para efeito do cálculo das grandezas desejadas.

A execução dos passos de 1 a 5 para todos os pontos da rede, ou seja, L^2 vezes, encerra um ciclo de Monte Carlo (CMC), que é tomado como uma unidade de tempo computacional. Uma vez que a configuração nova é obtida da anterior imediatamente após a tentativa de inversão de um spin, as duas configurações estão fortemente correlacionadas. Assim, recomenda-se a implementação do passo 6 somente no fim de cada CMC [76].

Também devemos levar em consideração o tempo necessário para que o sistema perca a memória da configuração inicial e atinja o equilíbrio à temperatura escolhida (tempo de relaxação) [76, 78]. Assim, convém rejeitar um número suficiente de CMC antes de guardar a primeira configuração válida.

5.3 TRATAMENTO DOS DADOS

5.3.1 O método de Jackknife

As séries temporais obtidas via método de Metropolis podem estar correlacionadas, o que traz erros sistemáticos nas estimativas das médias termodinâmicas. Desse modo, introduzimos o método de Jackknife, que fornece estimativas menos enviesadas para a média e a variância de sequências correlacionadas [70, 79]. Além disso, o método traz estimativas corretas para as barras de erro dessas quantidades.

Para implementar o método de Jackknife, dividimos os N pontos da série temporal em N_A amostras independentes (bias), contendo n_a pontos cada. Assim, a média e a variância passam a ser definidas como [70]:

$$\bar{x} = \frac{1}{N_A} \sum_{j=1}^{N_A} \bar{x}_j \quad (24)$$

e

$$\bar{\chi}_x = \frac{1}{N_A} \sum_{j=1}^{N_A} \bar{\chi}_j \quad (25)$$

onde

$$\bar{x}_j = \frac{1}{N - n_a} \sum_{k \notin \{j\}} x_k, \quad \bar{x}_j^2 = \frac{1}{N - n_a} \sum_{k \notin \{j\}} x_k^2 \quad e \quad \bar{\chi}_j = \bar{x}_j^2 - \bar{x}_j^2, \quad (26)$$

A notação $k \notin \{j\}$ indica que k percorre toda a sequência com N valores, exceto os n_a pontos que pertencem ao j -ésimo subintervalo. Nesse trabalho, as médias principais são a energia E e a magnetização M calculadas diretamente por Eq.(24), enquanto o calor específico e suscetibilidade estão relacionados com a variância Eq.(25) via $C = \beta^2 \bar{\chi}_E^2 / N$ (calor específico) e $\chi = \beta \bar{\chi}_M^2 / N$ (suscetibilidade), onde $\beta = 1/k_B T$ e N o número de spins do sistema.

As estimativas para as barras de erro são obtidas pela raiz quadrada dos desvios padrão [70]:

$$\sigma_{\bar{x}}^2 = \frac{(N_A - 1)}{N_A} \sum_{j=1}^{N_A} [\bar{x}_j - \bar{x}]^2 \quad (27)$$

e

$$\sigma_{\bar{\chi}}^2 = \frac{(N_A - 1)}{N_A} \sum_{j=1}^{N_A} [\bar{\chi}_j - \bar{\chi}]^2. \quad (28)$$

Importante salientar que os subintervalos na qual dividimos a série temporal devem ser decorrelacionados um do outro. Isso significa que necessitamos saber depois de quantos passos as configurações tornam-se estaticamente independentes. Para isso, definimos uma outra quantidade, designada de tempo de autocorrelação integrada $\tau_{(int)}$ [78].

Assim, dada uma série de n_k configurações, que fornecem os observáveis X_i com $i = 1, 2, \dots, n_k$, definimos sua auto-correlação como [78]:

$$C(i) = \frac{1}{\sigma^2(n_k - 1)} \sum_{s=1}^{n_k-i} (x_s - \bar{x})(x_{s+i} - \bar{x}) \quad (29)$$

em que \bar{x} é a média do observável X , considerando n_k pontos da cadeia e σ^2 sua variância. O tempo de auto-correlação integrado $\tau_{(int)}$ é definido como segue:

$$\tau_{(int)} = \frac{1}{2}C(0) + \sum_{i=1}^{n_k} C(i). \quad (30)$$

O valor $2\tau_{(int)}$ fornece o número médio de passos para que a sequência se torne decorrelacionada.

5.3.2 Repesagem de Histogramas

Uma das dificuldades nas simulações de sistemas com interações de longo alcance é o alto custo computacional. Para efeito de comparação, o tempo requerido para realizar um passo de Monte Carlo em uma rede quadrada dipolar de comprimento L (utilizando a soma de Ewald) é da ordem de L^4 [6], tempo esse muito superior a L^2 , típicos de sistemas com interações localizadas. Além disso, a necessidade de repeti-las para vários valores de temperatura deixa a tarefa ainda mais lenta. Portanto, apresentamos nessa seção um método que reduz consideravelmente esse tempo, possibilitando, através de um pequeno conjunto de simulações, obter estimativas para os observáveis em um intervalo quase “contínuo” de temperatura. Esse método, designado de repesagem de histogramas, foi desenvolvido inicialmente por Ferrenberg e Swendsen [81] e nos permite poupar muito tempo de CPU.

De maneira resumida (ver referências [70, 79, 82] para um maior detalhamento), dada uma série de n medidas de um observável X_k , realizada numa temperatura inversa β_0 e amostrada de acordo com o peso de Metropolis $w_k = e^{-\beta_0 E_k}$, podemos repesar essa série a uma temperatura β usando o peso $w_k = e^{-\beta E_k}$, da seguinte forma:

$$\bar{X}(\beta) = \frac{1}{\bar{Z}(\beta)} \sum_{k=1}^n X_k e^{-(\beta_0 - \beta)E_k}, \quad (31)$$

onde,

$$\bar{Z}(\beta) = \sum_{k=1}^n e^{-(\beta_0 - \beta)E_k}. \quad (32)$$

Podemos, ainda, combinar simulações performadas em diferentes temperaturas β_0^i , para obter uma melhor estimativa para o observável $\bar{X}(\beta)$. A única restrição é que, para minimizar erros numéricos, as temperaturas β_0 devem estar muito próximas umas das outras. Assim, considerando P séries simuladas em diferentes temperaturas $\beta_0^i (i = 1, \dots, P)$, podemos obter uma estimativa válida para $\bar{X}(\beta)$ através da combinação linear ponderada [82]:

$$\bar{X}(\beta) = \frac{\sum_{i=1}^P a_i \bar{X}_i(\beta)}{\sum_{i=1}^P a_i \bar{Z}_i(\beta)} \quad (33)$$

onde $a_i = a_i(\beta) > 0$ são os fatores de peso.

Aqui temos:

$$\bar{X}_i(\beta) = \sum_{k=1}^n X_k e^{-(\beta - \beta_0^i) E_k} \quad (34)$$

e

$$\bar{Z}_i(\beta) = \sum_{k=1}^n e^{-(\beta - \beta_0^i) E_k}. \quad (35)$$

Para simplificar, impomos a condição de normalização [82]:

$$\sum_{i=1}^P c_i = 1, \quad c_i = a_i \bar{Z}_i \quad (36)$$

Portanto, a Eq.(33) simplifica-se:

$$\bar{X}(\beta) = \sum_{i=1}^P c_i \bar{x}_i \quad \text{com} \quad \bar{x} = \bar{X}_i / \bar{Z}_i \quad (37)$$

Os pesos c_i são escolhidos como o inverso da variância estatística $c_i(\beta) \approx 1/\sigma^2[\bar{X}_i(\beta)]$ e os fatores de normalização são fixados pela Eq.(36) [82].

Cabe ressaltar que os argumentos das exponencias em (33) e (34) atingem grandes valores, causando sérios problemas numéricos. Portanto, ao invés de trabalharmos com os termos da equação (36) diretamente, lidamos com seus logaritmos através do método soma de logaritmos, assegurando a não extrapolação dos limites numéricos do computador. A descrição detalhada desse método pode ser encontrada na referência [83].

5.4 A SOMA DE EWALD

Uma outra dificuldade nas simulações de sistemas dipolares está no tratamento correto e eficiente da interação dipolar. Como mencionando anteriormente, esta interação é

de longo alcance e, portanto, a mudança de um spin afeta todos os demais spins do sistema. Ainda mais, como consideramos condições de contorno periódicas (para minimizar efeitos de tamanho finito), cada spin deve interagir não só com todos os outros spins do sistema, mas também com suas infinitas imagens periódicas. Assim, a Hamiltoniana do sistema dipolar (14) deve ser reescrita como [84]:

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \sum_{(i,j)}^N \sum_{\vec{n}=0}' \left(\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{(\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)^3} - 3 \frac{\vec{S}_i \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L) \vec{S}_j \cdot (\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)}{(\vec{r}_{ij} + \vec{n}L)^5} \right) \quad (38)$$

onde o vetor $\vec{n} = L(n_1\hat{e}_1 + n_2\hat{e}_2)$ representa a posição de cada imagem replicada do sistema com n_1 e n_2 sendo números inteiros positivos e negativos. O parâmetro N é o número de spins da rede e o símbolo ' indica que o termo $i = j$ é excluído do somatório quando $\vec{n} = 0$, impedindo a auto-interação.

Entretanto, utilizar diretamente nas simulações a Eq. (38) para o cálculo da energia dipolar não é eficiente. O somatório apresenta uma convergência muito lenta e um grande número de réplicas é requerido. Dessa forma, passamos a introduzir a soma de Ewald, uma poderosa técnica para lidar com a lenta convergência das somas dipolares [6, 70, 84, 85].

A base da soma de Ewald está na separação da interação em uma parte localizada e uma parte de longo alcance. A primeira parte, por ser de curto alcance, possui uma rápida convergência, sendo realizada diretamente no espaço real. Já a parte remanescente, de longo alcance, é realizada no espaço dos momentos (recíproco), onde possui uma convergência mais rápida. A aplicação da técnica leva também ao aparecimento de um termo de auto interação $H_{auto_interac\tilde{a}o}$ e um termo de superfície $H_{superf\acute{i}cie}$ [84]. Desse modo, reescrevemos a Hamiltoniana (38) como:

$$H_{dip} = H_{real} + H_{rec\acute{i}proco} + H_{superf\acute{i}cie} + H_{auto_interac\tilde{a}o} \quad (39)$$

onde,

$$H_{real} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sum_{|\vec{n}|} B(|\vec{r}_{i,j} + \vec{n}L|) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + C(|\vec{r}_{i,j} + \vec{n}L|) [\vec{S}_i \cdot (\vec{r}_{i,j} + \vec{n}L)] [\vec{S}_i \cdot (\vec{r}_{i,j} + \vec{n}L)] \quad (40a)$$

$$H_{recíproco} = \frac{\pi}{L^2} \sum_{i=1}^N h_1(G) F_{//}^*(G) + \frac{\pi}{L^2} \sum_{i=1}^N h_2(G) F_{\perp}(G) F_{\perp}^*(G) \quad (40b)$$

$$H_{superfície} = \frac{2\sqrt{\pi}\alpha}{L^2} \sum_{i,j=1}^N S_i^z S_j^z \quad (40c)$$

$$H_{auto_interacão} = -\frac{2\alpha^3}{3\sqrt{\pi}} N., \quad (40d)$$

com $G = (2\pi/L)(k_1\hat{e}_1 + k_2\hat{e}_2)$, sendo k_1 e k_2 números inteiros positivos e negativos. O parâmetro α é, a princípio, arbitrário, embora o desempenho computacional do algoritmo dependa desse valor. A partir dos testes de convergência que realizamos, apresentado no apêndice A, definimos seu valor igual a 3 em todas as simulações. As funções $B, C, h_1, h_2, F_{//}$ e F_{\perp} são expressas respectivamente por [84]:

$$B(r) = -\frac{erfc(\alpha r)}{r^3} - \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{exp(-\alpha^2 r^2)}{r^2} \quad (41a)$$

$$C(r) = 3\frac{erfc(\alpha r)}{r^5} - \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3}{r^2} + 2\alpha^2 \right) \frac{exp(-\alpha^2 r^2)}{r^2} \quad (41b)$$

$$h_1(\vec{G}) = \frac{erfc(G/2\alpha)}{G} F_{//}(G) \quad (41c)$$

$$h_2(\vec{G}) = \left[\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{G^2}{4\alpha^2}} - G erfc\left(\frac{G}{2\alpha}\right) \right] \quad (41d)$$

$$F_{//}(\vec{G}) = \sum_{|\vec{G}| \neq 0} (\vec{G} \cdot \vec{S}_i) exp(i\vec{G} \cdot r_i) \quad (41e)$$

$$F_{\perp}(\vec{G}) = \sum_{|\vec{G}| \neq 0} S_i^z exp(i\vec{G} \cdot r_i) \quad (41f)$$

onde $erfc$ é a função erro complementar e o símbolo * indica conjugado complexo.

Observando as expressões acima, percebemos que o método de Ewald envolve o cálculo de um grande número de funções. Isso torna o método bastante intensivo do ponto de vista computacional. No entanto, existe uma maneira de otimizar os somatórios, evitando o cálculo dessas funções a cada atualização dos spins. Para isso, basta observarmos que o argumento da maioria dessas funções não depende da configuração de spins, ou seja,

podemos armazenar previamente seus valores em matrizes e acessá-los quando necessário. Uma vez que essas matrizes não necessitam ser atualizadas, o ganho computacional é grande. Para a implementação do método de armazenamento, seguimos a referência [70], com as devidas modificações para sistemas de spins contínuos.

5.5 FINITE SIZE SCALING

Para estimarmos os expoentes críticos do modelo de Heisenberg dipolar a partir das simulações de Monte Carlo, utilizamos a análise de escala de tamanho finito *FFS* (Finite size scaling). Essa técnica permite obter os expoentes analisando como as quantidades termodinâmicas variam com o tamanho L do sistema. Antes de passarmos à descrição da técnica, recordemos da teoria das transições de fase que, na vizinhança do ponto crítico, as quantidades termodinâmicas apresentam singularidades do tipo lei de potências, conforme indicamos a seguir [76]:

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (42a)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (42b)$$

$$c \sim |t|^{-\alpha} \quad (42c)$$

onde t é a temperatura reduzida, definido como $t = (T - T_c)/T_c$. Os símbolos ξ , χ , c representam, respectivamente, o comprimento de correlação, suscetibilidade e calor específico. Já o comportamento do parâmetro de ordem m na região crítica é dado por:

$$|m| = \begin{cases} 0 & \text{se } t < 0 \\ |t|^\beta & \text{se } t > 0 \end{cases}. \quad (43)$$

Assumindo que a função ξ é homogênea próxima à criticidade e que, nesta região, esse é o único comprimento relevante do sistema, podemos derivar todas as propriedades de escala envolvendo as quantidades termodinâmicas [80]. Tomando como exemplo a suscetibilidade χ . Usando (42a) para eliminar t na Eq. (42.b), obtemos:

$$\chi \sim \xi^{\gamma/\nu}. \quad (44)$$

Essa relação é válida tanto para sistemas infinitos quanto para sistemas finitos, desde que o tamanho do sistema L seja muito maior que o comprimento de correlação ξ . Já quando

$L \ll \xi$, temos que:

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu} \quad (45)$$

ou seja, o tamanho do sistema assume o papel de corte para o comprimento de correlação [76].

Baseados nessas duas considerações, escrevemos o seguinte anzatz para a escala da suscetibilidade [80]:

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \chi_0(L/\xi) \quad (46)$$

com

$$\chi_0(x) \begin{cases} = \text{const.} & \text{para } x \ll 1 \\ \sim x^{\gamma/\nu} & \text{para } x \rightarrow 0 \end{cases} . \quad (47)$$

A equação acima contém, de fato, toda a informação que precisamos saber sobre o sistema. No entanto, ainda não é muito útil, uma vez que contém o comprimento de correlação $\xi(t)$ para o sistema infinito, parâmetro esse que não conhecemos. Assim, convenientemente, definimos uma nova função adimensional $\chi^0(x) = x^{-\gamma} \chi_0(x^\nu)$ de modo que [80]:

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \chi^0(L^{1/\nu} t). \quad (48)$$

Essa é a equação base para o comportamento de tamanho finito da suscetibilidade magnética (por spin). Ela nos informa como χ varia com o tamanho L do sistema próximo à temperatura crítica. A função $\chi^0(x)$, por sua vez, é designada de função de escala e possui valor universal, isto é, se nós medirmos $\chi^0(x)$ obteremos o mesmo valor independente do tamanho L do sistema [76].

Podemos derivar relações de escala similares à Eq. (48) para o parâmetro de ordem e calor específico, usando argumentos muito parecidos aos expostos acima. Os resultados são:

$$M = L^{-\beta/\nu} M^0(tL^{1/\nu}) \quad (49a)$$

$$C = L^{\alpha/\nu} C^0(tL^{1/\nu}) \quad (49b)$$

onde M^0 e C^0 são funções de escala da magnetização e do calor específico, respectivamente. Como na temperatura de transição as funções M^0 , χ^0 e C^0 reduzem a meras constantes de proporcionalidades, todas as propriedades termodinâmicas seguem simples lei de potências de L [76],

$$M \propto L^{-\beta/\nu} \quad (50a)$$

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu} \quad (50b)$$

$$C \propto L^{\alpha/\nu}. \quad (50c)$$

Assim, para determinarmos, por exemplo, o expoente γ/ν , plotamos o máximo valor da suscetibilidade χ como função de L numa escala logarítmica. A curva resultante deve ser uma linha reta e sua declividade nos dá uma estimativa para γ/ν . Procedemos de maneira semelhante para obtenção dos demais expoentes.

À parte das quantidades termodinâmicas usuais como a suscetibilidade e o calor específico, definimos outra quantidade designada de cumulante de Binder, simbolizado por U_4 [76, 86]:

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2} \quad (51)$$

Para transições do tipo ordem-desordem, $U_4 \rightarrow 0$ para $T > T_c$ e $U_4 \rightarrow 2/3$ para $T < T_c$. Em sistemas suficientemente grandes, curvas dessa quantidade se cruzam em um mesmo ponto fixo U^* na temperatura crítica T_c . Portanto, essa quantidade providencia uma boa maneira de estimarmos o valor da temperatura de transição.

Apesar dos métodos acima permitirem a determinação das taxas de β/ν , γ/ν , α/ν e também de T_c , ainda é necessário conhecer diretamente o valor do expoente ν para estimar os outros expoentes. Para isso, quantidades menos tradicionais devem ser utilizadas. Na literatura [76, 87], a derivada do cumulante de Binder dU_4/dT expressa na região crítica por:

$$\frac{\partial U_4}{\partial \beta} = aL^{1/\nu}(1 + bL^{-w}), \quad (52)$$

e as derivadas logarítmicas da n -ésima potência da magnetização,

$$\frac{\partial \ln \langle m^n \rangle}{\partial \beta} = (\langle m^n E \rangle / \langle m^n \rangle) - \langle E \rangle, \quad (53)$$

providencia-nos boas quantidades para determinar o expoente $1/\nu$.

5.6 O PARÂMETRO DE ORDEM

Para estudar o comportamento crítico do modelo Hd devemos inicialmente definir um parâmetro de ordem m adequado. Essa quantidade apresenta um valor diferente de zero em $T < T_c$ e zero em $T > T_c$ (ver Eq.(43)). Como estamos lidando com uma fase ferromagnética planar, definimos m como a magnetização no plano, expressa por [10]:

$$m = \frac{1}{N} \sqrt{\left(\sum_{i=1} s_i^x\right)^2 + \left(\sum_{i=1} s_i^y\right)^2}, \quad (54)$$

onde $N = L \times L$ é o número de spins do sistema. Como vimos anteriormente (seção (5.5)), na região crítica, o parâmetro de ordem exibe um comportamento singular caracterizado por um expoente β , cujo valor revela importantes características acerca da transição. Podemos, ainda, definir a suscetibilidade do parâmetro de ordem:

$$\chi(T) = \frac{N}{K_b T} [\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2] \quad (55)$$

que também deve apresentar um comportamento singular na região crítica caracterizado por um expoente γ .

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Trazemos nesse capítulo os resultados obtidos da simulação de Monte Carlo no modelo de Heisenberg dipolar bidimensional. Na primeira seção apresentamos informações básicas acerca da amostragem das séries temporais. Em seguida, apresentamos os resultados do comportamento termodinâmico do modelo e da análise *FSS* para a computação dos expoentes críticos. Na última seção, comparamos nossos resultados com os encontrados na literatura para modelos semelhantes, buscando caracterizar a natureza da transição de fase do modelo.

6.1 DADOS DA SIMULAÇÃO

Como estamos interessados no estudo da fase planar ferromagnética do modelo de Heisenberg dipolar, fixamos em todas as simulações a constante da interação dipolar D igual a $0.2J$. Performamos simulações para redes de tamanhos $L = 20, 30, 40, 50, 60$ e 70 . Para $L \leq 40$, cerca de 1×10^5 passos de Monte Carlo (CMC) foram considerados para termalização e para redes de tamanhos superiores, consideramos 5×10^5 passos. A cada temperatura T_0 , cerca de 1×10^6 configurações foram salvas para o cálculo das médias. Esse valor de amostragem é suficiente para obter boas estimativas para as grandezas termodinâmicas e as barras de erro via Jackknife, conforme concluímos pelas análises das correlações das séries temporais, apresentados no apêndice B.

Para identificar a região onde o modelo apresenta o comportamento crítico, realizamos simulações prévias em um extenso intervalo de temperaturas. Posteriormente, concentramos as simulações próximas à temperatura de transição, para extrair com boa resolução o comportamento das grandezas termodinâmicas de interesse. Para cada tamanho de rede, cerca de cinco a sete temperaturas T_0 foram consideradas para a produção das séries temporais e, posteriormente, repesadas, utilizando a técnica de histogramas, discutida na seção (5.3). A tabela (3), a seguir, indica as temperaturas T_0 consideradas para produção das séries temporais para cada tamanho L de rede.

L	T_0
20	0.95; 1.00; 1.05; 1.10
30	0.95; 1.00; 1.025; 1.05; 1.10
40	0.95; 0.975; 1.00; 1.025; 1.05
50	0.95; 0.96; 0.975; 1.00; 1.015; 1.05
60	0.95; 0.960; 0.975; 0.993; 1.00; 1.013; 1.05
70	0.95; 0.965; 0.975; 0.99; 1.00; 1.012; 1.015

Tabela 3 – Temperaturas T_0 para cada tamanho L da rede utilizadas para a repesagem de histogramas.

É necessário salientar que, apesar da técnica de repesagem ser poderosa, ela apresenta pelo menos um senão. Conforme observamos na tabela (3), à medida que aumentamos o tamanho da rede, menor é o intervalo de temperaturas na qual realizamos a repesagem. De fato, dado um sistema de volume V , o intervalo aproximado para uma repesagem sem erros é de aproximadamente $1/\sqrt{V}$ [80]. Ou seja, para grandes redes, é necessário performar simulações em intervalos de temperaturas cada vez menores, tornando a técnica menos eficiente.

6.2 GRANDEZAS TERMODINÂMICAS

Nos gráficos a seguir, Fig. 19, temos os resultados do comportamento das principais grandezas termodinâmicas de interesse, nomeadamente, energia (Fig. 19(a)), calor específico (Fig. 19(b)), magnetização (Fig. 19(c)) e suscetibilidade (Fig. 19(d)), como função da temperatura. As médias e as barras de erro foram estimadas via método de Jackknife (ver seção (5.3) para detalhes), sendo utilizadas $N_A = 100$ amostras para redes inferiores a $L = 50$ e $N_A = 50$ amostras para redes iguais ou superiores.

Observe que no gráfico da magnetização, Fig. 19(c), temos dois conjuntos de curvas: as superiores, referentes à magnetização no plano (parâmetro de ordem m) e as inferiores, referentes à magnetização uniaxial m_z , perpendicular ao plano. Note que quando a temperatura se aproxima de zero, a magnetização m tende a 1, indicando a estabilização de uma fase ferromagnética planar a baixas temperaturas. Nesse regime, as curvas parecem não depender do tamanho L da rede, indicando que essa fase é uma legítima ordem de longo alcance e não um artefato, resultado do tamanho finito da rede. Portanto, esperamos que essa magnetização persista no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$. À medida que a temperatura sobe, a magnetização decresce, indo a aproximadamente zero a altas temperaturas, ou seja, o sistema sofre uma transição para um estado paramagnético. Já a magnetização uniaxial é praticamente zero em toda a faixa de temperaturas simuladas.

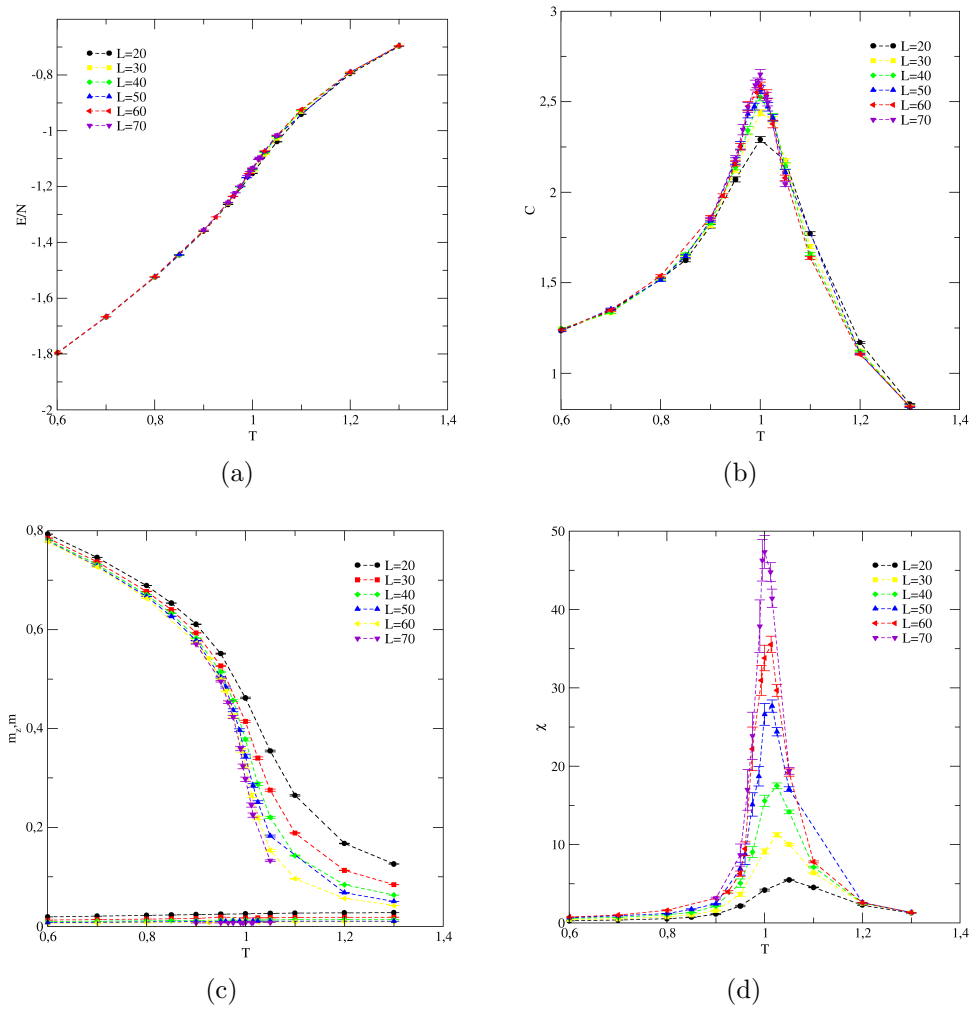


Figura 19 – Comportamento das principais grandezas termodinâmicas de interesse, nomeadamente, energia (a), calor específico (b), magnetização (c) e suscetibilidade (d), como função da temperatura.

Salienta-se que esse resultado está de acordo com os estudos teóricos de sistemas dipolares com fraca interação dipolar. De fato, como já observado no capítulo 4, nesses sistemas a isotropia da interação de troca é quebrada, tornando finitas as amplitudes das excitações das ondas de spin. Com efeito, ordem de longo alcance emerge em baixas temperaturas.

Já analisando o comportamento da suscetibilidade do parâmetro de ordem (Fig. 19(d)), percebemos que este apresenta picos cada vez mais acentuados à medida que cresce o tamanho da rede, indicando uma possível divergência no limite termodinâmico. Esperamos, assim, que, para redes suficientemente grandes, as temperaturas pseudo-críticas (onde se localizam os máximos da suscetibilidade) convirjam para um ponto fixo T_c , correspondente à temperatura crítica do modelo. A divergência da suscetibilidade no ponto crítico também é observada em modelos de curto alcance como o de Ising ou em sistemas dipolares semelhantes, como o XY dipolar [29]. Esse comportamento é assinatura de uma

transição de fase de segunda ordem.

No entanto, diferentemente do que se observa para a suscetibilidade, o calor específico C (Fig. 19(b)) não apresenta picos que crescem acentuadamente com o tamanho L da rede. Isso pode indicar uma possível divergência logarítmica dessa quantidade ($\alpha = 0$) ou até mesmo uma não divergência, caracterizada por um $\alpha < 0$, como ocorre na famosa transição *BKT* [88] ou no Heisenberg 3D [89, 90]. Estas questões serão analisadas na próxima seção, quando determinaremos os expoentes críticos do modelo.

Por fim, apresentamos na Fig. 20 abaixo duas configurações típicas do sistema, correspondentes a duas temperaturas distintas, nomeadamente, $t = 0.15$ (figura à esquerda) e $t = 1.3$ (figura à direita). Pelos snapshots, vê-se claramente a estabilização da fase ordenada a baixas temperaturas e seu respectivo desordenamento a altas temperaturas.

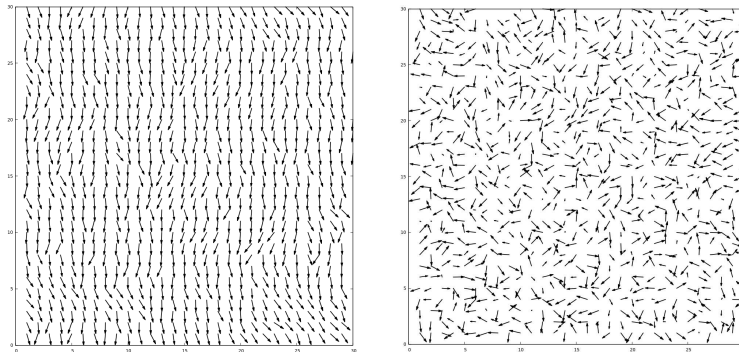


Figura 20 – Duas configurações típicas do sistema, correspondentes a duas temperaturas distintas, nomeadamente, $t = 0.15$ (figura à esquerda) e $t = 1.3$ (figura à direita).

6.3 EXPOENTES CRÍTICOS

Para a determinação dos expoentes críticos do modelo, utilizaremos a análise de escala de tamanho finito (*FSS*), como descrito na seção (5.5). Antes, porém, devemos estimar a temperatura crítica T_c , onde a transição de fase ocorre. Este parâmetro não é uma quantidade universal, mas é necessária na análise *FSS*. Como mencionado na seção (5.5), o cumulante de Binder U_4 , Eq. (51) providencia-nos uma boa estimativa de T_c . Portanto, na Fig. 21, mostramos a dependência com a temperatura do cumulante U_4 , para vários tamanhos de rede L . As curvas foram obtidas pela técnica de repesagem de histogramas. Recordemos que, no ponto crítico, curvas dessa quantidade para diferentes tamanhos de rede se cruzam em um mesmo ponto fixo U^* (para redes suficientemente

grandes). Assim, a partir da comum interseção, nós estimamos a temperatura crítica como sendo:

$$T_c = 0.975 \pm 0.010$$

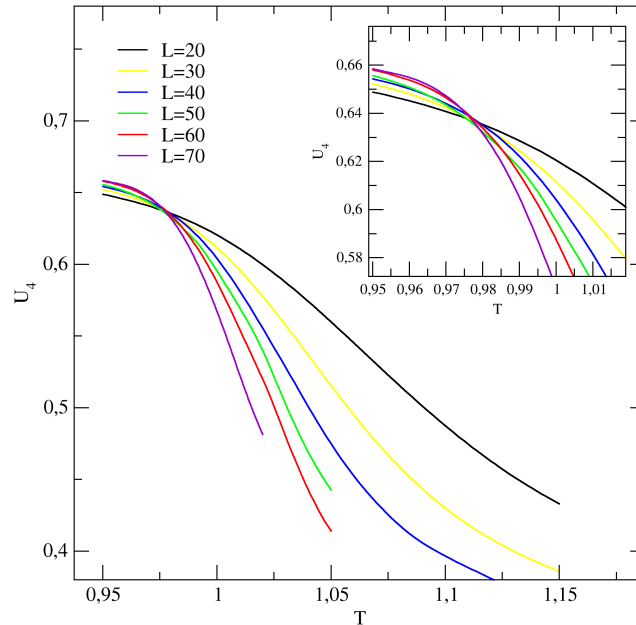


Figura 21 – Dependência com a temperatura do cumulante de Binder U_4 Eq.(51), para vários tamanhos de rede L . No ponto crítico, curvas dessa quantidade para diferentes tamanhos de rede, se cruzam em um mesmo ponto fixo U^* .

Uma vez determinado T_c , passamos à computação dos expoentes críticos. Iniciaremos pelo expoente γ/ν relacionado à suscetibilidade do parâmetro de ordem. Assim, na Fig. 22 apresentamos a dependência de χ Eq. (55) com a temperatura, próxima à região crítica, obtida pela técnica de repesagem de histogramas. Pela equação (50.b), os picos da suscetibilidade escalam com $L^{\gamma/\nu}$. Portanto, plotando os máximos de χ como função de L numa escala logarítmica obtemos uma reta cuja declividade fornece uma estimativa de γ/ν . Essa análise é mostrada em inserção no gráfico da Fig. 22. Assim, através de um ajuste linear, obtemos um valor de:

$$\gamma/\nu = 1.73 \pm 0.01.$$

De fato, este valor é muito próximo do obtido por Mol e Costa para modelos semelhantes, nomeadamente, AHd (1.763(1)) [10], AHd(bilayer) (1.71(2)) [28] e dXY [29] (1.737(1)), conforme mostrado na tabela (2). Provavelmente, o pequeno desvio pode ser explicado por correções de tamanho finito. Portanto, esses resultados corroboram a hipótese de que esses sistemas pertençam à mesma classe de universalidade.

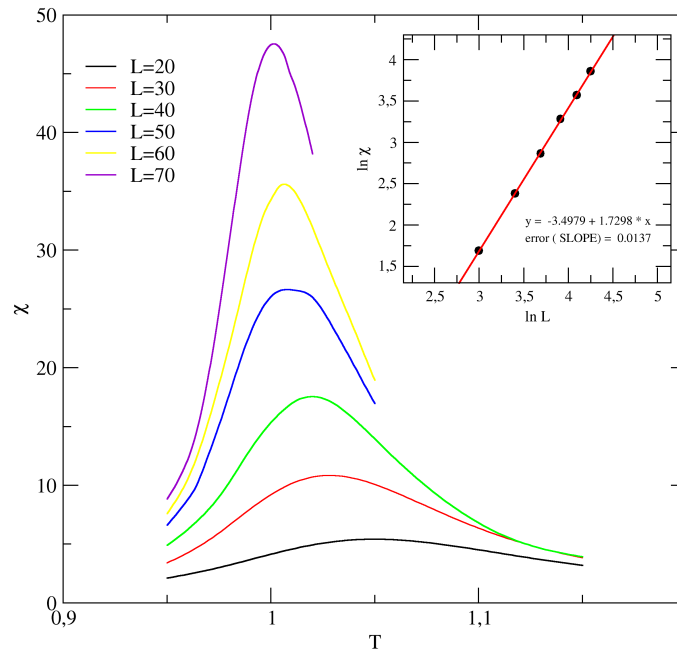


Figura 22 – Dependência da suscetibilidade χ (Eq.(55)) com a temperatura próxima à região crítica, obtida pela técnica de repesagem de histogramas. Na inserção: máximos de χ como função de L em escala logarítmica. A declividade da reta fornece uma estimativa de γ/ν .

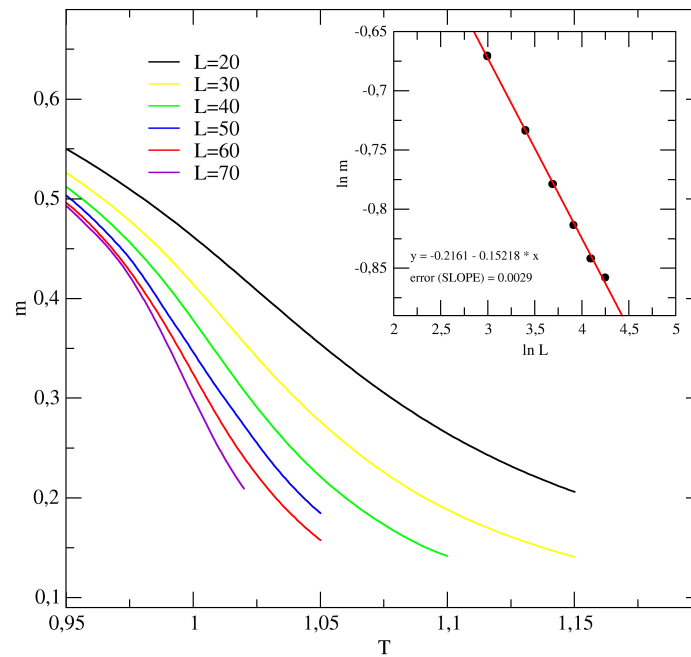


Figura 23 – Comportamento do parâmetro de ordem m Eq.(54) na região crítica. Em inserção, o valor de m em $T = T_c$ como função de L , em escala logarítmica. A declividade da curva fornece uma estimativa para β/ν .

Já o expoente β/ν pode ser avaliado plotando o valor do parâmetro de ordem m (Eq.(54)) em $T = T_c$ como função de L , em escala logarítmica. A declividade da curva fornece uma estimativa para β/ν . O comportamento de m na região crítica é mostrado no gráfico Fig. (23). Da análise *FSS*, (gráfico em inserção) obtemos o valor de:

$$\beta/\nu = 0.152 \pm 0.003.$$

Novamente esse valor é muito semelhante àqueles das referências [10, 28, 29] em modelos semelhantes.

Finalmente, para determinar o expoente $1/\nu$, associado à escala do comprimento de correlação ξ , quantidades menos tradicionais devem ser consideradas, visto que não podemos obtê-lo diretamente das grandezas termodinâmicas usuais. De acordo com a literatura [76, 87], as quantidades dU_4/dT (derivada do cumulante de Binder) e a derivada do logarítmico da magnetização $d(\ln m)/dT$ (que possui a mesma propriedade de escala da declividade do cumulante) providenciam-nos boas quantidades para determinar o expoente $1/\nu$. Portanto, plotando em escala log-log os picos de dU_4/dT e $d(\ln m)/dT$ como função do tamanho L da rede (Fig. 24) e baseado nas relações de escala Eq.(52) e Eq.(53), obtemos, respectivamente, duas estimativas para $1/\nu$, a saber, 0.84(2) e 0.82(3). Considerando o valor médio dessas duas quantidades como nossa estimativa final, obtemos $1/\nu = 0.83(2)$ ou,

$$\nu = 1.21 \pm 0.03$$

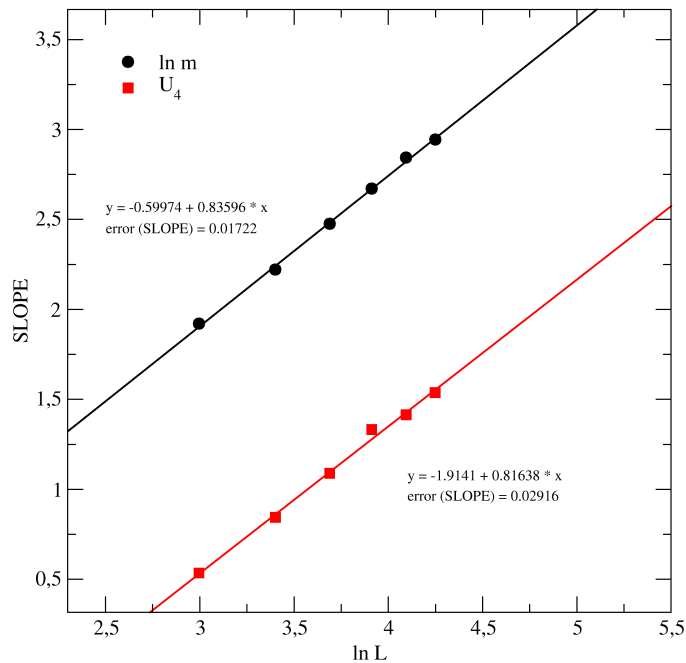


Figura 24 – Valores dos picos de dU_4/dT Eq.(52) e $d(\ln m)/dT$ Eq.(53) como função do tamanho L da rede em escala log-log. A declividade das curvas fornecem uma estimativa para $1/\nu$.

Ressaltamos que esse valor é consistente com o obtido no modelo HAd e outros (ver tabela (2)), embora difira do estimado por Mol e Costa no modelo dXY , cujo valor é $\nu = 1.277(2)$. Chama-se atenção que o desvio entre os valores está fora da barra de erro. Portanto, parece improvável que esta discrepância seja resolvida com correções de tamanho finito. Discutiremos essa questão na seção (6.4).

Por fim, como mencionado previamente, o calor específico C parece não apresentar um comportamento divergente. Ao invés, seus picos tendem a um valor limite com o aumento do tamanho do sistema, ou seja, os resultados apontam para uma singularidade do tipo cúspide. Assim, não podemos utilizar a relação de escala como dada na Eq.(49b) para a determinação do expoente crítico α . No entanto, podemos determiná-lo de forma indireta, através das relações de escala $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ e da relação de hiper-escala $\nu d = 2 - \alpha$ dos expoentes críticos. Assim, da primeira relação, obtemos $\alpha = -0.42(6)$ e da segunda $\alpha = -0.46(5)$. Combinando ambas as estimativas, obtemos:

$$\alpha = -0.44 \pm 0.04.$$

O valor negativo de α confirma que o calor específico não diverge no limite termodinâmico. Ressalta-se que esse comportamento não é exclusividade dos modelos dipolares. Modelos com somente interação de curto alcance, como o XY e o Heisenberg $3D$, também apresentam valores negativos para o expoente α [90].

Uma vez estimado os expoentes críticos, reescrevemos a tabela (2), adicionando os expoentes críticos do modelo $Hd\ 2D$, computados nesse trabalho. A tabela resultante é a (4) que fornece os resultados de Mol e Costa para os expoentes críticos de sistemas dipolares similares, como o Heisenberg dipolar anisotrópico (AHd) e o XY dipolar. Na última linha da tabela, encontram-se os resultados teóricos do grupo de renormalização de Maier e Schwabl [9].

Modelo	ν	γ	β	α
Hd2D	1.21(3)	2.09(5)	0.184(6)	-0.44(4)
AHd	1.22(3)	2.15(5)	0.18(1)	-0.44(18)
AHd(bilayer)	1.22(9)	2.1(2)	0.18(5)	-0.55(15)
dXY	1.277(2)	2.218(5)	0.2065(4)	-1.1(1)
dXY(Maier)	-	1	1/2	-2

Tabela 4 – Expoentes críticos para alguns modelos dipolares com simetria contínua de spin. Os resultados desse trabalho encontram-se na primeira linha. Na última linha encontra-se os resultados teóricos de renormalização de Maier e Schwabl [9]. Tabela adaptada de [10].

Antes de passar à discussão dos resultados convém verificar se nossas estimativas

para os expoentes críticos são satisfatórios. Assim, plotamos as funções de escala para a suscetibilidade, magnetização e cumulante de Binder em função da variável de escala $x = tL^{1/\nu}$. Uma vez que estas são universais, diferentes curvas devem colapsar todas em uma única curva próximo à região crítica (ver seção (5.5)). De fato, como podemos perceber na Fig. 25, as curvas apresentam um excelente colapso, mostrando a validade de nossos resultados para os expoentes críticos.

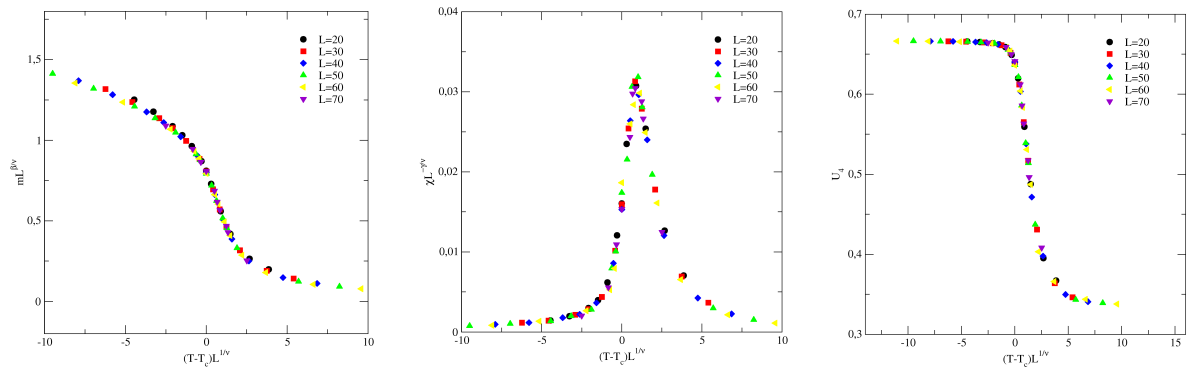


Figura 25 – Funções de escala para a suscetibilidade, magnetização e cumulante de Binder em função da variável de escala $x = tL^{1/\nu}$.

6.4 DISCUSSÃO

Analisando a tabela de expoentes dos principais modelos dipolares de spins contínuos (tabela (4)), algumas conclusões seguem. Primeiramente, comparando nossos resultados para o modelo *Hd2D* com os obtidos por Mol e Costa para os modelos *AHd* e *AHd(bilayer)*, observamos que os três apresentam expoentes críticos muito similares, de fato, concordando dentro da barra de erro. Assim, considerando a incerteza numérica, a transição de fase no modelo *Hd2D* é similar àquela observada nos modelos *AHd* e *AHd(bilayer)*. Essa transição é caracterizada por um calor específico não divergente, como na transição *BKT*, embora, aqui, ordem de longo alcance é estabilizada a baixas temperaturas. Isso corrobora a hipótese desses modelos pertencerem à mesma classe de universalidade. Visto que os expoentes críticos são não usuais, essa é uma nova classe de universalidade, distinta daquelas como a de Ising ou a XY, onde se agrupam a maioria dos sistemas magnéticos. De fato, como esses modelos apresentam uma mesma fase ferromagnética planar, ou seja, a mesma quebra de simetria, não é surpresa apresentarem o mesmo conjunto de expoentes críticos. Em trabalhos prévios, Mol e Costa já apontaram a existência dessa nova classe de universalidade para sistemas dipolares [10, 29].

No entanto, temos um resultado mais interessante quando comparamos os expoentes críticos do modelo $Hd2D$ e dXY . Apesar da interação dipolar suprimir a componente z do spin no modelo $Hd2D$ e, portanto, levá-lo a uma semelhança com o modelo dXY , eles apresentam expoentes críticos distintos. Essas diferenças extrapolam os limites da barra de erro e, portanto, é improvável que seja devido a correções de tamanho finito. Assim, apesar de ambos os modelos apresentarem a mesma quebra de simetria, nossos resultados indicam que eles não pertencem à mesma classe de universalidade. Esse resultado é inesperado, levando-se em conta que os expoentes críticos dependem de poucos parâmetros do sistema como sua dimensão, o número de componentes do parâmetro de ordem, alcance das interações, etc.

Convém destacar que um resultado semelhante foi obtido por Tomita [31] no contexto dos sistemas dipolares puros. Através de extensas simulações de Monte Carlo realizadas no modelo de Heisenberg dipolar puro, o autor obteve expoentes críticos distintos do modelo XY dipolar. Esse resultado aparentemente contraditório foi explicado considerando a anisotropia quadripolar da interação dipolar. É bem conhecido que em sistemas dipolares puros, a invariância rotacional é quebrada por flutuações térmicas, dando origem a um campo anisotrópico efetivo h_4 que cresce com o aumento da temperatura [7,63]. Conforme demonstrado por Fernandez e Alonso [61], a transição de fase em sistemas dipolares depende desse parâmetro, ou seja, os expoentes críticos deixam de ser universais. Levando em consideração esse fato, Tomita propôs que a anisotropia efetiva no modelo de Heisenberg dipolar puro é diferente daquela induzida no modelo XY dipolar. Com efeito, seus expoentes críticos são diferentes. Salienta-se que, de acordo com cálculos teóricos do grupo de renormalização [65], anisotropias de campo quadripolar afetam substancialmente o comportamento crítico do sistema XY , levando a expoentes críticos não universais.

No caso dos modelos dipolares com interação de troca, não encontramos na literatura um estudo sobre os efeitos da anisotropia da interação dipolar sobre a transição de fase. No entanto, devido às discrepâncias encontradas entre os expoentes dos modelos $Hd2D$ e dXY , é possível que esses efeitos sejam cruciais no comportamento crítico do sistema. Além disso, nossos resultados para o expoente do parâmetro de ordem β estão dentro da janela de expoentes obtidos por Bramwell et al. [8] para o modelo XYh_4 , descrito pela Hamiltoniana de curto alcance $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - h_4 \sum (\sqrt{s_x^4 + s_y^4})$. Esse modelo é conhecido por apresentar uma janela de universalidade para os expoentes críticos

que vão desde a classe de Ising ($\beta = 0.125$) até a classe XY ($\beta = 0.23$), dependendo da força do parâmetro h_4 . Experimentalmente, observa-se que todos os sistemas magnéticos bidimensionais se localizam nos limites ou dentro dessa janela, ou seja, pertencem a uma dessas classes de universalidade, nomeadamente, Ising, XY ou XYh_4 , conforme observado no histograma da Fig. 26, extraído do artigo [8]. Portanto, dos resultados numéricos para o expoente β sintetizado na tabela (4), temos para todos os modelos, $0.125 < \beta < 0.23$ indicando que, ao contrário do proposto por Mol e Costa [10,29], os sistemas dipolares podem não corresponder a uma nova classe de universalidade e sim pertencer à universalidade XYh_4 .

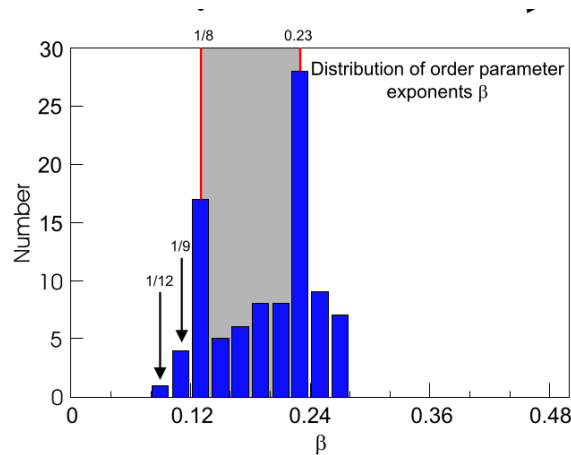


Figura 26 – Histograma de valores β para todos os sistemas magnéticos bidimensionais reportados em [8]. Extraído de [8].

No entanto, também se observa da tabela (4) que assim como os resultados de Mol e Costa, nossos resultados também estão em desacordo com os resultados teóricos do grupo de renormalização de Maier e Schwabl [9], indicando que a transição de fase em sistemas dipolares não é questão resolvida e, portanto, deve ser tratado com cuidado. Assim, esse trabalho não tem como pretensão trazer conclusões definitivas, mas sim corroborar com a discussão. Sobre essa discrepância, devemos ter clareza se a diferença vem ou não das aproximações numéricas da simulação. Portanto, as próprias simulações precisam ser refinadas de modo a produzir resultados mais confiáveis. É imprescindível, por exemplo, realizar simulações em redes de tamanho superiores às comumente estudadas na literatura de forma a minimizar os efeitos de tamanho finito. Deve-se lembrar, no entanto, que devido ao fenômeno de abrandamento crítico, simulações em redes maiores requerem algoritmos mais eficientes que o de Metropolis. Para sistemas com interação de longo alcance, algoritmos como de Luijten-Blöte [91,92], e mais recentemente, o algoritmo event-chain [93],

têm se mostrado mais rápidos em encontrar o estado de equilíbrio em comparação com o algoritmo de Metropolis. Portanto, adaptar esses algoritmos para utilização em sistemas dipolares com spins contínuos é uma futura perspectiva de trabalho. Esperamos, com isso, melhorar a performance da simulação, trazendo estimativas mais precisas acerca da transição de fase desses sistemas.

CONCLUSÕES GERAIS E PERSPECTIVAS

Em resumo, na primeira parte desse trabalho, investigamos o comportamento dos skyrmions de dois merons em um sistema antiferromagnético bidimensional descrito pelo modelo de Heisenberg isotrópico. Essa textura ainda não havia sido estudada na rede *AFM*. Como primeiro resultado, obtemos que devido à finitude da rede, a energia do skyrmion é superior àquela esperada pela teoria contínua, nomeadamente, $4\pi J$. No entanto, extrapolando nossos resultados para redes infinitas, recuperamos o resultado do limite contínuo. Verificamos também que devido à discretização da estrutura, a sua estabilidade topológica é perdida. Com efeito, os dois merons se atraem mutuamente até se fundirem no centro do skyrmion, causando o colapso da textura em ondas de spins. Outro resultado relevante está na diferença de estabilidade do skyrmion *2CS* na rede *AFM* e *FM*. Enquanto os resultados de Amaral et al. [25] apontam para uma grande estabilidade da textura na rede *FM*, os resultados obtidos aqui sugerem que skyrmions *2CS* são muito instáveis na rede antiferromagnética. Mesmo em grandes sistemas, o tempo de vida do skyrmion na rede *AFM* é ordens de grandeza inferior ao seu contrapartido na rede *FM*. Outra diferença está no seu comportamento dinâmico. Não observamos o típico movimento de rotação da textura, como observado na rede ferromagnética. Aqui, os merons se aproximam sem qualquer movimento de rotação até se encontrarem no núcleo. No entanto, não podemos inferir que o movimento de rotação não ocorra. Talvez a frequência de rotação seja tão baixa que a textura colapsa antes de apresentar uma rotação visível.

Também estudamos a influência de uma impureza não magnética nas proximidades do skyrmion *2CS*. O principal efeito é uma atração do skyrmion em direção à impureza e, posteriormente, seu colapso quando a atinge. Essa atração skyrmion-vacância pode ser explicada por argumentos energéticos: como no núcleo do skyrmion a interação de troca entre os spins é maior, a configuração mais energeticamente favorável é aquela onde o centro do skyrmion se encontra no sítio da impureza.

Por fim, analisamos o efeito de um campo magnético externo sobre a textura *2CS*. O principal efeito que observamos é a deformação do skyrmion *2CS* no tipo *1CS* e vice-versa num movimento cíclico, devido à precessão dos spins induzida pelo campo. Isso abre uma perspectiva de se estabilizar skyrmions de dois merons a partir do skyrmion usual de um núcleo, com aplicação de um campo magnético planar ou na presença

de uma anisotropia de plano fácil. De fato, estruturas semelhantes aos skyrmions $2CS$, chamadas de bimerons, foram preditas teoricamente [5, 22] e detectadas recentemente em magnetos quirais ferromagnéticos [24]. Esperamos, portanto, que esse trabalho adiante algumas das propriedades das texturas de dois merons em materiais antiferromagnéticos que futuramente poderão ser estudados do ponto de vista experimental.

Na segunda parte do trabalho estudamos a termodinâmica do modelo de Heisenberg dipolar bidimensional ($Hd2D$), bem como seu comportamento crítico. Primeiramente, nossos resultados estão de acordo com as previsões teóricas de que a baixas temperaturas, o modelo exibe uma fase ferromagnética planar. De fato, a interação dipolar quebra a isotropia da interação de troca e favorece uma configuração de spins no plano. Isso pode ser observado diretamente no gráfico da magnetização em função da temperatura na Fig. 19(c).

Considerando $D = 0.2J$, obtemos que uma transição do tipo ordem-desordem ocorre a uma temperatura $T_c = 0.975 \pm 0.010$ no modelo $Hd2D$, conforme estimado pelas curvas do cumulante de Binder U_4 na Fig. 21. Por sua vez, a suscetibilidade do parâmetro de ordem apresentou picos acentuados com o aumento da rede, indicando uma divergência no limite termodinâmico. Esse comportamento é assinatura de uma transição de segunda ordem. Já os resultados para o calor específico indicam que essa quantidade não diverge na temperatura crítica, apontando uma singularidade do tipo cúspide. Salienta-se que esses resultados estão em acordo qualitativamente com os obtidos por Mol e Costa para sistemas dipolares semelhantes e também com os obtidos teoricamente pelo grupo de renormalização de Maier e Schwabl [9].

Da análise de escala de tamanho finito (FSS) e usando a técnica de repesagem de histogramas, computamos os expoentes críticos para o modelo $Hd2D$. Obtemos os seguintes resultados: $\nu = 1.21(3)$, $\gamma = 2.09(5)$, $\beta = 0.184(6)$, e $\alpha = -0.44(2)$. Esses valores são consistentes com os encontrados para modelos dipolares semelhantes, como o AHd e o $AHd_{bilayer}$ [10, 28], embora sejam discrepantes dos encontrados por Mol e Costa para o modelo dXY [29]. O desvio encontrado excede os limites das barras de erros e julgamos improvável que seja resolvido por correções de tamanho finito. De fato, um resultado semelhante a esse foi encontrado por Tomita no estudo do modelo de Heisenberg dipolar puro [31]. Apesar desse sistema apresentar a mesma fase do modelo XY dipolar, ambos apresentam expoentes críticos distintos. Esse resultado contraditório foi explicado

considerando a anisotropia quadripolar da interação dipolar [31].

Assim, nossos resultados indicam que, mesmo nos sistemas dipolares com interação de troca, a anisotropia da interação dipolar parece ser crucial no comportamento crítico do sistema. De fato, o expoente β estimado nesse trabalho, nomeadamente $\beta = 0.184(6)$, está dentro da janela de universalidade $0.125 < \beta < 0.23$, encontrado por Bramwell para o modelo XYh_4 [8]. Por conseguinte, os resultados indicam que os modelos dipolares pertencem à classe de universalidade XYh_4 , ou seja, ao contrário do proposto por Mol e Costa, a interação dipolar parece não criar uma classe extra de universalidade em sistemas magnéticos.

Convém mencionar, entretanto, que os resultados numéricos discordam daqueles obtidos por Maier e Schwabl [9] seguindo a teoria de grupo de renormalização. Portanto, é preciso considerar com maior cautela essas conclusões. Dadas as limitações de tamanho de rede estudadas (à parte de considerarmos condições de contorno periódicas), seria de todo impossível tentar tecer conclusões definitivas acerca do comportamento crítico do modelo $Hd2D$ e similares. Assim, para obter resultados mais precisos deve-se performar simulações em redes maiores, possibilitando verificar se a discordância entre resultados teóricos e numéricos (ou até mesmo discordâncias entre os resultados numéricos) têm origem nas limitações da simulação. Portanto, estudos em redes superiores através de adaptações de algoritmos mais efetivos que o de Metropolis, como o algoritmo Luijten-Blöte [91,92] e o event-chain [93], são algumas de nossas perspectivas futuras de trabalho em sistemas dipolares de spins contínuos.

REFERÊNCIAS

- 1 PEREIRA, Afranio Rodrigues; PIRES, Antonio Sérgio Teixeira. **Teoria Quântica de Campos em sistemas magnéticos de baixas dimensões**. [S.l.: s.n.], 2005.

- 2 COMMONS, Wikimedia. **File:2skyrmions.PNG — Wikimedia Commons, the free media repository**. 2017. [Online; accessed 26-September-2018]. Disponível em: <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?title=File:2skyrmions.PNG&oldid=262950254>.

- 3 SEKI, Shinichiro; MOCHIZUKI, Masahito. **Skyrmions in magnetic materials**. [S.l.]: Springer, 2016.

- 4 YU, X. Z.; ONOSE, Y.; KANAZAWA, N.; PARK, J. H.; HAN, J. H.; MATSUI, Y.; NAGAOSA, Y. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal. **Nature**, v. 465, n. 7300, p. 901–904, 2010.

- 5 SILVA, R. L.; SECCHIN, L. D.; MOURA-MELO, W. A.; PEREIRA, A. R.; STAMPS, R. L. Emergence of skyrmion lattices and bimerons in chiral magnetic thin films with nonmagnetic impurities. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 89, p. 054434, Feb 2014.

- 6 DE'BELL, K.; MACISAAC, A. B.; WHITEHEAD, J. P. Dipolar effects in magnetic thin films and quasi-two-dimensional systems. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 72, p. 225–257, Jan 2000.

- 7 PRAKASH, Sona; HENLEY, Christopher L. Ordering due to disorder in dipolar magnets on two-dimensional lattices. **Physical Review B**, APS, v. 42, n. 10, p. 6574, 1990.

- 8 TARONI, A; BRAMWELL, S T; HOLDSWORTH, P C W. Universal window for two-dimensional critical exponents. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 20, n. 27, p. 275233, 2008.

- 9 MAIER, P. G.; SCHWABL, F. Ferromagnetic ordering in the two-dimensional dipolar *xy* model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 70, p. 134430, Oct 2004.

- 10 MÓL, L.A.S.; COSTA, B.V. The phase transition in the anisotropic heisenberg model with long range dipolar interactions. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 353, p. 11–14, 2014. ISSN 0304-8853.

- 11 FERT, Albert; CROS, Vincent; SAMPAIO, João Paulo Aguiar. Skyrmions on the track. **Nature nanotechnology**, v. 8 3, p. 152–6, 2013.
- 12 RAJARAMAN, R. **Solitons and instantons. An introduction to solitons and instantons in quantum field theory.** [S.l.: s.n.], 1982.
- 13 WALDNER, F. Two dimensional soliton energy and esr in afm. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 54-57, p. 873 – 874, 1986. ISSN 0304-8853.
- 14 WALDNER, F. Comment on “spin correlations of 2d quantum antiferromagnet at low temperatures and a direct comparison with neutron-scattering experiments”. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 65, p. 1519–1519, Sep 1990.
- 15 MERTENS, F. G.; BISHOP, A. R.; WYSIN, G. M.; KAWABATA, C. Dynamical correlations from mobile vortices in two-dimensional easy-plane ferromagnets. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 39, p. 591–602, Jan 1989.
- 16 GOUVA, M. E.; WYSIN, G. M.; BISHOP, A. R.; MERTENS, F. G. Vortices in the classical two-dimensional anisotropic heisenberg model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 39, p. 11840–11849, Jun 1989.
- 17 ZASPEL, C. E.; GRIGEREIT, T. E.; DRUMHELLER, John E. Soliton contribution to the electron paramagnetic resonance linewidth in the two-dimensional antiferromagnetic. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 74, p. 4539–4542, May 1995.
- 18 HEINZE, Stefan; BERGMANN, Kirsten von; MENZEL, Matthias; BREDE, Jens; KUBETZKA, Andre; WIESENDANGER, Roland; BIHLMAYER, Gustav; BLUGEL, Stefan. Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions. **Nat Phys**, Nature Publishing Group, v. 7, n. 9, p. 713–718, set. 2011. ISSN 1745-2473.
- 19 ZHANG, Xichao; EZAWA, Motohiko; ZHOU, Yan. Magnetic skyrmion logic gates: conversion, duplication and merging of skyrmions. **Scientific Reports**, Nature Publishing Group, v. 5, 2015.
- 20 ZHANG, Xichao; ZHOU, Yan; EZAWA, Motohiko; ZHAO, GP; ZHAO, Weisheng. Magnetic skyrmion transistor: skyrmion motion in a voltage-gated nanotrack. **Scientific reports**, Nature Publishing Group, v. 5, p. 11369, 2015.
- 21 LORETO, R.P.; MOURA-MELO, W.A.; PEREIRA, A.R.; ZHANG, X.; ZHOU, Y.; EZAWA, M.; ARAUJO, C.I.L. de. Creation, transport and detection of imprinted magnetic solitons stabilized by spin-polarized current. **Journal of Magnetism and**

- Magnetic Materials**, v. 455, p. 25 – 31, 2018. ISSN 0304-8853. Magnetic skyrmions as future information carriers.
- 22 LIN, Shi-Zeng; SAXENA, Avadh; BATISTA, Cristian D. Skyrmion fractionalization and merons in chiral magnets with easy-plane anisotropy. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 91, p. 224407, Jun 2015.
- 23 OZAWA, Ryo; HAYAMI, Satoru; BARROS, Kipton; CHERN, Gia-Wei; MOTOME, Yukitoshi; BATISTA, Cristian D. Vortex crystals with chiral stripes in itinerant magnets. **Journal of the Physical Society of Japan**, The Physical Society of Japan, v. 85, n. 10, p. 103703, 2016.
- 24 YU, XZ; KOSHIBAE, W; TOKUNAGA, Y; SHIBATA, K; TAGUCHI, Y; NAGAOSA, N; TOKURA, Y. Transformation between meron and skyrmion topological spin textures in a chiral magnet. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 564, n. 7734, p. 95, 2018.
- 25 AMARAL, M.A.; SILVA, R.L.; PEREIRA, A.R.; MOURA-MELO, W.A. Discrete double core skyrmions in magnetic thin films. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 321, n. 19, p. 3360 – 3363, 2009. ISSN 0304-8853.
- 26 MALEEV, S.V. Dipole forces in two-dimensional and layered ferromagnets. **JETP**, Vol. 43, p. 1240, Jun 1976.
- 27 MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 17, p. 1133–1136, Nov 1966.
- 28 MÓL, L. A. S.; COSTA, B. V. Anisotropic heisenberg model with dipolar interactions: Monte carlo simulations of the planar-to-paramagnetic phase transition in a bilayer system. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 79, p. 054404, Feb 2009.
- 29 Mól, L A S; COSTA, B V. Phase transition in the two-dimensional dipolar planar rotator model. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 22, n. 4, p. 046005, 2010.
- 30 KOSTERLITZ, J M; THOULESS, D J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, v. 6, n. 7, p. 1181, 1973.
- 31 TOMITA, Yusuke. Monte carlo study of two-dimensional heisenberg dipolar lattices. **Journal of the Physical Society of Japan**, The Physical Society of Japan, v. 78, n. 11, p. 114004, 2009.

- 32 KARDAR, M. **Statistical Physics of Particles**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007. ISBN 9781139464871.
- 33 BELAVIN, AA; POLYAKOV, AM. Metastable states of two-dimensional isotropic ferromagnets. **JETP lett**, v. 22, n. 10, p. 245–248, 1975.
- 34 HAN, Jung Hoon. **Skyrmions in Condensed Matter**. [S.l.]: Springer, 2017.
- 35 Mühlbauer, S.; Binz, B.; Jonietz, F.; Pfleiderer, C.; Rosch, A.; Neubauer, A.; Georgii, R.; Böni, P. Skyrmion Lattice in a Chiral Magnet. **Science**, v. 323, p. 915, fev. 2009.
- 36 WOO, Seonghoon. **Elusive spin textures discovered**. [S.l.]: Nature Publishing Group, 2018.
- 37 PARKIN, Stuart SP; HAYASHI, Masamitsu; THOMAS, Luc. Magnetic domain-wall racetrack memory. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 320, n. 5873, p. 190–194, 2008.
- 38 FERT, Albert; REYREN, Nicolas; CROS, Vincent. Magnetic skyrmions: advances in physics and potential applications. **Nature Reviews Materials**, Nature Publishing Group, v. 2, n. 7, p. 17031, 2017.
- 39 EZAWA, Motohiko. Compact merons and skyrmions in thin chiral magnetic films. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 83, p. 100408, Mar 2011.
- 40 BARKER, Joseph; TRETIAKOV, Oleg A. Static and dynamical properties of antiferromagnetic skyrmions in the presence of applied current and temperature. **Physical review letters**, APS, v. 116, n. 14, p. 147203, 2016.
- 41 SILVA, RL; SILVA, RC; PEREIRA, AR; MOURA-MELO, WA. Antiferromagnetic skyrmions overcoming obstacles in a racetrack. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 31, n. 22, p. 225802, 2019.
- 42 KRECH, M; BUNKER, Alex; LANDAU, DP. Fast spin dynamics algorithms for classical spin systems. **Computer physics communications**, Elsevier, v. 111, n. 1-3, p. 1–13, 1998.
- 43 BURDEN, J.D. Faires R.L.; REYNOLDS, A.C. Numerical analysis. **Prindle, Weber and Schmidt, 2nd. ed. published**, p. 205 and 219, 1981.

- 44 CAI, Liufei; CHUDNOVSKY, Eugene M; GARANIN, Dmitry A. Collapse of skyrmions in two-dimensional ferromagnets and antiferromagnets. **Physical Review B**, APS, v. 86, n. 2, p. 024429, 2012.
- 45 MÓL, L. A. S.; PEREIRA, A. R.; PIRES, A. S. T. Planar vortex in two-dimensional xy ferromagnets with a nonmagnetic impurity potential. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 66, p. 052415, Aug 2002.
- 46 PEREIRA, A. R.; WYSIN, G. M. Hole-vortex-magnon interactions in diluted layered antiferromagnets with planar symmetry. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 73, p. 214402, Jun 2006.
- 47 PEREIRA, A. R.; MÓL, L. A. S.; LEONEL, S. A.; COURA, P. Z.; COSTA, B. V. Vortex behavior near a spin vacancy in two-dimensional xy magnets. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 68, p. 132409, Oct 2003.
- 48 PITZER, Kenneth S.; LIMA, M. Conceicao P. De; SCHREIBER, Donald R. Critical point and phase separation for an ionic system. **The Journal of Physical Chemistry**, v. 89, n. 10, p. 1854–1855, 1985.
- 49 BURKHARDT, Theodore W.; EISENRIEGLER, Erich. Casimir interaction of spheres in a fluid at the critical point. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 74, p. 3189–3192, Apr 1995.
- 50 ANDERSON, P W; YUVAL, G. Some numerical results on the kondo problem and the inverse square one-dimensional ising model. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, v. 4, n. 5, p. 607, 1971. Disponível em: <http://stacks.iop.org/0022-3719/4/i=5/a=011>.
- 51 CASTELNOVO, Claudio; MOESSNER, Roderich; SONDHI, Shivaji L. Magnetic monopoles in spin ice. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 451, n. 7174, p. 42, 2008.
- 52 PAPPAS, D. P.; KÄMPER, K.-P.; HOPSTER, H. Reversible transition between perpendicular and in-plane magnetization in ultrathin films. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 64, p. 3179–3182, Jun 1990.
- 53 SILVA, R C; NASCIMENTO, F S; MÓL, L A S; MOURA-MELO, W A; PEREIRA, A R. Thermodynamics of elementary excitations in artificial magnetic square ice. **New Journal of Physics**, v. 14, n. 1, p. 015008, 2012.
- 54 NAGAOSA, N.; YU, X. Z.; TOKURA, Y. Gauge fields in real and momentum spaces in magnets: monopoles and skyrmions. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 370, n. 1981, p. 5806–5819, 2012. ISSN 1364-503X.

- 55 RUELLE, D. Statistical mechanics of a one-dimensional lattice gas. **Comm. Math. Phys.**, Springer, v. 9, n. 4, p. 267–278, 1968.
- 56 FISHER, Michael E.; MA, Shang-keng; NICKEL, B. G. Critical exponents for long-range interactions. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 29, p. 917–920, Oct 1972.
- 57 MUKAMEL, David. Notes on the statistical mechanics of systems with long-range interactions. **arXiv preprint arXiv:0905.1457**, 2009.
- 58 TELES, T. N. **Mecânica Estatística em Sistemas com Interações de Longo Alcance: Estados Estacionários de Equilíbrio**. 2012. Tese de Doutorado, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- 59 TSALLIS, Constantino. Non-extensive thermostatics: brief review and comments. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 221, n. 1, p. 277 – 290, 1995.
- 60 FERNÁNDEZ, Julio F.; ALONSO, Juan José. Ordering of dipolar ising crystals. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 62, p. 53–56, Jul 2000.
- 61 FERNANDEZ, Julio F; ALONSO, Juan J. Nonuniversal critical behavior of magnetic dipoles on a square lattice. **Physical Review B**, APS, v. 76, n. 1, p. 014403, 2007.
- 62 CORRUCINI, LR; WHITE, Steven J. Dipolar antiferromagnetism in the spin-wave approximation. **Physical Review B**, APS, v. 47, n. 2, p. 773, 1993.
- 63 DE'BELL, K.; MACISAAC, A. B.; BOOTH, I. N.; WHITEHEAD, J. P. Dipolar-induced planar anisotropy in ultrathin magnetic films. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 55, p. 15108–15118, Jun 1997.
- 64 CARBOGNANI, A.; RASTELLI, E.; REGINA, S.; TASSI, A. Dipolar interaction and long-range order in the square planar rotator model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 62, p. 1015–1021, Jul 2000. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.62.1015>.
- 65 JOSÉ, Jorge V.; KADANOFF, Leo P.; KIRKPATRICK, Scott; NELSON, David R. Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 16, p. 1217–1241, Aug 1977.
- 66 ALONSO, Juan J.; FERNÁNDEZ, Julio F. Theoretical simulation of the anisotropic phases of antiferromagnetic thin films. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 74, p. 184416, Nov 2006.

67 MÓL, LA; SILVA, RL; SILVA, RC; PEREIRA, AR; MOURA-MELO, WA; COSTA, BV. Magnetic monopole and string excitations in two-dimensional spin ice. **Journal of Applied Physics**, AIP, v. 106, n. 6, p. 063913, 2009.

68 RAPINI, M.; DIAS, R. A.; COSTA, B. V. Phase transition in ultrathin magnetic films with long-range interactions: Monte carlo simulation of the anisotropic heisenberg model. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 75, p. 014425, Jan 2007.

69 GAO, G. T.; ZENG, X. C.; WANG, Wenchuan. Vapor-liquid coexistence of quasi-two-dimensional stockmayer fluids. **Journal of Chemical Physics**, American Institute of Physics Publishing LLC, v. 106, n. 8, p. 3311–3317, 2 1997. ISSN 0021-9606.

70 RIZZI, L. G. **Simulações numéricas de Monte Carlo aplicadas no estudo das transições de fase do modelo de Ising dipolar bidimensional**. 2005. Dissertação de Mestrado, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto. Acesso em: Recuperado em 2018-09-25.

71 MÓL, Lucas Alvares da Silva. **Transições de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações dipolares**. 2009. Tese (Doutorado) — PhD thesis, UFMG, 2009.

72 SASAKI, Munetaka; MATSUBARA, Fumitaka. Stochastic cutoff method for long-range interacting systems. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 77, n. 2, p. 024004, 2008.

73 SCHREIBER, H.; STEINHAUSER, O. Molecular dynamics studies of solvated polypeptides: Why the cut-off scheme does not work. **Chemical Physics**, v. 168, n. 1, p. 75 – 89, 1992. ISSN 0301-0104.

74 SALINAS, Sílvia RA. **Introdução a física estatística vol. 09**. [S.l.]: Edusp, 1997.

75 ONSAGER, Lars. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 65, p. 117–149, Feb 1944.

76 LANDAU, David; BINDER, Kurt. **A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics**. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2005. ISBN 0521842387.

77 TEIXEIRA, João Paulo Casquilho Paulo Ivo Cortez. **Introdução à Física Estatística**. Lisboa: IST - Instituto Superior Técnico, 2011. ISBN 9789728469993.

- 78 BINDER, Kurt; HEERMANN, Dieter; ROELOFS, Lyle; MALLINCKRODT, A John; MCKAY, Susan. Monte carlo simulation in statistical physics. **Computers in Physics**, AIP, v. 7, n. 2, p. 156–157, 1993.
- 79 BERG, Bernd A. **Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis**. [S.l.]: WORLD SCIENTIFIC, 2004.
- 80 NEWMAN, M; BARKEMA, G. **Monte carlo methods in statistical physics**. [S.l.]: Oxford University Press: New York, USA, 1999.
- 81 FERRENBURG, Alan M.; SWENDSEN, Robert H. Optimized monte carlo data analysis. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 63, p. 1195–1198, Sep 1989.
- 82 ALVES, Nelsons A; BERG, Bernd A; SANIELEVICI, Sergiu. Spectral density study of the su (3) deconfining phase transition. **arXiv preprint hep-lat/9107002**, 1992.
- 83 BERG, Bernd A. Multicanonical simulations step by step. **Computer Physics Communications**, Elsevier BV, v. 153, n. 3, p. 397–406, Jul 2003.
- 84 MÓL, Lucas Alvares da Silva. **Transições de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações dipolares**. 2009. Tese (Doutorado) — PhD thesis, UFMG, 2009.
- 85 GAO, GT; ZENG, Xiao Cheng; WANG, Wenchuan. Vapor–liquid coexistence of quasi-two-dimensional stockmayer fluids. **The Journal of chemical physics**, AIP, v. 106, n. 8, p. 3311–3317, 1997.
- 86 BINDER, Kurt. Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions. **Zeitschrift für Physik B Condensed Matter**, Springer, v. 43, n. 2, p. 119–140, 1981.
- 87 FERRENBURG, Alan M.; LANDAU, D. P. Critical behavior of the three-dimensional ising model: A high-resolution monte carlo study. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 44, p. 5081–5091, Sep 1991.
- 88 KOSTERLITZ, JM. The critical properties of the two-dimensional xy model. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, IOP Publishing, v. 7, n. 6, p. 1046, 1974.
- 89 GUILLOU, J. C. Le; ZINN-JUSTIN, J. Critical exponents from field theory. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 21, p. 3976–3998, May 1980.

- 90 HOLM, Christian; JANKE, Wolfhard. Critical exponents of the classical three-dimensional heisenberg model: A single-cluster monte carlo study. **Physical Review B**, APS, v. 48, n. 2, p. 936, 1993.
- 91 LUIJTEN, E.; BLÖTE, H.W.J. Monte carlo method for spin models with long-range interactions. **Int. J. Mod. Phys**, C6, p. 359, 1995.
- 92 FUKUI, Kouki; TODO, Synge. Order-n cluster monte carlo method for spin systems with long-range interactions. **Journal of Computational Physics**, Elsevier BV, v. 228, n. 7, p. 2629–2642, Apr 2009. ISSN 0021-9991.
- 93 KAPFER, Sebastian C; KRAUTH, Werner. Cell-veto monte carlo algorithm for long-range systems. **Physical Review E**, APS, v. 94, n. 3, p. 031302, 2016.

APÊNDICES

APÊNDICE A – DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DA SOMA DE EWALD

No método de Ewald devemos considerar um conjunto de réplicas finitas do sistema tanto no espaço real quanto no espaço recíproco. Isso implica a atribuição de um corte de r_{max} e k_{max} nos somatórios, o que introduz um erro numérico no cálculo da energia. Portanto, faz-se necessário um estudo da convergência dos somatórios de modo a tentar minimizar os erros de truncamento sem, no entanto, prejudicar a eficiência do algoritmo. Além dos parâmetros r_{max} e k_{max} , temos o parâmetro α que controla a taxa de convergência dos somatórios e seu valor está relacionado com os parâmetros r_{max} e k_{max} .

Assim, para um dado conjunto de parâmetros $(\alpha, k_{max}, r_{max})$ definimos o erro absoluto da energia dipolar $E = E_{real} + E_{reciproco}$ de uma configuração de spins, como sendo [70]:

$$\varepsilon(r_{max}) = \varepsilon_{real}(r_{max}) + \varepsilon_{reciproco}(k_{max}) \quad (56)$$

com,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{real}(r_{max}) &= |E_{real}^{ref} - E_{real}(r_{max})| \\ \varepsilon_{reciproco}(k_{max}) &= |E_{reciproco}^{ref} - E_{reciproco}(k_{max})| \end{aligned}$$

onde E_{real}^{ref} e $E_{reciproco}^{ref}$ são as respectivas energias de referência no espaço real e recíproco, calculadas considerando valores muito grandes de k_{max} e r_{max} .

Procedemos, portanto, para a determinação dos parâmetros da soma de Ewald. Inicialmente devemos notar que, diferentemente do somatório no espaço recíproco, que é realizado somente uma vez a cada varredura, o somatório no espaço real é realizado a cada atualização dos spins. Assim convém fixar $r_{max} = 1$. Por conseguinte, o erro na energia passa a ser controlado pelo parâmetro α . Através dos nossos estudos numéricos, fixamos em nossas simulações $\alpha = 3$, de modo a obter um erro absoluto da ordem de 10^{-6} para todos os tamanhos de rede.

Portanto, na tabela 5 abaixo, mostramos os resultados da análise de convergência dos somatórios de Ewald para a estimativa dos parâmetros α, r_{max}, k_{max} . Os erros absolutos foram calculados conforme Eq.(56). Para cada tamanho de rede, a configuração do sistema para o cálculo da energia foi escolhida de forma aleatória. Observe que todos

os erros são menores ou da ordem de 10^{-6} , como determinamos previamente.

L	α	r_{max}	k_{max}	ε
20	3.0	1.0	87	5.31×10^{-7}
30	3.0	1.0	127	4.24×10^{-6}
40	3.0	1.0	175	1.96×10^{-6}
50	3.0	1.0	215	6.73×10^{-6}
60	3.0	1.0	285	1.02×10^{-7}
70	3.0	1.0	310	3.77×10^{-6}

Tabela 5 – Resultados da análise de convergência para a soma de Ewald. Os erros foram calculados via Eq.(56).

APÊNDICE B – ESTUDO DAS CORRELAÇÕES DAS SÉRIES TEMPORAIS

Um dos requisitos básicos nas simulações de Monte Carlo é a obtenção de configurações estatisticamente independentes para o cálculo dos valores médios das grandezas termodinâmicas. Assim, caso as séries temporais amostradas estejam correlacionadas, erros sistemáticos serão introduzidos nas estimativas. Portanto, é necessário calcular a auto-correlação das séries com o intuito de verificar se amostragem é grande o suficiente para fornecer estimativas corretas para os observáveis.

Assim, na figura (27), apresentamos os resultados para a auto-correlação $C(i)$ das séries da magnetização m obtidas em $T_c = 0.975$. A análise foi realizada somente na região crítica, pois as correlações são maiores nesta região, resultado do abrandamento crítico.

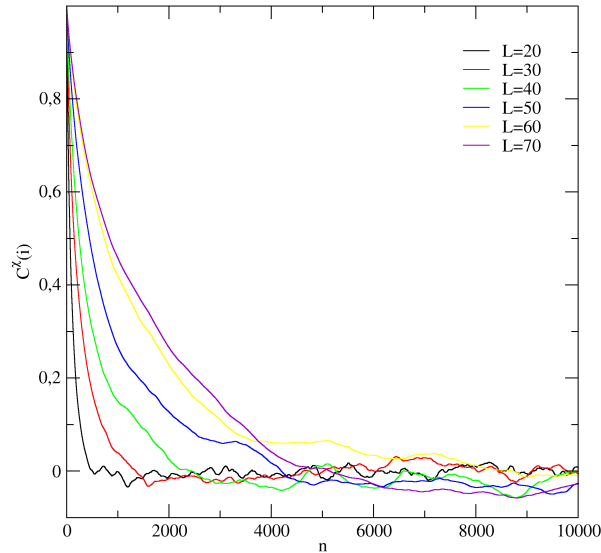


Figura 27 – Auto-correlação $C(i)$ das séries de magnetização m amostradas na região $T_c = 0.975$.

Como indicado na Fig.(28), as séries são altamente correlacionadas para pequenos valores de t . Já para valores suficientemente grandes, da ordem de 5×10^3 passos de Monte Carlo, as correlações decaem a zero rapidamente. Esse ponto é designado de tempo de autocorrelação τ e indica o número mínimo de passos para que se tenha amostras descorrelacionadas. Assim, considerando que nas simulações realizamos uma amostragem da ordem de 10^6 configurações, temos cerca de 200 configurações independentes para o cálculo das médias.

Uma estimativa mais precisa do tempo de autocorrelação τ é obtido a partir do tempo de autocorrelação integrado τ_{int} , definido na (30). Por definição, o valor de $2\tau_{int}$ fornece o número médio de passos para que uma sequência se torne descorrelacionada.

Assim, plotamos abaixo os valores de $2\tau_{int}$ correspondentes às séries temporais da magnetização obtidas à temperatura $T_c = 0.975$. A notação k foi introduzida para descrever amostras de tamanho $n_\tau = 2^k$.

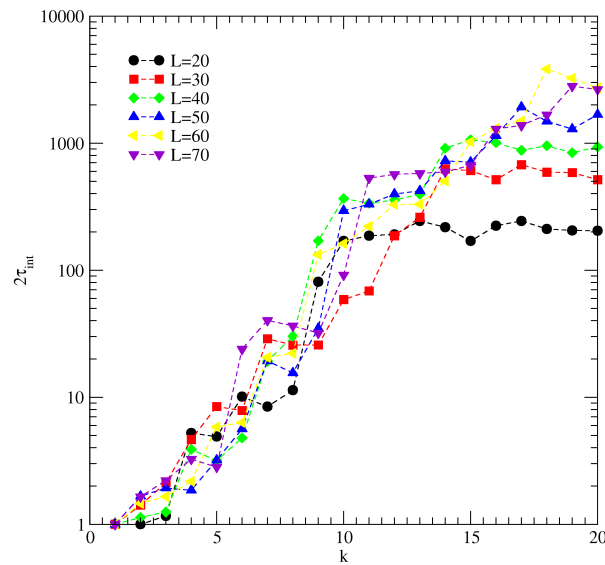


Figura 28 – Tempo de autocorrelação integrado τ_{int} correspondentes às séries temporais da magnetização obtidas à temperatura $T_c = 0.975$.

Com base no gráfico Fig. (28) acima, estimamos como resultado final para $2\tau_{int}$ o valor de 3×10^3 passos de Monte Carlo. Esse valor corresponde àquele mais alto, obtido na rede de tamanho $L = 70$. Portanto, com base nessa estimativa, concluímos que temos um número razoável de medidas independentes para o cálculo das barras de erro via Jackknife, da ordem de 100 configurações.

ANEXO

ANEXO A – ARTIGO PUBLICADO

Solid State Communications 290 (2019) 55–59



Contents lists available at ScienceDirect

Solid State Communications

journal homepage: www.elsevier.com/locate/ssc

Communication

Skyrmions and merons in two-dimensional antiferromagnetic systems

R.L. Fernandes*, R.J.C. Lopes, A.R. Pereira

Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, 36570-000, Viçosa, Minas Gerais, Brazil

ARTICLE INFO

Communicated by H. Akai

Keywords:
 Skyrmion
 Merons
 Antiferromagnet
 Spin dynamics

ABSTRACT

We have investigated (numerically) skyrmions constituted by two merons in two-dimensional Heisenberg antiferromagnets. The behavior and stability of these topological pseudo-particles are analyzed in discrete and finite lattices. The influence of lattice defects and external magnetic fields is also studied. The topological stability dictates that the two merons must be kept apart but processes of annihilation and fusion of merons are observed for finite lattices.