

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “JÚLIO DE MESQUITA FILHO”
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS

Felipe da Silva Rocha

**Simulação de uma rede de skyrmions através das equações de Landau-Lifshitz-
Gilbert com centros de aprisionamento periódicos**

Bauru

2024

Felipe da Silva Rocha

**Simulação de uma rede de skyrmions através das equações de Landau-Lifshitz-
Gilbert com centros de aprisionamento periódicos**

Dissertação apresentada como requisito para a obtenção do título de Mestre à Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” - Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Materiais, área de concentração Modelagem e Simulação em Materiais, sob a orientação do Prof. Dr. Pablo Antonio Venegas Urenda.

Bauru

2024

R672s	Rocha, Felipe Simulação de uma rede de skyrmions através das equações de Landau-Lifshitz-Gilbert com centros de aprisionamento periódicos / Felipe Rocha. -- Bauru, 2024 90 p. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Faculdade de Ciências, Bauru Orientador: Pablo Urenda 1. Física. 2. Skyrmion. 3. Nanomagnetismo. 4. LLG. I. Título.
-------	---

ATA DA DEFESA PÚBLICA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE FELIPE DA SILVA ROCHA, DISCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE MATERIAIS, DA FACULDADE DE CIÊNCIAS - CÂMPUS DE BAURU.

Aos 30 dias do mês de outubro do ano de 2024, às 10:00 horas, por meio de Videoconferência, realizou-se a defesa de DISSERTAÇÃO DE MESTRADO de FELIPE DA SILVA ROCHA, intitulada "**Simulação de uma rede de skyrmions através das equações de Landau-Lifshitz-Gilbert com centros de aprisionamento periódicos**"

. A Comissão Examinadora foi constituída pelos seguintes membros: Prof. Dr. PABLO ANTONIO VENEGAS URENDA (Orientador(a) - Participação Virtual) do(a) Departamento de Física / Faculdade de Ciências - Unesp/ Câmpus de Bauru, Prof. Dr. RICARDO LOPES DA SILVA (Participação Virtual) do(a) Departamento de Ciências Naturais / Universidade Federal do Espírito Santo, Prof. Dr. PAULO NORONHA LISBOA FILHO (Participação Virtual) do(a) Departamento de Física / Faculdade de Ciências - Unesp/Câmpus de Bauru. Após a exposição pelo mestrando e arguição pelos membros da Comissão Examinadora que participaram do ato, de forma presencial e/ou virtual, o discente recebeu o conceito final: Aprovado . Nada mais havendo, foi lavrada a presente ata, que após lida e aprovada, foi assinada pelo(a) Presidente(a) da Comissão Examinadora.

Prof. Dr. PABLO ANTONIO VENEGAS URENDA

Documento assinado digitalmente
 PABLO ANTONIO VENEGAS URENDA
Data: 30/10/2024 11:47:28-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Agradecimentos

Agradeço a todos que me apoiaram no período de desenvolvimento desta pesquisa. Existem os que apoiam de forma indireta, tendo paciência com os períodos de dificuldade, entendendo a falta de disponibilidade e, por vezes, até acompanhando por horas a fio a pesquisa sendo realizada. Neste grupo, incluo desde amigos e familiares até companheiras amorosas que passaram por minha vida neste período. Agradeço também o suporte e apoio das instituições envolvidas direta ou indiretamente como a Unesp, a Fapesp (Fundação de Amparo e Pesquisa do estado de São Paulo) e o POSMAT que fornecem toda a estrutura necessária para a existência de nosso grupo de pesquisa. Para aqueles que me ajudaram de forma direta no esclarecimento de dúvidas e na disponibilidade para as infinitas reuniões deixo nominalmente meu agradecimento: Nicolas, José e Maicon, colegas de laboratório que sempre se mostraram solícitos e disponíveis para me apoiar, assim como meu orientador professor Dr Pablo Antonio Venegas Urenda pela paciência e disponibilidade sempre que precisei. Agradeço também ao professor Dr Ricardo Silva pelas sugestões logo no início do trabalho e aos professores Dr. Charles Reichhardt e Dra. Cynthia J. O. Reichhardt pelo auxílio na publicação do artigo que esta pesquisa originou.

“Não devemos dizer à natureza o que ela deve ser... Ela sempre tem uma imaginação melhor que a nossa.” — Richard Feynman

ROCHA, Felipe da Silva. Título do trabalho: **Simulação de uma rede de skyrmions através das equações de Landau-Lifshitz-Gilbert com centros de aprisionamento periódicos**. 2024. 104f, Dissertação (Mestre em ciência e tecnologia de Materiais) - Universidade Estadual Paulista - UNESP, Faculdade de Ciências, Bauru - SP. 2024.

Resumo

Usando simulações atomísticas, foi investigado o transporte e a aniquilação de skyrmions interagindo com centros de aprisionamento em formato de funil sob uma corrente de spins polarizados aplicada perpendicularmente ao seu eixo. Descobriu-se que o transporte sem aniquilação é possível em correntes baixas, quando o movimento é dominado por interações skyrmion-skyrmion e os skyrmions empurram uns aos outros através da abertura do funil. A aniquilação dos skyrmions ocorre para correntes mais altas quando os skyrmions na metade superior da amostra exercem pressão sobre os skyrmions na metade inferior da amostra devido à corrente aplicada. Ao interagir com a parede do funil, os skyrmions sofrem uma redução de tamanho que facilita sua passagem pela abertura do funil. Foram encontradas cinco fases em função da corrente aplicada e do tamanho da abertura do funil: (i) estática, (ii) transporte sem aniquilação, (iii) transporte com aniquilação, (iv) aniquilação completa e (v) uma fase estática reentrante que ocorre apenas para aberturas muito estreitas. Os resultados desta pesquisa fornecem informações úteis sobre como controlar o transporte de skyrmions usando matrizes de funil, delineando regimes nos quais o transporte de skyrmions é possível, bem como as condições sob as quais ocorre a aniquilação.

Palavras-chave: Skyrmion, Nanomagnetismo, Equação LLG, Spintrônica, Efeito Hall, Força de Magnus.

ROCHA, Felipe da Silva. Título do trabalho: **Simulação de uma rede de skyrmions através das equações de Landau-Lifshitz-Gilbert com centros de aprisionamento periódicos**. 2024. 104f, Dissertação (Mestre em ciência e tecnologia de Materiais) - Universidade Estadual Paulista - UNESP, Faculdade de Ciências, Bauru - SP. 2024.

Abstract

Using atomistic simulations, we investigated the transport and annihilation of skyrmions interacting with a funnel array under a spin polarized current applied perpendicular to the funnel axis. We found that transport without annihilation is possible at low currents when the motion is dominated by skyrmion-skyrmion interactions and skyrmions push each other through the funnel opening. Skyrmion annihilation occurs for higher currents when skyrmions in the upper half of the sample exert pressure on skyrmions in the bottom half of the sample due to the external current. Upon interacting with the funnel wall, the skyrmions undergo a size reduction that makes it easier for them to pass through the funnel opening. Five dynamic phases were found as a function of the applied current and the size of the funnel opening: (i) pinned, (ii) transport without annihilation, (iii) transport with annihilation, (iv) complete annihilation, and (v) a reentrant pinning phase that only occurs for very narrow openings. The findings on this research provide insight into how to control skyrmion transport using funnel arrays by delineating regimes in which transport of skyrmions is possible as well as the conditions under which annihilation occurs.

Keywords: Skyrmion, Nanomagnetism, LLG Equation, Spintronics, Hall Effect, Magnus Force.

Sumário

1 INTRODUÇÃO	8
1.1 Motivação	8
1.2 Fundamentação	8
1.3 Objetivos.....	16
2 SKYRMIONS: HISTÓRICO	17
2.1 Skyrmions em materiais não centrossimétricos	21
2.2 Skyrmions e correntes	26
2.3 Mecanismos de pinning	26
2.4 Dispositivos spintrônicos baseados em skyrmions.....	29
3 SKYRMIONS: REVISÃO TEÓRICA	32
3.1 Formação de skyrmions.....	32
3.2 Interações Magnéticas	33
3.2.1 Interação de Troca de Heisenberg	34
3.2.3 Interação de Dzyaloshinskii-Moriya	40
3.2.4 Interação Zeeman	42
3.2.5 Interação com Anisotropia Magnética.....	43
3.2.6 Hamiltoniano	44
3.3 Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert	45
4 MODELO, SIMULAÇÃO E MÉTODOS	49

4.1 Modelo Atomístico	49
4.2 Simulações	51
5 RESULTADOS	55
5.1 Transporte de Skyrmions	55
5.2 Aniquilação de Skyrmions	57
5.3 Corrente de transporte	60
5.4 Abertura do Funil	62
6 CONCLUSÃO	69
7 REFERÊNCIAS	72
APÊNDICE A – COMPLEMENTO AO CAPÍTULO 5	84
A1 Monte Carlo	84
A2 Simulated Annealing	86
A3 Minimizações	87

1 INTRODUÇÃO

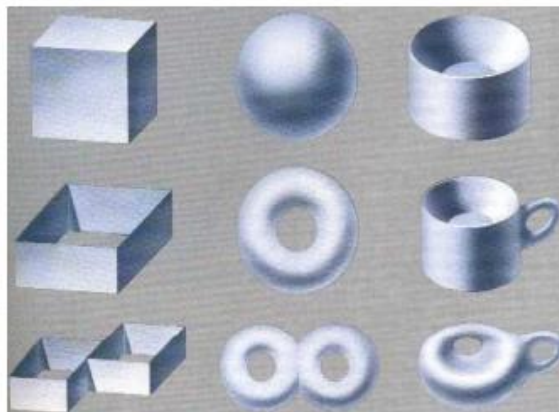
1.1 Motivação

Sistemas magnéticos são uma parte fundamental do nosso cotidiano, sendo encontrados em diversas aplicações como discos rígidos, cartões de crédito, dispositivos de ressonância magnética, sensores magnéticos e outros tipos de memórias utilizadas em computação. No entanto, a tecnologia atual enfrenta diversos desafios, como por exemplo, a dificuldade cada vez maior em miniaturizar os componentes e a dissipação de calor que pode comprometer o desempenho e a longevidade destes dispositivos, apenas para citar dois exemplos. Sendo assim, estes sistemas são amplamente estudados em Física da matéria condensada devido aos diversos tipos de excitações coletivas que surgem, tais como vórtices e skyrmions, que se mostram promissoras para aplicações tecnológicas futuras. Neste trabalho estamos interessados em investigar a formação de skyrmions, bem como sua dinâmica e suas interações a fim de propor ideias que contribuam para a criação de novos dispositivos spintrônicos, os quais podem oferecer alternativas para alguns destes problemas.

1.2 Fundamentação

Os skyrmions foram propostos inicialmente pelo físico Tony Skyrme para explicar a estabilidade de Hádrons ¹. O cientista propôs um modelo em física nuclear para desenvolver uma teoria de campo não linear e descrever configurações localizadas que se assemelham e podem ser descritas como partículas (as chamadas quase-partículas). Skyrme propôs que estas configurações localizadas de campo seriam topologicamente protegidas e estáveis (não decairiam com facilidade). Esta característica de estabilidade topológica pode ser explicada por um ramo da matemática, a topologia, que estuda como espaços podem ser continuamente deformados até serem transformados em espaços equivalentes, desde que possuam uma equivalência topológica. Por exemplo: Um toroide não pode ser continuamente deformado até se transformar em uma esfera (o toroide contém um furo, enquanto a esfera não). A Figura 1.1 demonstra a equivalência topológica entre diferentes objetos.

Figura 1.1 - Objetos topologicamente equivalentes.



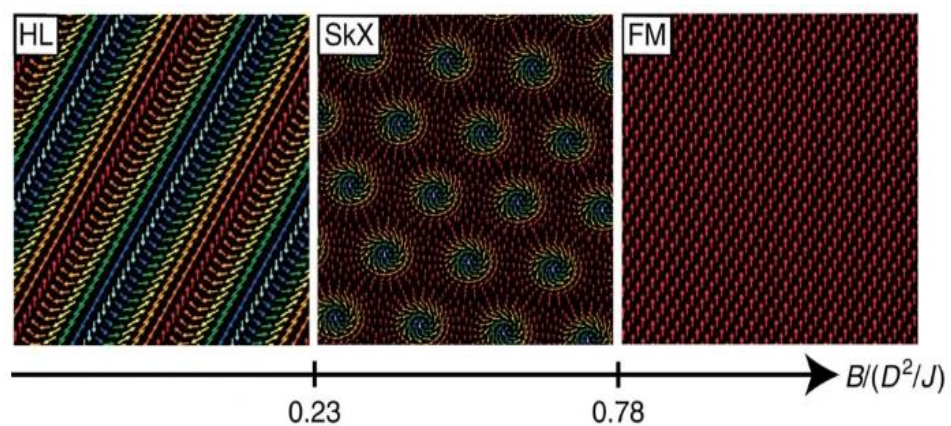
Fonte: Página da web Prof. Bertolo – Propriedades do espaço ².

Legenda: Gênero 0 (não possuem buraco, primeira linha), gênero 1 (um buraco, segunda linha) e gênero 2 (dois buracos, última linha). Neste caso, ao se deformar um objeto até chegar em outro do mesmo gênero, o número de buracos não se altera.

A passagem de uma determinada configuração topológica para outra demanda um alto custo energético, por isso é dito que os skyrmions são topologicamente protegidos. Este mesmo tipo de solução para modelos não lineares e topologicamente estáveis com energia finita começou a aparecer em outras áreas da Física. Mais tarde, o conceito original foi expandido para diversos tipos de sistemas de matéria condensada, tais como condensados de Bose-Einstein, fases de cristal líquido, sistemas fotônicos, entre outros ¹. Os skyrmions também podem ser definidos como configurações magnéticas, onde a direção dos spins varia suavemente ao longo do espaço, formando padrões complexos que possuem estabilidade topológica, vorticidade e helicidade. Bogdanov *et al.* ³ e Rössler *et al.* ⁴ propuseram a ideia teórica de skyrmions como texturas magnéticas. A primeira observação experimental de uma rede de skyrmions em um material magnético quiral foi feita em 2009 através de experimentos de espalhamento de nêutrons realizados por Mühlbauer *et al.* ⁵ no magneto quiral MnSi e revelaram através de imagens diretas a presença de uma rede hexagonal e bidimensional de skyrmions. Posteriormente, os skyrmions magnéticos também foram observados em filmes finos devido à competição entre a interação de Dzyaloshinskii-Moriya (a partir de agora chamada de interação DM) e a interação de troca de Heisenberg ⁶ presente em magnetos quirais, os quais são materiais cristalinos com ausência de inversão espacial de simetria, como os compostos do grupo B20 e outras ligas como o MnSi e o FeGe, por exemplo. Nestes materiais, a interação DM tem origem no forte acoplamento spin-órbita e favorece um comportamento

não colinear dos spins, o que entra em oposição ao comportamento exercido pela interação de troca clássica do modelo de Heisenberg. A competição entre estas duas interações favorece a formação de estados helicoidais na ausência de um campo magnético externo aplicado, porém com a adição da interação com o campo magnético, o estado helicoidal é destruído e o estado de skyrmions é favorecido. Caso o campo seja forte o suficiente, o sistema migra para o estado ferromagnético onde os spins se alinham ao campo aplicado. As três fases estão representadas a seguir na Figura 1.2.

Figura 1.2 - Diagrama de fases obtido via simulação computacional para um sistema com parâmetros que permitem a formação de skyrmions



Fonte: Iwasaki; Mochizuki; Nagaosa (2013) ⁷.

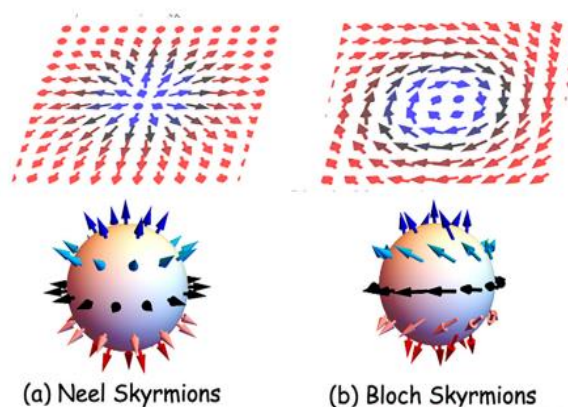
Legenda: A razão entre a constante de Dzyaloshinskii-Moriya (D) e a constante de troca J equivale a $D/J = 0.18$. O valor da temperatura é $T = 0$ em função do campo magnético B aplicado na ausência de impurezas (*pinnings*) representando os estados Helicoidal (HL), Cristais de Skyrmions (SkX) Ferromagnético.

Em magnetos quirais o tamanho dos skyrmions pode variar entre 3 e 100 nm, este tamanho é determinado pela razão entre as constantes das interações DM e da interação de troca (D/J). Caso D seja grande, a rotação dos spins é favorecida, reduzindo o tamanho do skyrmion ⁸. As redes hexagonais de skyrmions também já foram encontradas em filmes finos de $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$ ⁹. Esta configuração se dá devido a interação repulsiva entre os skyrmions, semelhante ao que acontece com uma rede de vórtices de Abrikosov em supercondutores do tipo II ¹⁰.

Os skyrmions magnéticos podem ser entendidos como nanoestruturas semelhantes aos vórtices em que os momentos de dipolo magnético giram progressivamente com quiralidade fixa, dos quais existem dois tipos mais comuns encontrados na literatura: skyrmions do tipo

Néel (Figura 1.3a) e skyrmions do tipo Bloch (Figura 1.3b) que correspondem a diferentes tipos de simetria de interação entre os spins.

Figura 1.3 - Representação das diferentes orientações de uma rede de skyrmions e suas projeções no plano bidimensional



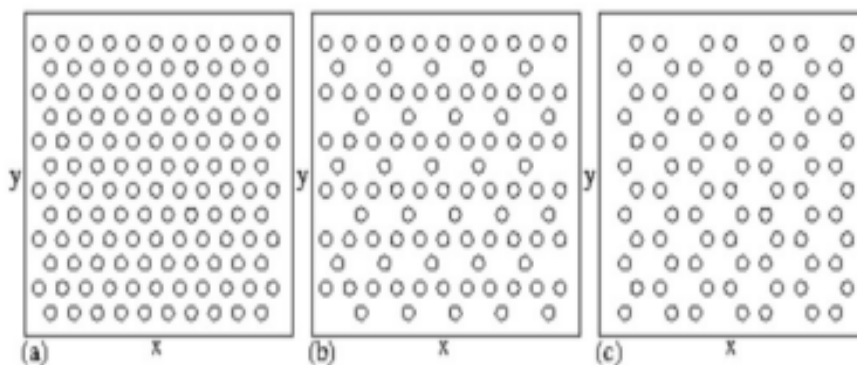
Fonte: Adaptado de Vakili *et al.* (2021) ¹¹.
 Legenda: Em (a) Skyrmion do tipo Néel e em (b) Skyrmion do tipo Bloch.

A interação DM é a responsável por transmitir a quiralidade do cristal através das estruturas de spin, o que pode resultar em diferentes direções de rotação. A quiralidade é uma propriedade da estrutura que determina se esta estrutura pode ser sobreposta à sua imagem especular, semelhante ao que observamos entre a mão direita e a mão esquerda. No caso de estruturas magnéticas, esta propriedade influencia a orientação e o comportamento dos momentos magnéticos, o que pode resultar em configurações específicas, como por exemplo, os skyrmions. Apesar das semelhanças entre vórtices e skyrmions, existe uma diferença fundamental: Em vórtices, a força de Magnus pode ser desprezada ¹², enquanto nos skyrmions, é uma força que tem importância fundamental para descrever seu comportamento dinâmico. Uma das consequências da contribuição da força de Magnus é o aparecimento do efeito Hall de skyrmions (SkHE - *Skyrmion Hall effect*), no qual o skyrmion sofre uma deflexão em um ângulo característico do sistema (ângulo Hall) em relação à direção da força aplicada. Sendo assim, a força de Magnus afeta as interações entre os skyrmions assim como a trajetória dos mesmos, o que se torna um empecilho para a utilização dos skyrmions em determinados tipos de dispositivos, como as memórias do tipo *racetrack* (RT) que são estruturas no formato de trilhas estreitas por onde o skyrmion se movimenta.

Neste tipo de dispositivo, devido à deflexão que o skyrmion sofre em sua trajetória, ele se encaminha para a borda do material, onde é aniquilado. Isto inviabiliza sua utilização, portanto, é de suma importância entender como controlar esta trajetória. Existem algumas técnicas possíveis para isso, como por exemplo a utilização de centros de aprisionamentos (centros de *pinning*)¹³⁻¹⁶.

Sistemas de skyrmions interagindo com diversas estruturas de *pinning*s já foram estudados usando o modelo de partículas,¹⁷ baseado na aproximação de Thiele¹⁸. Além de ter sido utilizado para simular skyrmions, este modelo também foi utilizado em trabalhos anteriores para outros tipos de sistemas, como coloides^{19,20} e vórtices supercondutores^{16,19,21,22}. Porém, como citado anteriormente, em sistemas de skyrmions a presença da força de Magnus acrescenta novas nuances a estas análises, e apesar de existir uma série de pesquisas envolvendo skyrmions, interagindo com diferentes tipos de *pinning*s, tais como: *pinning*s periódicos^{23,24}, aleatórios²⁵⁻²⁸ e lineares^{25,29-31}, novos estudos ainda são necessários.

Figura 1.4 - Exemplo de redes de *pinning*s periódicas: a) triangular, b) kagomé, c) *honeycomb*



Fonte: Reichhardt; Reichhardt (2007)³².

Nos últimos anos, o estudo destas estruturas tem despertado grande interesse; a fim de descrever estes sistemas em maiores detalhes considera-se a dinâmica de magnetização, descrita pelas equações de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG). Estas são equações fenomenológicas amplamente utilizadas em magnetismo. É interessante ressaltar que a abordagem utilizando LLG pode fornecer maiores detalhes sobre a estrutura do skyrmion a nível microscópico. Ao se comparar o modelo LLG com o modelo de partículas, nota-se que no primeiro o skyrmion é considerado um corpo rígido, o que faz com que os cálculos não levem em consideração efeitos como a aniquilação e a deformação dos skyrmions. Já no modelo LLG, o skyrmion não é

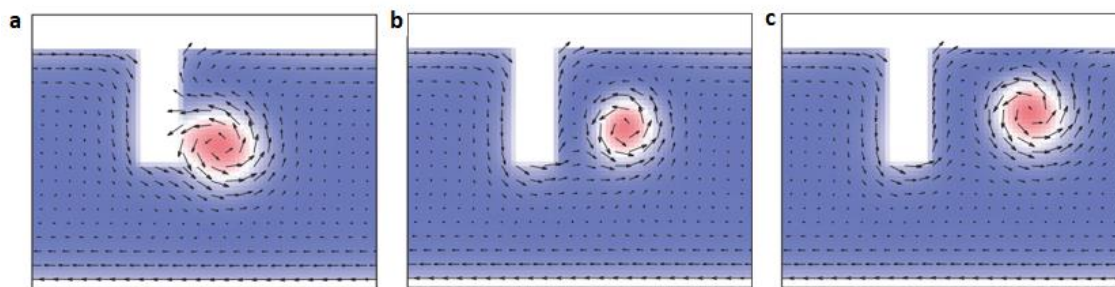
considerado um corpo rígido, o que faz com que os efeitos de aniquilação e deformação possam ser observados.

De maneira geral, a configuração dos spins que dá origem aos skyrmions, pode ser explicada através de uma equação vetorial, utilizada na descrição do movimento de precessão da magnetização em sólidos ³³ e que será detalhada na seção 3. Muitas questões ainda carecem de um aprofundamento maior no que diz respeito à dinâmica e a formação de skyrmions, e considerando seu potencial para aplicação em dispositivos spintrônicos e no campo da Spintrônica, torna-se importante ampliar o conhecimento vigente sobre sua estrutura e suas interações. É importante a realização de simulações de skyrmions interagindo com redes de *pinnings* de diferentes geometrias, já que isso pode elucidar os mecanismos que regem estas interações e apontar possíveis métodos para controlar com maior precisão a movimentação dos skyrmions, o que é de grande importância no desenvolvimento de dispositivos spintrônicos no futuro.

Para a criação a criação destes novos dispositivos, também é necessário compreender os processos de criação e aniquilação dos skyrmions, a fim de que seja possível efetuar as operações de escrita e leitura em novas memórias baseadas nestas tecnologias. É possível, por exemplo, criar skyrmions em escala nanométrica a partir da aplicação de campos elétricos locais ³⁴. A polaridade da tensão aplicada fornece uma maneira de mudar entre os processos de criação e de aniquilação.

Tão importante quanto entender os processos de criação e aniquilação dos skyrmions é entender também a sua dinâmica e, consequentemente, as técnicas para o controle de sua trajetória. Além das já citadas redes de *pinnings* periódicas, existem outras propostas com diferentes tamanhos e geometrias de *pinnings*. A estrutura demonstrada na Figura 1.5 ³⁵ se utiliza de um *pinning* em forma de entalhe quadrado para interagir com o skyrmion, sendo que este é apenas um dentre vários exemplos possíveis.

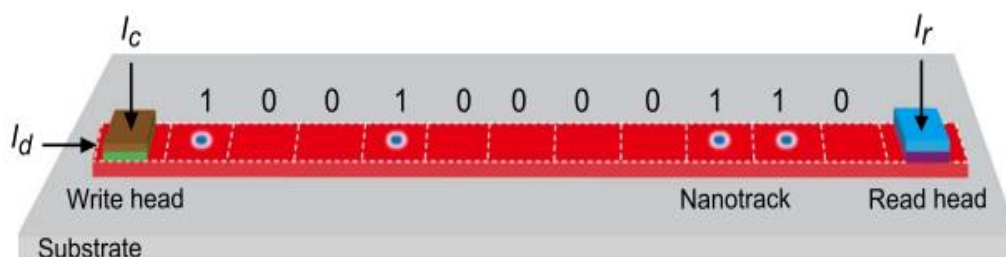
Figura 1.5 - Capturas de tela de um skyrmion criado por torque de transferência de spin induzido por corrente ao redor de um entalhe



Fonte: Iwasaki; Mochizuki; Nagaosa. (2013) ³⁵.

Outro ponto importante acerca da aplicação tecnológica de skyrmions envolve a sua estabilidade. Apesar de serem topologicamente estáveis ³⁶, eles podem ser destruídos quando submetidos a variações de energia fortes o suficiente, ou ainda, perder sua proteção topológica transformando-se em outras estruturas. Um exemplo é o que acontece nas memórias do tipo RT onde o deslocamento para a borda gera uma grande instabilidade nos skyrmions ³⁷. Bessarab ³⁸ propôs um método para caracterizar a transição em sistemas magnéticos que é baseado no caminho de mínima energia e Rohart ³⁹ fez estudos pioneiros sobre a estabilidade de skyrmions do tipo Néel isolados. O entendimento da estabilidade e da transição de fase dos skyrmions pode ser determinante para encontrar valores adequados de corrente e campo que permitam que os skyrmions funcionem como portadores de informação. Além dos dispositivos *racetrack* baseadas em skyrmions (SK-RM, *skyrmions racetrack memories*) existem propostas de transistores de skyrmions ⁴⁰ e portas lógicas baseados nas operações *and* e *or* ⁴¹ sobre os quais pode ser construída uma arquitetura lógica para operações computacionais. Estes são apenas alguns exemplos de dispositivos que podem ser obtidos dentro deste novo ramo. A Figura 1.6 ⁴² apresenta um modelo de dispositivo baseado em skyrmions.

Figura 1.6 - Esquema típico de um dispositivo do tipo SK-RM, composto por um dispositivo de gravação para a criação do skyrmion, uma nano-faixa para seu movimento, um cabeçote de leitura para a sua detecção e circuitos CMOS (*Complementary Metal-Oxide-Semiconductor*) periféricos



Fonte: Kang et al. (2016) ⁴².

É possível observar então que os estudos envolvendo skyrmions podem contribuir para um grande avanço na indústria da computação, visto que a miniaturização utilizando transistores convencionais é cada vez mais difícil de alcançar. A dissipação de calor da atual indústria computacional gera preocupações com o impacto ambiental e a projeção feita por Moore ⁴³ vem se mostrando cada vez mais próxima de seu limite. A fim de contribuir com o avanço tecnológico dos dispositivos spintrônicos baseados em skyrmions e com um melhor entendimento de sua dinâmica de magnetização, este trabalho teve como principal objetivo estudar a movimentação de um conjunto de skyrmions através da aplicação de uma corrente de spins polarizada. Os skyrmions foram submetidos à interação com defeitos anisotrópicos em formato de funil. A geometria dos defeitos foi proposta com o objetivo de determinar as correntes críticas e os regimes dinâmicos do sistema, e com isso, propor uma faixa de parâmetros onde seja possível exercer controle sobre o movimento dos skyrmions, o que é necessário para aplicações tecnológicas. Para isso, foram executadas simulações do comportamento dinâmico do sistema, baseadas no modelo atômico da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert com termo de transferência de torque de spin. Houve também uma fase de testes prévia, que teve por finalidade ampliar a compreensão do Hamiltoniano do sistema que seria estudado, e teve como principal objetivo, o de confirmar resultados já conhecidos da literatura (obtenção da fase helicoidal e da fase de skyrmions, conforme representado na Figura 1.2) através da técnica *Simulated Annealing* ⁴⁴ com o intuito de minimizar a energia do sistema utilizando diferentes conjuntos de parâmetros.

A dissertação está dividida da seguinte forma: No capítulo 1 foi feita uma breve introdução e contextualização do tema; no capítulo 2 é feito um histórico sobre os skyrmions

magnéticos; O capítulo 3 apresenta uma revisão teórica, conceitos sobre a formação de skyrmions, interações do Hamiltoniano e a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert; O capítulo 4 trata do modelo utilizado nos cálculos; e o capítulo 5 apresenta os resultados obtidos. Nos capítulos 6 e 7 são apresentadas as considerações finais e as referências respectivamente. O Apêndice A aborda a fase de testes envolvendo *Simulated Annealing* a fim de complementar as informações trazidas no capítulo 5.

1.3 Objetivos

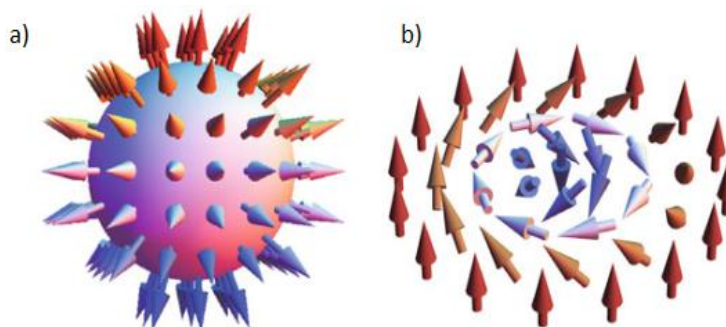
O campo da skyrmiônica que vem surgindo nos últimos anos é baseado na ideia de que os skyrmions podem ser utilizados como transportadores de informação. Nos dispositivos que se busca construir, existe a possibilidade de utilizar os skyrmions como bits (em analogia com a computação clássica) para armazenar informações ^{8,45}. A ideia se baseia na presença (ou ausência) do skyrmion como fator que determina o estado do bit. Simulações também indicam que skyrmions podem ser movimentados mediante a aplicação de baixas correntes de spins polarizados e interagir com defeitos presentes nas amostras do material ^{7,13,14}. Tendo em vista as diversas possibilidades que este campo vem demonstrando, o trabalho apresentado nesta dissertação tem como objetivo simular a interação de skyrmions com uma rede de defeitos com geometria em formato de funil, submetida a aplicação de uma corrente de spins polarizados, a fim de que se possa analisar as fases dinâmicas em função dos parâmetros do sistema. Com isto, é esperado que nossos resultados possam contribuir com a construção de novos dispositivos spintrônicos baseados em skyrmions.

2 SKYRMIONS: HISTÓRICO

O conceito de skyrmions foi utilizado pela primeira vez por Tony Skyrme para descrever quase-partículas na área de física nuclear ¹. Estas quase-partículas são caracterizadas por possuírem estabilidade e proteção topológica.

Devido à existência de objetos matemáticos similares em outras áreas da física, o termo skyrmion migrou de sua área original para outras, como, por exemplo, a área de física da matéria condensada. Alguns exemplos de sistemas físicos e pesquisas envolvendo skyrmions são: cristais líquidos ⁴⁶, condensado de Bose-Einstein ⁴⁷ e sistemas onde ocorre efeito Hall quântico ⁴⁸. Com o avanço do desenvolvimento teórico, alguns estudos demonstraram que quase-partículas com proteção topológica poderiam aparecer em magnetos quirais na forma de texturas de spins ^{3,4}. Este fato foi confirmado experimentalmente através da observação das mesmas em laboratório no ano de 2009 ⁶. Desde então, os skyrmions têm estado no centro das pesquisas deste novo campo chamado de Spintrônica e despertam interesse na criação de novos dispositivos spintrônicos. O tipo de skyrmion proposto por Skyrme pode ser visto na Figura 2.1:

Figura 2.1 – Representação do skyrmions original proposto por Tony Skyrme



Fonte: Adaptada de Seki *et al.* (2016), pág. 2 ⁴⁹.

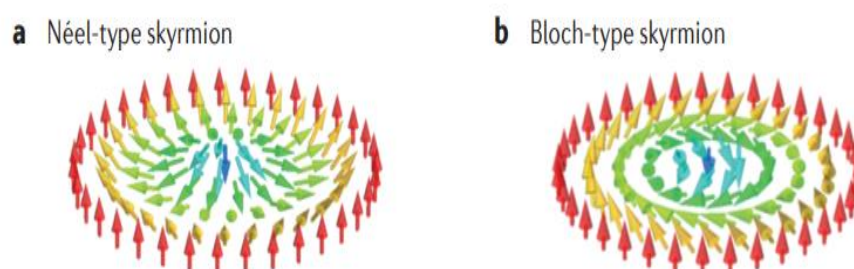
Legenda: a) Representação esquemática do skyrmion do tipo *hedgehog* (ouriço) proposto por Tony Skyrme em 1960 cujos vetores magnetização apontam em todas as direções envolvendo a esfera. b) Representação esquemática de um skyrmion do tipo *hedgehog* descoberto em magnetos quirais, que corresponde a projeção do item a) no plano 2D.

Os skyrmions do tipo Néel (Figura 2.2a) e Bloch (Figura 2.2b) são mais facilmente encontrados. A diferença entre eles consiste em sua simetria e na forma como os spins interagem, além dos tipos de materiais onde são observados. Sendo que os skyrmions do tipo Bloch são observados em materiais do tipo Bulk e os skyrmions do tipo Néel são observados

em filmes finos. Na maioria dos casos a interação DM é a principal responsável pela formação dos skyrmions e é neste mecanismo que esta dissertação se baseia (apesar da existência de outros meios para a formação dos skyrmions).

Inicialmente, redes de skyrmions foram observadas primeiro em materiais do tipo bulk do grupo B20 ⁵ e depois em filmes finos de magnetos quirais ⁹, como o MnSi ^{5,50} e o FeGe ^{21,51}, compostos comumente encontrados na literatura. Até então, a especificidade destes materiais restringia os tipos de sistemas viáveis para a observação de skyrmions. Porém em 2011, os skyrmions passaram a ser observados em filmes ultrafinos formados a partir de crescimento epitaxial em metais pesados que estavam sujeitos a uma grande interação DM induzida pela quebra de inversão de simetria e um forte acoplamento spin-órbita devido à proximidade com o metal pesado ⁵². Os primeiros sistemas investigados que envolviam a formação de redes de skyrmions do tipo Néel eram monocamadas de Fe e Ir(111), onde redes de skyrmions em nano escala foram encontradas através da técnica de microscopia de tunelamento de varredura ⁵².

Figura 2.2 - Representação esquemática dos tipos de skyrmions mais comuns na literatura

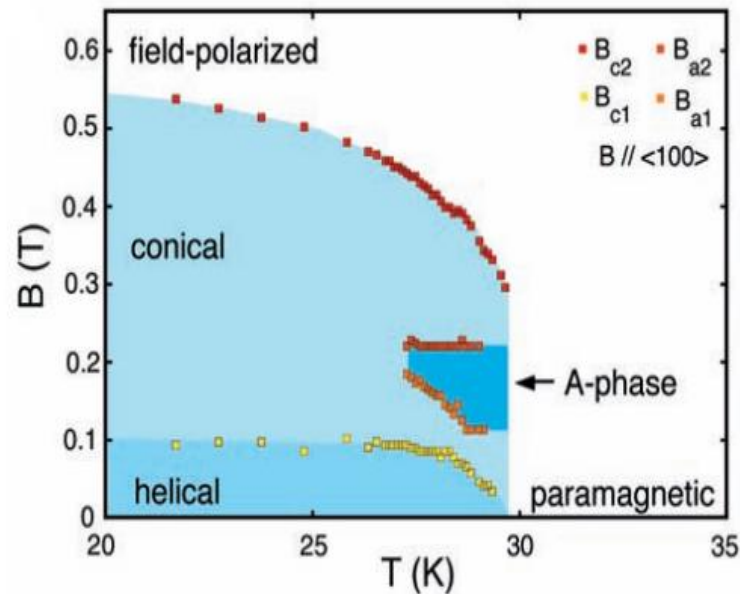


Fonte: Adaptado de Fert; Reyren; Cros (2017) ⁵³.

Legenda: a) Skyrmion do tipo Néel e b) Skyrmion do tipo Bloch.

Várias técnicas podem ser empregadas na detecção de skyrmions, algumas delas são: espalhamento de nêutrons ⁵, microscopia de tunelamento de varredura de spin-polarizada ⁵⁴ e a detecção através da voltagem Hall (em bulks magnéticos) ⁵⁵. O diagrama de fases do MnSi obtido através da técnica de espalhamento de nêutrons pode ser observado na Figura 2.3.

Figura 2.3 - Diagrama de fase da liga MnSi obtida utilizando espalhamento de nêutrons



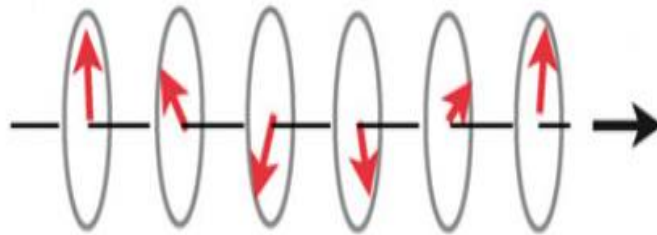
Fonte: Mühlbauer *et al.* (2009) ⁵.

Legenda: : *A-phase* (fase A) é onde se localizam os skyrmions. É importante ressaltar que a fase cônica só aparece em materiais do tipo Bulk.

O principal mecanismo para a formação dos skyrmions estudados neste trabalho está relacionado com a competição entre a interação DM e a interação de troca.

Em redes de magnetos quirais sem inversão de simetria como os componentes da família B20 (MnSi, FeGe), somente a interação DM atuando sozinha favorece um alinhamento dos spins em um ângulo de 90°, enquanto a interação de troca favorece um alinhamento colinear dos spins. Como resultado desta diferença, um ordenamento helicoidal dos spins é formado, conforme pode ser visto na Figura 2.4. Este estado apresenta-se na ausência de um campo magnético externo ^{3-5,56} e em caso de aplicação de um campo magnético fraco (o suficiente para não destruir as texturas de spins), os skyrmions aparecem na forma de vórtices. É válido ressaltar que em um skyrmion a magnetização é paralela ao campo aplicado em sua periferia, mas antiparalelo ao seu centro (Figura 2.4).

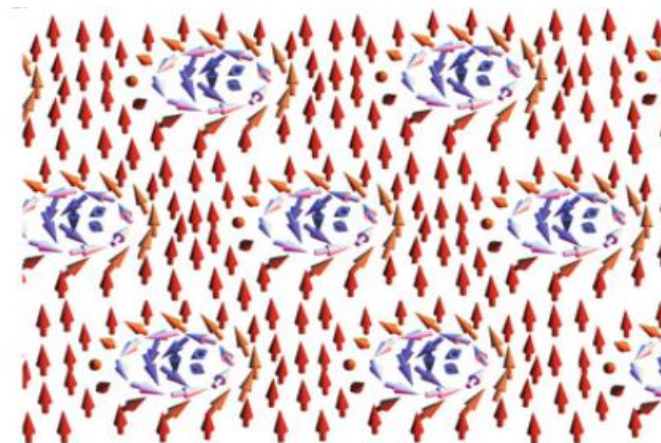
Figura 2.4 - Representação esquemática do comportamento dos spins em uma rede helicoidal.



Fonte: Adaptada de Seki *et al.* (2016), pág. 2 ⁴⁹.

A projeção no plano 2D deste skyrmion que surge é protegida topologicamente. Os skyrmions normalmente formam uma rede hexagonal também chamada de rede cristalina conforme mostrado na Figura 2.5. As magnetizações também podem se alinhar formando estruturas semelhantes a tubos. Os skyrmions em redes de magnetos quirais podem ter tamanhos que variam de 3 *nm* até 100 *nm* dependendo da razão entre a constante de Dzyaloshinskii-Moriya D e a constante de troca ferromagnética J .

Figura 2.5 - Representação esquemática de uma rede hexagonal de spins encontrada em magnetos quirais



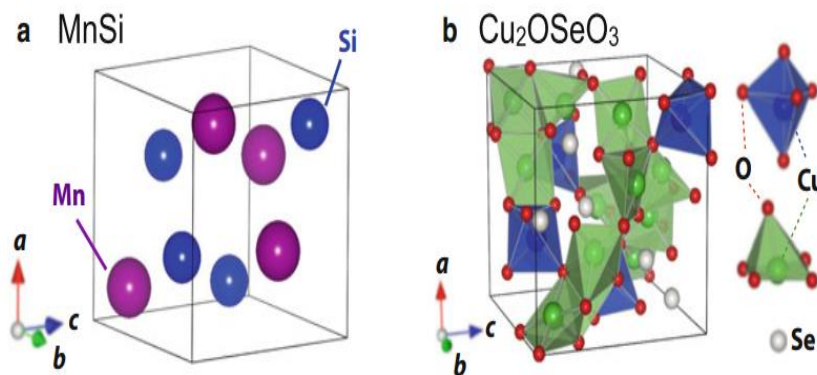
Fonte: Adaptada de Seki *et al.* (2016), pág. 2 ⁴⁹.

2.1 Skyrmions em materiais não centrossimétricos

Os skyrmions que serão descritos neste trabalho são encontrados em ferromagnetos com falta de inversão de simetria ^{3,4,56}. Nesta classe de materiais, as observações de skyrmions têm sido feitas para ferromagnetos e ferrimagnetos quirais com simetria cúbica. Alguns exemplos destes materiais são séries de semicondutores metálicos ou semicondutores das ligas da família B20 como MnSi ^{5,57-60}, Fe_{1-x}Co_xSi ^{9,61}, FeGe ²¹ e o Mn_{1-x}Fe_xGe ⁶².

Em comum estes materiais possuem a simetria de sua rede, a qual é representada pela Figura 2.6 tomando como exemplo o MnSi e o Cu₂OSeO₃ (que apesar de ser um isolante, comporta texturas do tipo skyrmion).

Figura 2.6 - Representação esquemática da estrutura cristalina de elementos pertencentes ao grupo P2₁3.

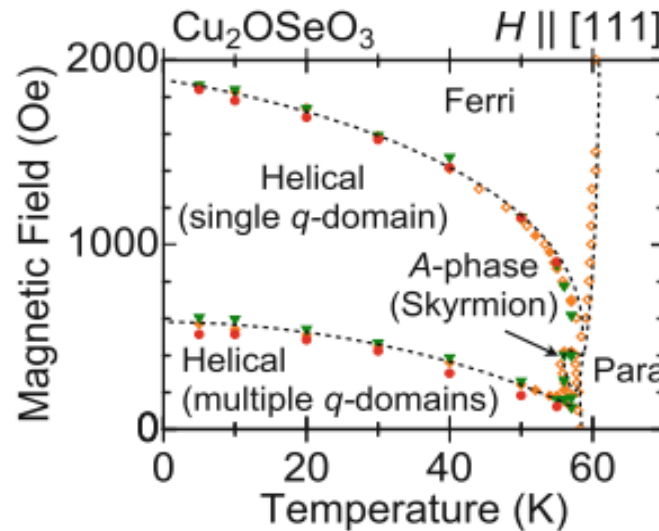


Fonte: Adaptado de Seki *et al.* (2012) ⁴⁹.
Legenda: a) MnSi e do b) Cu₂OSeO₃.

Estes sistemas pertencem ao mesmo espaço cúbico quiral P2₁3, o que indica que de forma geral além da simetria, a interação DM também é comum entre eles. Os valores de energia das interações costumam ter como mais forte a energia de troca seguida pela energia da interação DM e a energia da anisotropia da rede. Apesar da anisotropia ser a mais fraca das três, ela desempenha um papel importante modulando a direção dos spins. Os diagramas de fases destes materiais também apresentam comportamento semelhante conforme pode ser observado ao se comparar o diagrama do Cu₂OSeO₃ apresentado na Figura 2.7 com o diagrama do MnSi apresentado na Figura 2.3. O diagrama do MnSi refere-se a uma amostra do tipo bulk, abaixo da temperatura de ordenamento $T_c = 29\text{ K}$, sem aplicação de um campo magnético, o que favorece a criação de estados helicoidais através da competição da interação DM e da interação

de troca ferromagnética. A direção favorável q é determinada pela anisotropia magnética e os múltiplos domínios helimagnéticos podem coexistir devido a simetria cúbica da rede.

Figura 2.7 - Diagrama de fases do Cu_2OSeO_3



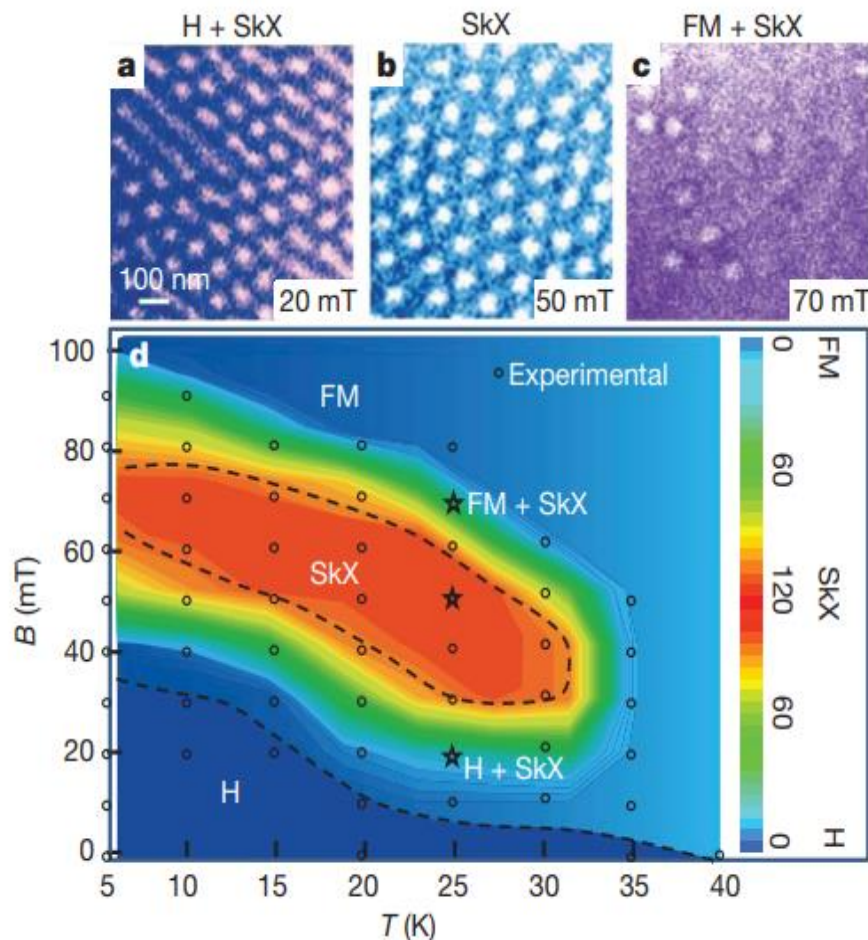
Fonte: Adaptada de Seki *et al.* (2016), pág. 16 ⁴⁹.

A aplicação de um campo magnético leva a um único domínio helicoidal a fim de satisfazer a relação $\vec{B} \parallel q$, pois spins alinhados antiferromagneticamente favorecem um alinhamento normal ao campo externo $\vec{B}$. Neste caso a textura helicoidal, tem uma magnetização uniforme ao longo do campo aplicado. Uma outra fase surge no diagrama e é chamada de fase A (*A-phase*), a qual é identificada em uma região estreita $B - T$ logo abaixo de T_c , com um valor moderado de B que causa anomalias em algumas propriedades como a magnetoresistência e a susceptibilidade magnética ⁶³. Enquanto esta textura de spins permaneceu sem solução por muitas décadas, Pflüder e outros coautores revelaram a formação de redes de skyrmions através da técnica SANS (*small-angle neutron-scattering*) em experimentos no ano de 2009 ⁵. A descrição destas texturas combinada com o cálculo teórico da energia livre obtida através da observação do efeito Hall topológico ⁶⁴ foi o embasamento necessário para que se estabelecesse a fase A como a fase em que surge a rede de skyrmions para um bulk de MnSi. É importante notar que até então as teorias também previam que a flutuação térmica era essencial para a estabilização da rede cristalina de skyrmions nos

ferromagnetos cúbicos quirais, o que explica porque os skyrmions apareciam em uma faixa de valores limitados abaixo de T_c .

Após esta descoberta em bulks, ocorreu a observação em espaços reais de redes cristalinas de skyrmions em amostras de filmes finos ⁹. Para este propósito a técnica LTEM (*Lorentz transmission electron microscopy*) foi utilizada. Estes dados estavam em concordância com os dados obtidos através de SANS para os bulks. A técnica LTEM também pode detectar a formação e a aniquilação dos skyrmions conforme mostrado na Figura 2.8a-c. Nesta fase, ou seja, na fronteira entre o estado ferromagnético e o estado de redes de skyrmions, um skyrmion pode existir como um defeito independente em vez de uma rede cristalina estável, conforme mostrado na Figura 2.8c.

Figura 2.8 - Diferentes fases magnética obtidas através de LTEM

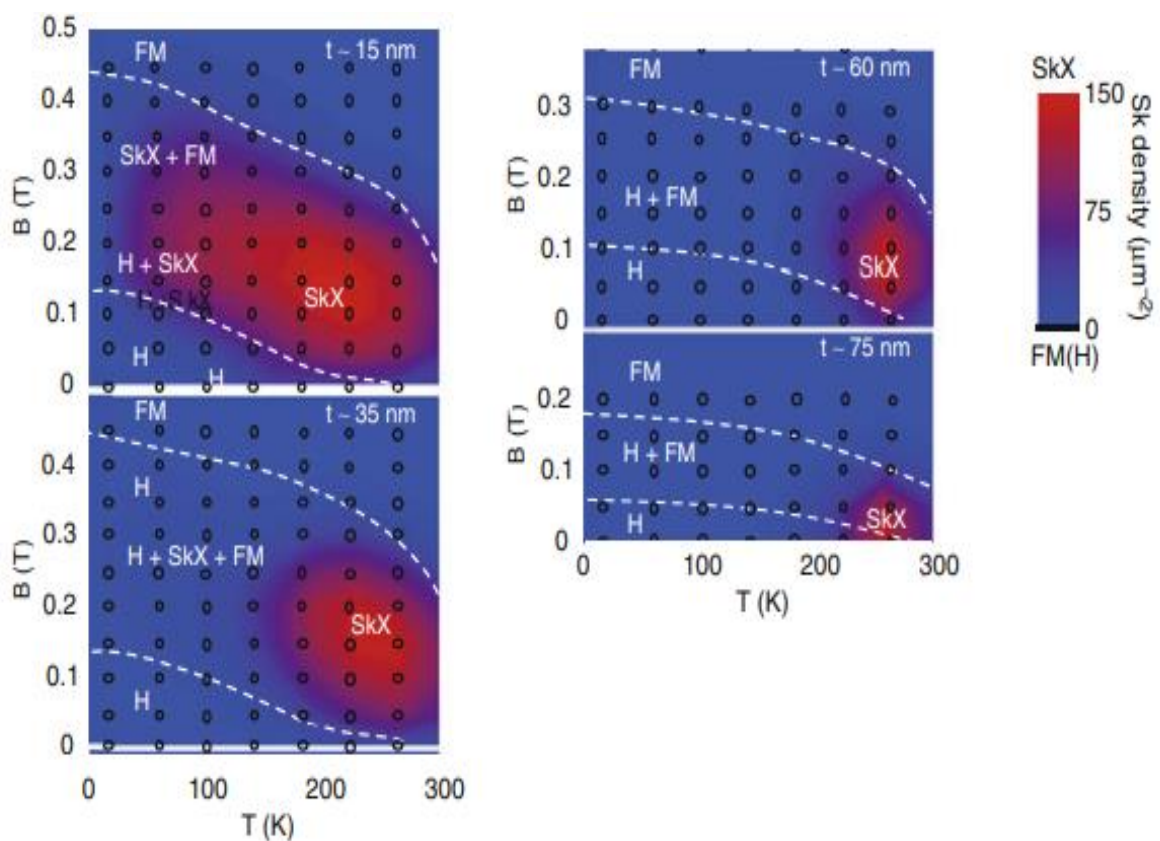


Fonte: Adaptado de Yu *et al.* (2010) ⁹.

Legenda: a) - c) Dependência do campo magnético em imagens obtidas com LTEM. d) Diagrama de fases de temperatura versus magnetização, com as fases H (helicoidal), skX (cristais de skyrmions) e FM (ferromagnética). A barra de cores indica a densidade de skyrmion por 10^{-12}m^2 .

A Figura 2.8d resume o diagrama de fase B-T para um filme fino de um único cristal de $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$. Neste caso, a rede cristalina está estabelecida até a temperatura mais baixa, o que contrasta claramente com o caso dos bulks, onde os skyrmions aparecem em uma região bem delimitada logo abaixo de T_c . Esta descoberta demonstrou que a estabilidade dos skyrmions depende essencialmente das dimensões e da espessura das amostras do material. Esta tendência é mais claramente observada no diagrama de fases da Figura 2.9:

Figura 2.9 - Diagrama de fases da dependência da espessura da amostra com a temperatura versus o campo magnético com as fases H (helicoidal), SkX (redes de skyrmions) e FM (ferromagnética).



Fonte: Adaptado de Yu *et al.* (2010) ²¹.

Legenda: As cores de fundo indicam a densidade dos skyrmions.

Diagramas de fase similares e a dependência com a espessura da amostra são observadas para outras ligas da família B20. Apesar das muitas diferenças nos arranjos atômicos, o Cu_2OSeO_3 pode ser considerado análogo às ligas B20 (mesmo sendo um isolante) devido a seu diagrama que apresenta a fase A (rede cristalina de skyrmions) logo abaixo de T_c (Figura 2.7). Isto implica que uma rede quiral cúbica ferromagnética ou antiferromagnética pode suportar

uma rede de skyrmions independentemente de sua natureza isolante ou metálica. Uma lista de materiais que suportam a formação de skyrmions está demonstrada na Tabela 2.1:

Tabela 2.1 - Lista de materiais que suportam a formação de redes de skyrmions

Material	Sample	Conduction	ΔT_{sky} (K)	Type
MnSi	Bulk	Metal	28-29.5	Bloch
MnSi (press.)	Bulk	Metal	5-29	Bloch
MnSi	Film (~50 nm)	Metal	<5-23	Bloch
Fe _{1-x} Co _x Si	Bulk	Semi-metal	25-30	Bloch
Fe _{0.5} Co _{0.5} Si	Film (~20 nm)	Semi-metal	5-40	Bloch
FeGe	Bulk	Metal	273-278	Bloch
FeGe	Film (~75 nm)	Metal	250-270	Bloch
FeGe	Film (~15 nm)	Metal	60-280	Bloch
Cu ₂ OSeO ₃	Bulk	Insulator	56-58	Bloch
Cu ₂ OSeO ₃	Film (~100 nm)	Insulator	<5-57	Bloch
Co ₈ Zn ₈ Mn ₄	Bulk	Metal	284-300	Bloch
Co ₈ Zn ₉ Mn ₃	Bulk	Metal	311-320	Bloch
Co ₈ Zn ₉ Mn ₃	Film (~150 nm)	Metal	300-320	Bloch
GaV ₄ S ₈	Bulk	Semi-metal	9-13	Néel
Co/Ru(0001)	Monolayer	...	~4.2	Néel
Fe/Ir(111)	Monolayer	...	<28	Néel
PdFe/Ir(111)	Bilayer	...	<8	Néel
Fe/Ir(111)	Trilayer	Metal	8	Néel
(Ir/Co/Pt) ₁₀	Multilayer	Metal	≤300	Néel
(Pt/Co/MgO)	Single layer	Metal	≤300	Néel
Pt/CoFeB/MgO	Multilayer	Metal	≤300	Néel
Pt/Co/Ta	Multilayer	Metal	≤300	Néel
Pt/Co ₆₀ Fe ₂₀ B ₂₀ /MgO	Multilayer	Metal	≤300	Néel
W/Co ₂₀ Fe ₆₀ B ₂₀ /MgO	Multilayer	Metal	≤300	Néel
Pd/Co ₆₀ Fe ₂₀ B ₂₀ /MgO	Multilayer	Metal	≤300	Néel
Ta/Co ₂₀ Fe ₆₀ B ₂₀ /MgO	Single layer	Metal	> 300	Néel
Ta/Co ₂₀ Fe ₆₀ B ₂₀ /MgO	Multilayer	Metal	≤300	Néel
Ir/Fe/Co/Pt	Multilayer	Metal	5-~300	Néel
Pt/Gd ₂₅ Fe _{65.6} Co _{9.4} /MgO	Multilayer	Metal	≤300	Néel

Fonte: Adaptada de EVERSCHOR-SITTE *et al.* (2018) ⁶⁵.

Legenda: (primeira coluna) com indicação do tipo de material (bulk, filmes finos, materiais com uma ou mais camadas) na segunda coluna. O tipo de condutividade é dado na terceira coluna. As duas últimas colunas mostram a temperatura em que os skyrmions são observados e o tipo de simetria do skyrmion respectivamente.

Devido a muitas variações na forma dos skyrmions e das diferentes texturas de spins que se apresentam ⁵⁹ são aguardadas novas pesquisas que indiquem materiais e estratégias para a obtenção de outros tipos de sistemas que comportem skyrmions.

2.2 Skyrmions e correntes

Os dispositivos baseados em skyrmions somente serão utilizados em larga escala, se existir uma forma de movê-los a um baixo custo energético. Portanto, a dinâmica de skyrmions é uma área ativa de pesquisa desde que os skyrmions foram detectados em cristais do tipo bulk. Ainda em 2010 Jonietz ⁶⁶ detectou a rotação de uma rede de skyrmions através de uma corrente induzida em uma amostra de MnSi, enquanto a observação direta de um movimento induzido por corrente foi reportada posteriormente em uma amostra do FeGe ⁶⁷. De maneira geral, o movimento dos skyrmions se dá na mesma direção de aplicação da corrente ao mesmo tempo em que ocorre uma deflexão em relação a este eixo com um ângulo bem determinado chamado de ângulo Hall, pois ele surge em decorrência do efeito Hall de skyrmions que é gerado por forças relacionadas à própria topologia dos skyrmions, as quais fazem com que ele possua uma rotação interna ⁸. Este ângulo pode ser observado através de técnicas experimentais e é uma constante do material ⁷. É possível então estabelecer a relação entre o movimento das redes de skyrmions e a sua deflexão ⁶⁸ a fim de determinar a velocidade com que a rede se movimenta. Isso pode ser feito através de um modelo de partículas ¹⁷, baseado na aproximação de Thiele ¹⁸. Esta modelo se baseia em uma aproximação que descreve o movimento do centro de massa de um corpo rígido (assumindo que não existem deformações) e pode ser utilizado para o movimento de skyrmions em baixas velocidades. Porém, desconsidera os efeitos de criação e aniquilação ^{25,26,69}. A direção do movimento ao longo do eixo de aplicação da corrente depende tanto da quiralidade do skyrmion quanto do sinal do ângulo de Hall, enquanto a deflexão transversal depende da direção onde os spins apontam no centro do skyrmion: para cima ou para baixo.

As correntes encontradas para a movimentação das redes de skyrmions mostraram-se relativamente baixas variando entre 10^6 Am^{-2} até 10^{12} Am^{-2} ⁸, porém, é válido ressaltar que se as correntes forem altas demais, os skyrmions serão destruídos. É necessário portanto encontrar uma maneira de controlar a aniquilação além da movimentação dos skyrmions.

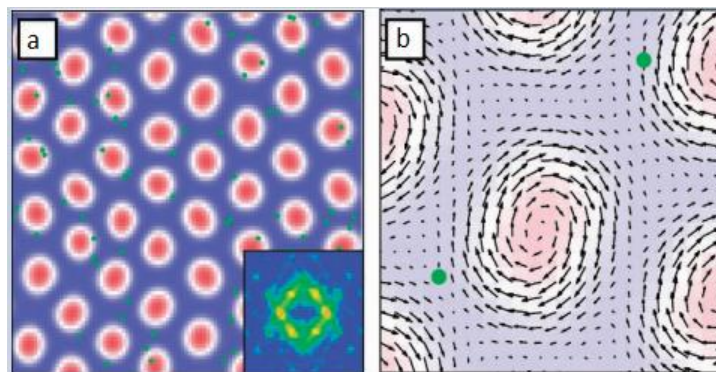
2.3 Mecanismos de pinning

Um fator importante que influencia a dinâmica de skyrmions trata-se do efeito dos centros de *pinning*, que estão relacionados à falta de homogeneidade do material. Esta característica pode ocorrer na amostra de forma natural ou artificial. As formas artificiais

envolvem a inserção de defeitos na rede ^{14,70} e alguns exemplos destas técnicas são: a litografia ⁷¹⁻⁷³, a introdução de vacâncias ⁷⁴ e a introdução de anisotropias magnéticas ³⁶.

Os *pinnings* podem aparecer no material em forma de uma rede aleatória, uma rede periódica ou ainda uma região do material que possua uma forma geométrica específica. Os efeitos dos *pinnings* podem desviar a trajetória, desacelerar ou até mesmo capturar os skyrmions ⁷⁵ impedindo sua movimentação. Existem diversos estudos com skyrmions individuais ou redes de skyrmions interagindo com *pinnings* ^{7,14,17,36,74} pois as baixas correntes necessárias para imprimir movimento aos skyrmions, aliadas a uma distribuição adequada de *pinnings*, na amostra são fatores cruciais para a construção dos dispositivos baseados em skyrmions. Apesar dos avanços, ainda existem desafios no entendimento da interação skyrmion-*pinning* principalmente em relação à transição de fase de um regime estático para um regime dinâmico. Só para citar um exemplo, redes de skyrmions que são movimentadas através da aplicação de uma corrente lateral, abaixo da corrente crítica sofrem aprisionamento por *pinnings* ^{66,67}, porém valores maiores de corrente fazem com os que os efeitos de aprisionamento não ocorram ⁷. Mesmo que muitos trabalhos teóricos estudem a interação dos skyrmions com diversos tipos de *pinnings* (lineares, aleatórios ou geometrias de Ratchet) ainda falta uma compreensão maior do assunto, pois muitos destes trabalhos assumem a inserção dos *pinnings* de forma fenomenológica. Iwazaki, Mochizuki e Nagaosa ⁷ conseguiram demonstrar através de simulações com LLG em magnetos quírais bidimensionais utilizando anisotropias da rede para representar os efeitos de *pinning*, que existe uma relação entre a velocidade e a corrente que é independente de efeitos adiabáticos ou de impurezas, conforme a representado na Figura 2.10:

Figura 2.10 - Imagem gerada a partir da simulação de um sistema evoluindo no tempo de uma amostra de skyrmions

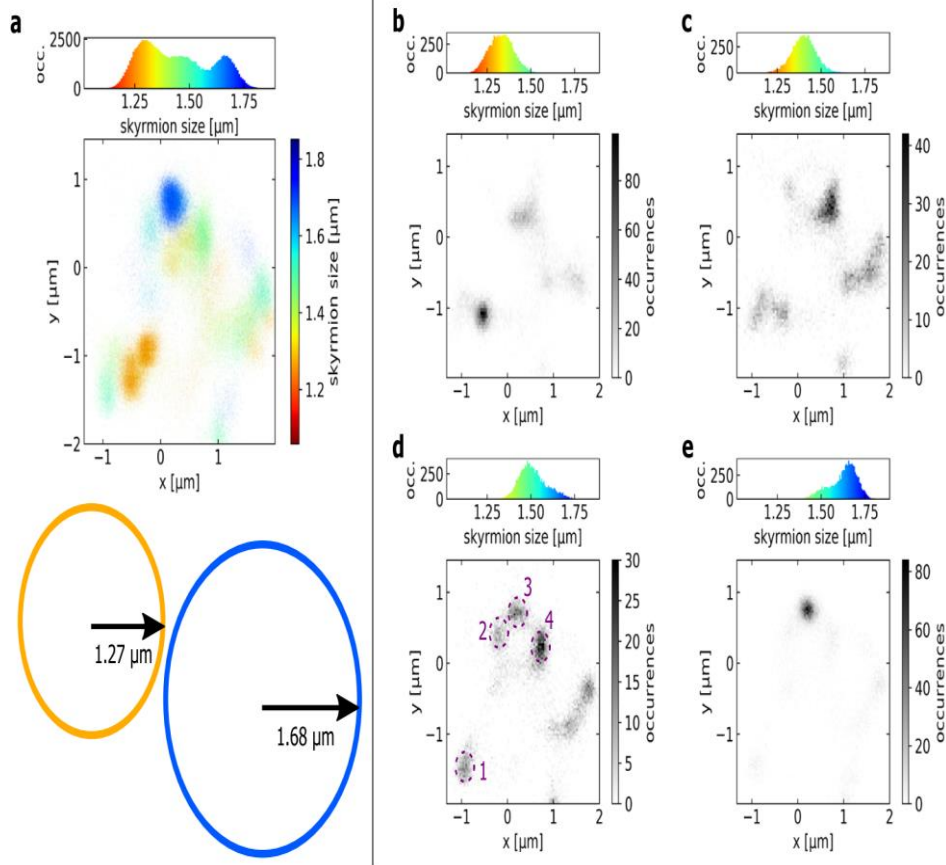


Fonte: Iwasaki; Mochizuki; Nagaosa. (2013) ⁷.

Legenda: (a) é a imagem de toda a rede e (b) corresponde a uma aproximação onde pode se observar as deformações dos skyrmions. Os pontos verdes representam as impurezas.

Gruber *et al.* ¹³ realizaram experimentos para investigar a dependência das deformações dos skyrmions a partir de suas interações com *pinning*s, a Figura 2.11 demonstra os resultados desta investigação. Outra proposta de *pinning* que tem sido estudada nos últimos anos, envolve a criação de redes com geometrias específicas como gargalos ⁷⁶⁻⁷⁹ e paredes de funis assimétricas ^{33,80-83} que já foram amplamente estudadas para comportamentos de vórtices em supercondutores, cristais de Wigner e partículas coloidais. Neste tipo de sistema é possível observar o aprisionamento de algumas partículas enquanto outras podem se movimentar livremente. Isso ocorre devido a geometria que possui partes específicas por onde as partículas podem passar e outras partes onde elas podem se aglomerar. Recentemente estes tipos de *pinning* têm sido utilizados para estudar a dinâmica de skyrmions mediante a aplicação de correntes polarizadas de spin, seja para skyrmions individuais ^{84,85} ou para skyrmions que se apresentam de forma coletiva nas amostras ⁶⁹. Este é o tipo de *pinning* que foi empregado no desenvolvimento deste trabalho e será detalhado mais adiante.

Figura 2.11 – Dados experimentais da ocorrência e do tamanho de skyrmions



Fonte: Adaptada de Gruber *et al.* (2022) ¹³.

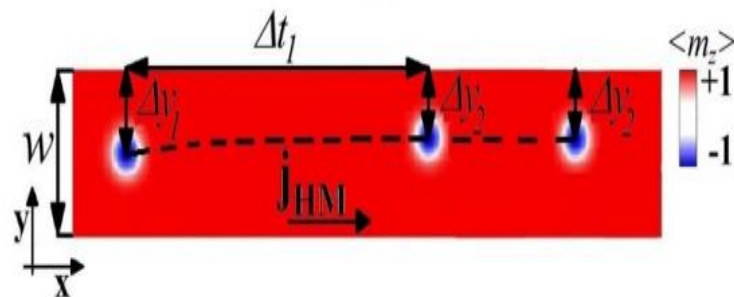
Lengenda: (a) Ocorrências de Skyrmion para campos entre -43 e $-31 \mu T$ com um tamanho médio de skyrmion entre $1,27$ e $1,68 \mu m$. As cores representam o tamanho do skyrmion. A intensidade da cor indica a densidade de probabilidade de encontrar um skyrmion em uma determinada posição. Os círculos coloridos na parte inferior indicam esquematicamente a relação de tamanho dos skyrmions entre si. (b) – (e) são os histogramas das posições centrais do skyrmion. A escala de cinza denota o número de ocorrências do centro do skyrmion em uma posição. A distribuição dos skyrmions varia drasticamente e eles são aprisionados pelos *pinning*s em posições diferentes, indicando a dependência do local com o tamanho. Em (d), os locais de fixação predominantes são destacados pelos círculos roxos tracejados e rotulados com números inteiros de 1 a 4.

2.4 Dispositivos spintrônicos baseados em skyrmions

As pesquisas envolvendo a formação e a dinâmica de skyrmions são essenciais para o avanço do desenvolvimento de dispositivos spintrônicos que visam o transporte de informações. Neste sentido, dispositivos de memória do tipo *racetrack* têm sido investigados. Zhang *et al.* ⁴⁵ além de demonstrarem a importância da interação skyrmion-skyrmion e skyrmion-borda em *racetracks*, investigou o espaço entre skyrmions consecutivos demonstrando a possibilidade de utilizá-los como bits de informação, além disso, sua pesquisa demonstrou como isso poderia ser utilizado nas operações computacionais de escrita, leitura e deleção. Tomasello *et al.* ⁸⁶

analisaram cenários para controlar skyrmions Neél e Bloch utilizando o efeito Hall de spin (SHE, *Spin Hall Effect*) e a transferência de torque de spin (STT, *Spin Transfer Torque*). Seus estudos demonstraram que os skyrmions do tipo Neél controlados por SHE se mostraram promissores pensando em movimentação e interação com defeitos nas fronteiras das amostras, o que está representado na Figura 2.12.

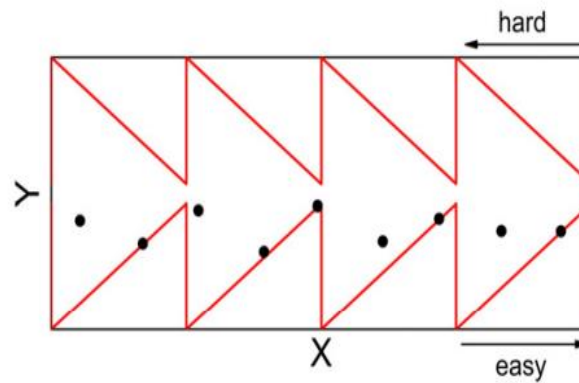
Figura 2.12 - Simulação do movimento skyrmion devido ao SHE em uma amostra confinada ao longo da direção y



Fonte: Tomasselo *et al.* (2015) ⁸⁶.

Estas pesquisas abriram caminho para um novo tipo de aplicação como os diodos de skyrmions, onde as texturas skyrmiônicas podem fluir livremente em uma dada direção, mas não em outra. Uma maneira típica de diminuir a tendência dos skyrmions de se movimentar em uma determinada direção é através da introdução de *pinning*s com uma geometria específica. Feng *et al.* ⁸⁷ propuseram um dispositivo em forma de listra com assimetria lateral que permite o fluxo de skyrmions no eixo fácil de assimetria, mas não no eixo difícil. Enquanto os skyrmions que se movimentam no eixo fácil podem ser usados como transportadores de informação, os skyrmions que se movimentam no eixo difícil são aniquilados. Jung *et al.* ⁸⁸ utilizando uma ideia parecida elaboraram a proposta de um diodo de skyrmions envolvendo geometrias de formas assimétricas. Neste caso, os skyrmions do eixo difícil em vez de aniquilados são aprisionados, enquanto os skyrmions do eixo fácil podem se movimentar. Mais recentemente Bellizotti Souza *et al.* ⁶⁹ fizeram a proposta de um outro tipo de diodo para múltiplos skyrmions baseado em uma geometria de *pinning* de funil (Figura 2.13), onde os skyrmions que interagem podem acabar “gargalando” na direção do movimento.

Figura 2.13 - Representação dos *pinning*s de geometria do tipo funil, as linhas vermelhas são barreiras repulsivas e os pontos pretos são os skyrmions. Uma corrente direta é aplicada na direção $+x$ ou $-x$



Fonte: Bellizotti *et al.* (2022) ⁶⁹.

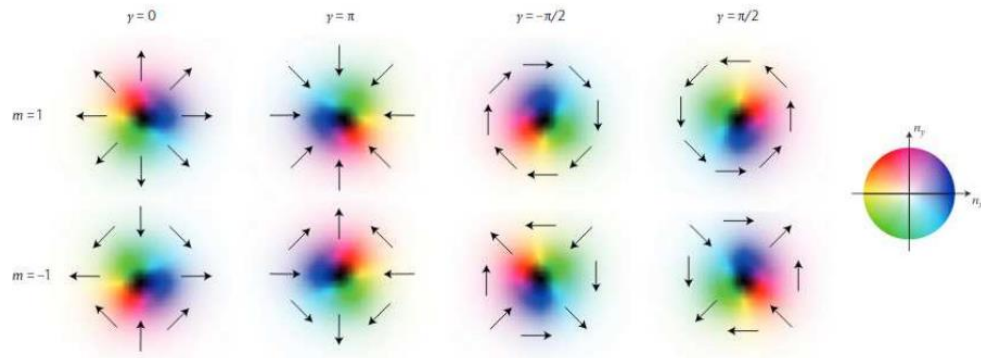
Na direção do eixo fácil de movimento, os skyrmions se movem rapidamente, a corrente para que os skyrmions escapem da interação das forças de *pinning* (o que é chamado de corrente de *depinning*) é bastante baixa, porém pode ser bastante elevada para o eixo difícil. De uma maneira geral a velocidade no eixo fácil é muito maior do que no eixo difícil, o que resulta em um efeito diodo para múltiplos skyrmions.

3 SKYRMIONS: REVISÃO TEÓRICA

3.1 Formação de skyrmions

Existem diversos mecanismos que favorecem a formação de skyrmions e podem ocorrer concomitantemente ou não, assim como há diversas estruturas skyrmiônicas que são favorecidas por cada um destes mecanismos. Estas estruturas são diferenciadas por seus valores de vorticidade (m) e helicidade (γ), os quais correspondem respectivamente: ao número de vezes que os spins circundam um ponto central ao longo de uma linha fechada. E ao sentido da rotação dos spins à medida que estão precessionando ⁸⁹. A Figura 3.1 apresenta estruturas skyrmiônicas que correspondem a diferentes valores de helicidade e de vorticidade.

Figura 3.1 – Estruturas skyrmiônicas representadas pelos valores variáveis de vorticidade (m) e helicidade (γ)



Fonte: Nagaosa; Tokura (2013) ⁸⁹.

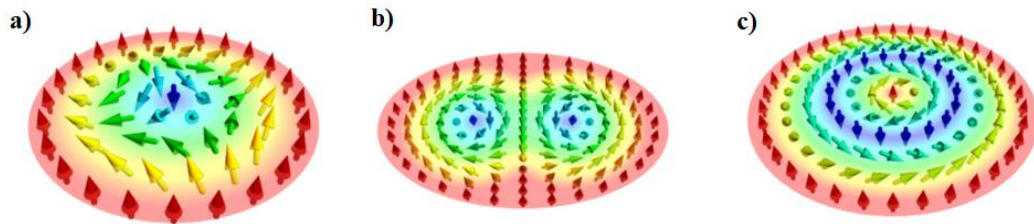
Legenda: As setas indicam a direção dos spins no plano e as cores servem para indicar a componente normal ao plano, sendo o branco para cima e o preto para baixo. As estruturas do tipo anti-skyrmion ($m = -1$) equivalem a rotações no plano $x - y$.

As diferentes topologias apresentam consequências diretas em suas propriedades físicas e as quantidades mensuráveis como a resistência Hall, por exemplo ⁶⁵. Também é possível classificá-las de acordo com uma grandeza conhecida como *winding number* (índice de curva ou carga topológica), a qual é representada pela letra Q e pode ser obtida através da eq. (3.1):

$$Q = \frac{1}{4\pi} \iint \vec{m} \cdot \left(\frac{\partial \vec{m}}{\partial x} \times \frac{\partial \vec{m}}{\partial y} \right) dx dy \quad (3.1)$$

Para um único skyrmion, é possível mostrar que $Q = \pm 1$. Esta grandeza física juntamente com seu sinal determina a orientação dos spins em relação ao núcleo, podendo apontar para cima (+1) ou para baixo (-1). A carga topológica Q mede quantas vezes um espaço é mapeado em outro até que encontre uma nova classe de objetos topológicos. Um outro exemplo de carga topológica é o de ferromagnetos onde seu valor é $Q = 0$. É necessário um custo energético muito elevado para passar de uma certa configuração topológica para outra, e por isso dizemos que os skyrmions são topologicamente protegidos. A Figura 3.2 apresenta estruturas com diferentes valores de Q .

Figura 3.2 – Estruturas skyrmiônicas com diferentes valores de carga topológica (Q)



Fonte: Adaptado de Everschor-Sitte *et al.* ⁶⁵.

Legenda: Em a) é apresentado um anti-skyrmion com $|Q| = 1$, em b) um biskyrmion com $|Q| = 2$ e em c) um skyrmionium com $|Q| = 0$.

O tipo específico de skyrmion que se forma depende da simetria do sistema ^{90,91}. Em nosso trabalho estamos interessados em skyrmions magnéticos caracterizados por $Q = \pm 1$ que se formam principalmente devido a competição existente entre a interação de troca de Heisenberg e a interação DM. Apesar da existência de outras interações relevantes para o sistema (interação de Zeeman devido ao campo magnético aplicado e a interação de anisotropia), as duas primeiras são as que têm maior contribuição, conforme será abordado na próxima seção.

3.2 Interações Magnéticas

Nesta seção discutiremos as principais interações que compõem o Hamiltoniano do sistema estudado nesta dissertação. São elas: Interação de Troca de Heisenberg, interação DM, interação devido ao efeito Zeeman e interação anisotrópica. Estas interações em conjunto caracterizam o comportamento coletivo do sistema e podem ser explicadas pela mecânica

quântica. Será adotado aqui o modelo atomístico para descrever o comportamento dos fenômenos físicos estudados, que será abordado em maiores detalhes no Capítulo 4.

3.2.1 Interação de Troca de Heisenberg

Em sistemas quânticos não é possível distinguir uma partícula da outra, portanto, a densidade de probabilidade de encontrar um elétron A em um determinado ponto deve ser a mesma de encontrar o elétron B neste mesmo ponto. Caso sejam tomadas duas funções de onda para representar cada uma das partículas e utilizados os índices a e b para representá-las (neste caso a e b representam a indexação dos números quânticos das partículas), pelo princípio da indistinguibilidade deve ser possível permutar suas coordenadas sem alteração na densidade de probabilidade, de modo que:

$$\Psi_T(x_1, \dots, z_2) = \Psi_a(1)\Psi_b(2) \quad (3.2)$$

A eq. (3.2) representa o caso em que a partícula 1 está no estado a e a partícula 2 está no estado b . A eq. (3.3) representa o caso oposto em que a partícula 1 está no estado b e a partícula 2 no estado a .

$$\Psi_T(x_1, \dots, z_2) = \Psi_b(1)\Psi_a(2) \quad (3.3)$$

$$\Psi_T^* \Psi_T = \Psi_b^*(1)\Psi_a^*(2)\Psi_b(1)\Psi_a(2) \quad (3.4)$$

Para verificar se a troca de coordenadas altera a medição dos observáveis podemos calcular a densidade de probabilidade representada pela eq. (3.4) para os dois casos e comparar se as autofunções encontradas em cada caso são equivalentes. Ao efetuar o cálculo para a eq. (3.2) e para a eq. (3.3), é possível notar que a nova autofunção é diferente para cada um dos casos, o que mostra que seu cálculo depende das coordenadas, conforme pode ser visto na eq. (3.5).

$$\begin{aligned}\Psi_a^*(1) \Psi_B^*(2) \Psi_a(1) \Psi_B(2) &\rightarrow \Psi_a^*(2) \Psi_B^*(1) \Psi_a(2) \Psi_B(1) \\ 1 &\rightarrow 2 \\ 2 &\rightarrow 1\end{aligned}\tag{3.5}$$

Este comportamento não atende ao critério estabelecido pelo princípio da indistinguibilidade das partículas, porém se uma das funções escolhidas for antissimétrica em relação a outra, nota-se que a permutação de coordenadas pode ser feita sem modificar a densidade de probabilidade. Seja a função simétrica definida pelo índice S e a função antissimétrica definida pelo índice A conforme a eq. (3.5a) e a eq. (3.5b) respectivamente:

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_a(1) \Psi_B(2) + \Psi_B(1) \Psi_a(2)] \tag{3.5a}$$

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_a(1) \Psi_B(2) - \Psi_B(1) \Psi_a(2)] \tag{3.5b}$$

Ao efetuar a troca de coordenadas para estas novas funções, é possível demonstrar que as funções de densidade de probabilidade não se alteram:

$$\begin{aligned}\Psi_S^* \Psi_S &\rightarrow \Psi_S^* \Psi_S \\ 1 &\rightarrow 2 \\ 2 &\rightarrow 1\end{aligned}\tag{3.6a}$$

$$\begin{aligned}\Psi_A^* \Psi_A &\rightarrow (-1)^2 \Psi_A^* \Psi_A = \Psi_A^* \Psi_A \\ 1 &\rightarrow 2 \\ 2 &\rightarrow 1\end{aligned}\tag{3.6b}$$

A demonstração acima contempla o princípio da indistinguibilidade das partículas. Já em relação ao princípio da exclusão de Pauli, é necessário retomar que este estabelece que “dois elétrons não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos”. Matematicamente esta condição é satisfeita exigindo-se que a autofunção de onda total do elétron seja antissimétrica. Para exemplificar este ponto, tomemos a equação de Schrodinger independente do tempo para dois elétrons livres (que não interagem entre si).

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \Psi(r_1, r_2) = E \Psi(r_1, r_2) \quad (3.7)$$

A solução desta equação descreve o movimento dos elétrons com relação aos seus spins. Como cada elétron possui dois valores possíveis de spin, existem, portanto, quatro possibilidades:

$$\uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow$$

A função total de onda é formada pelo produto da parte orbital pela parte de spin. Então, utilizando as funções acima é possível construir três funções simétricas (X_s) e uma função antissimétrica (X_a).

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = X_a$$

$$\left. \begin{array}{c} \uparrow\uparrow \\ (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) / \sqrt{2} \\ \downarrow\downarrow \end{array} \right\} = X_s$$

O termo $1/\sqrt{2}$ surge em decorrência da normalização. O estado X_a é chamado de singleto e o estado X_s de tripleto. Uma interpretação física possível pode ser obtida calculando-se o momento angular total do sistema dos dois elétrons dado por $S = S_1 + S_2$, sendo que, a componente z será dada por $S_z = S_{1z} + S_{2z}$. Ao considerar as regras de adição vetorial é possível mostrar que:

$$\begin{aligned} S_z X_a &= 0 X_a \\ S_z X_s(a) &= \hbar X_s(a) \\ S_z X_s(b) &= 0 X_s(b) \\ S_z X_s(c) &= -\hbar X_s(c) \end{aligned}$$

Conforme foi descrito pela eq. (3.5a) e pela eq. (3.5b), é possível formar funções espaciais simétricas e antissimétricas com estes estados. Para que a função total do sistema seja antissimétrica, é necessário que:

$$\Psi = \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \times X_A \quad (3.8)$$

Ou

$$\Psi = \psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \times X_S \quad (3.9)$$

Tomemos o primeiro caso que representa a situação dos spins no estado tripleto (spins paralelos), utilizando as eq. (3.6) vamos supor o caso em que as coordenadas são iguais. A partir disso, nota-se que a função de densidade de probabilidade tende a zero neste caso e ao aplicar o mesmo raciocínio para o estado singleto, esta função é praticamente o dobro. Ou seja, podemos concluir que spins paralelos tendem a se afastar enquanto spins antiparalelos tendem a se aproximar. É possível notar que o estado do spin está correlacionado com o orbital, e esta correlação foi introduzida pelo princípio da exclusão de Pauli, não tendo nenhuma relação com interações do tipo elétron-elétron na equação de Schrodinger. Os princípios que foram apresentados anteriormente serão aplicados agora considerando a interação coulombiana entre dois elétrons:

$$U(r_1, r_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad (3.10)$$

onde $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ corresponde a distância entre os elétrons. Para que seja efetuado o cálculo da energia média deste sistema, utiliza-se a parte espacial da função de onda:

$$\langle U \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 \quad (3.11)$$

substituindo na expressão acima o valor de $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ que é dado por: $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) \pm \psi_a(\vec{r}_2)\psi_b(\vec{r}_1)]$, é possível obter:

$$\langle U \rangle = E \pm J_{\text{troca}} \quad (3.12)$$

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 \quad (3.13)$$

$$J_{\text{troca}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_1) d^3r_1 d^3r_2 \quad (3.14)$$

O primeiro termo da direita da eq. (3.12) corresponde a energia coulombiana média do sistema (E). O segundo termo (que aparece como uma consequência do princípio da exclusão de Pauli) é chamado de energia de troca (J_{troca} ou simplesmente J). O sinal (+/-) dependerá do estado do spin, se é singlete ou tripleto. Isso mostra que a energia média do sistema depende do estado do spin, embora a interação entre os elétrons não dependa diretamente, o que sugere que J é um termo proporcional a: $\vec{m}_1$ e $\vec{m}_j$ em que $\vec{m}$ é o momento magnético localizado. A energia deste termo pode ser escrita na forma de um Hamiltoniano efetivo:

$$H_j = -\sum_{i,j=1}^N J_{ij} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j \quad (3.15)$$

onde N representa o número total de spins e i e j são os índices de cada um deles. A eq. (3.15) é conhecida como Hamiltoniano de Heisenberg pois este foi o primeiro a notar sua importância na explicação de fenômenos magnéticos. Analisando novamente a eq. (3.14) nota-se que ela pode ser reescrita como:

$$J_{ij} = 2 \int \phi_i^*(\vec{r}_1) \phi_j^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{r_{ij}} \phi_i(\vec{r}_2) \phi_j(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.16)$$

Fisicamente, a integral de troca representa a diferença energética entre os estados de spins paralelos e antiparalelos. É comum levar em conta no Hamiltoniano apenas a interação entre os primeiros vizinhos, pois J decai rapidamente a zero com a distância. Uma maneira de visualizar fisicamente o processo físico que ocorre, é imaginar a “troca” do elétron do orbital de um átomo para outro, conforme a Figura 3.3.

Figura 3.3 - Representação esquemática do “salto” do spin de um orbital para outro.

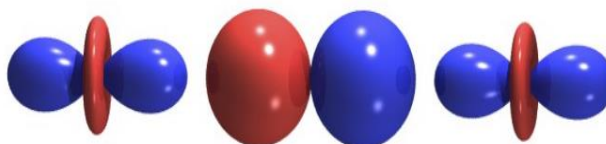


Fonte: Adaptado de Pavarini *et al.* (2012)⁹².

Quando esta troca se dá diretamente entre dois orbitais próximos, ela é chamada de interação de troca direta. Porém, nem sempre os orbitais dos elétrons se encontram em proximidade suficiente para que isto aconteça. No caso da interação de troca indireta, como por exemplo a troca do tipo RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) ^{93,94}, os elétrons estão a distâncias relativamente grandes. O mecanismo de interação age através dos elétrons de condução (que são intermediários entre os dois elétrons que estão distantes um do outro). Este caso costuma ocorrer principalmente no grupo dos metais. Existe ainda um outro tipo, a interação de supertroca, que é característica de um grupo de metais chamados de magnetos quirais, e que ocorre através de um orbital intermediário. Este grupo de metais é de particular importância para nosso estudo, e apesar do mecanismo de supertroca desempenhar um papel importante em sua descrição, ele ainda não é suficiente para explicar sozinho o comportamento e a formação de skyrmions. É necessário introduzir outras considerações teóricas para isso. Porém, antes detalharemos um pouco mais a interação de supertroca.

Esta interação é definida como uma troca direta que ocorre entre íons magnéticos e tem como intermediadores íons não magnéticos. Sua fundamentação teórica foi dada por Anderson ⁹⁵ e mais tarde recebeu contribuições de Goodenough ⁹⁶ e Kanamori ⁹⁷. Os ângulos de ligação entre os átomos desempenham papel importante nos estados relevantes deste tipo de sistema, que está representado pela Figura 3.4:

Figura 3.4 - Átomo de oxigênio em seu orbital “p” fazendo a mediação da interação de troca entre dois metais de transição em seus orbitais “d”



Fonte: Adaptado de Pavarini *et al.* (2012) ⁹².

A ligação apresentada na Figura 3.4 pode apresentar configuração ferromagnética ou antiferromagnética. Porém para explicar o ferromagnetismo fraco de materiais como a Hematita ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$), o MnCO_3 ou o CoCO_3 que não apresentam inversão de simetria, é necessário um mecanismo mais elaborado. Dzyaloshinskii ⁹⁸ e Moriya ⁹⁹ foram os autores a propor uma explicação que levasse em conta a rotação de estruturas magnéticas e o acoplamento spin-órbita

através de uma interação de natureza antissimétrica, que ficou conhecida como interação de Dzyaloshinskii-Moriya. Estes dois autores através de caminhos diferentes identificaram a necessidade de uma correção no Hamiltoniano de Heisenberg de forma que ele pudesse explicar o ferromagnetismo fraco.

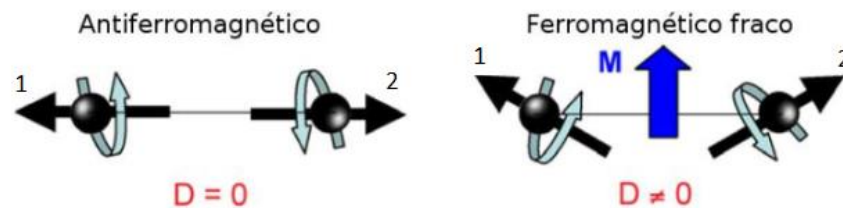
3.2.3 Interação de Dzyaloshinskii-Moriya

Igor Dzyaloshinskii ⁹⁸ utilizou argumentos baseados na teoria de transição de fase de Landau e propôs uma correção fenomenológica no Hamiltoniano original de Heisenberg, de modo que ela tivesse a forma:

$$H'_{DM} \propto \vec{D}_{12} \cdot (\vec{m}_1 \times \vec{m}_2) \quad (3.17)$$

Esta interação pode ser definida como uma interação de troca antissimétrica, pois é possível notar que o produto vetorial favorece o comportamento antissimétrico dos spins ao inverter suas posições. O vetor $\vec{D}_{12}$ (a partir de agora $\vec{D}$) é de natureza fenomenológica. Para determinar seu módulo e sua direção é necessário conhecer a simetria do material, o índice 12 refere-se a sua relação com os spins 1 e 2. Moriya ⁹⁹ identificou o acoplamento spin-órbita como um dos mecanismos para explicar o termo proposto por Dzyaloshinskii. Em seu artigo são demonstradas duas abordagens para a dedução deste termo: A primeira (e principal) adiciona os efeitos do acoplamento spin-órbita na interação de supertroca utilizando o formalismo de Anderson ⁹⁵ e na segunda (que consta como um apêndice em sua publicação), ele utiliza argumentos da teoria de perturbação de segunda ordem para descrever o orbital do elétron através do acoplamento spin-órbita e da interação de troca. Conforme citado anteriormente, o vetor $\vec{D}$ também se relaciona com a simetria do material, em materiais com baixa simetria (materiais quirais, por exemplo, pois estes não possuem um centro de inversão espacial), $\vec{D}$ será diferente de nulo e a interação DM pode ser a predominante no material, o que favorece um arranjo não colinear dos spins vizinhos. A magnetização resultante deste desalinhamento entre os spins é o que origina o magnetismo fraco destes materiais, conforme ilustrado pela Figura 3.5:

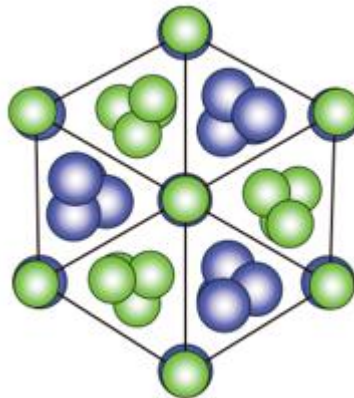
Figura 3.5 - Esquema representativo para diferentes valores de D . $D = 0$ para materiais centro-simétricos e $D \ll 0$ para materiais com baixa simetria (nesta figura está representado apenas o módulo do vetor)



Fonte: Adaptada de Ederer; Fennie (2008) ¹⁰⁰.

Um material é classificado como quiral quando ele e sua imagem refletida não podem ser sobrepostos. A Figura 3.6 apresenta a estrutura quiral da liga MnSi.

Figura 3.6 - Estrutura cristalina do MnSi com simetria quiral cúbica $P2_13$ vista na direção $[1\ 1\ 1]$



Fonte: Adaptado de Mochizuki (2015) ¹⁰¹.

Moriya ⁹⁹ enunciou uma série de regras determinando a orientação de $\vec{D}$, porém em nosso trabalho, $\vec{D}$ foi escolhido de tal forma que o material se comporte proporcionando a formação de skyrmions do tipo Néel ¹⁰². Sendo assim, considerando um momento magnético m_i na posição r_i e seus primeiros vizinhos m_j nas posições r_j , o Hamiltoniano da interação DM será dado pela seguinte expressão:

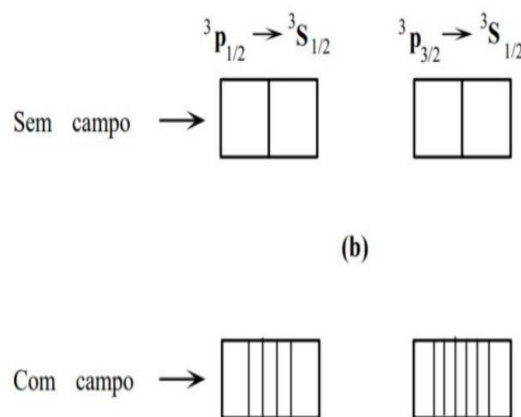
$$H_{DM} = \sum_{i,j=1}^N \vec{D}_{ij} \cdot \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j \quad (3.18)$$

Em resumo, esta interação é favorecida por um forte acoplamento spin-órbita somado com a falta de inversão de simetria espacial do material. Características que estão presentes em materiais do grupo B20 como MnSi e FeGe.

3.2.4 Interação Zeeman

Em 1896 Peter Zeeman descobriu o que veio a se denominar de Efeito Zeeman ¹⁰³, o qual consiste no desdobramento das linhas espectrais de átomos ou moléculas em múltiplas linhas devido à aplicação de um campo magnético externo. Isto ocorre devido à interação entre o momento magnético intrínseco das partículas e o campo aplicado. Existem duas abordagens possíveis para sua explicação: uma abordagem semiclássica e uma abordagem quântica. Por conta disso, em sua origem o termo efeito Zeeman “anômalo” (Figura 3.7) foi utilizado para explicar os fenômenos em que a teoria semiclássica não era bem-sucedida. Porém, do ponto de vista das teorias modernas, não existe nenhuma “anomalia” no efeito Zeeman que foi explicado após a introdução do conceito moderno de spin.

Figura 3.7 - Efeito Zeeman “anômalo”, onde uma linha espectral se desdobra em várias componentes, o que só pode ser explicado com conceitos da mecânica quântica.



Fonte: IFSC/USP - Efeito Zeeman ¹⁰³.

Com a ideia de spin, introduz-se momentos angulares adicionais para cada átomo que se acoplam formando o momento total de spin S , analogamente os momentos orbitais

individuais de cada elétron também se acoplam formando o momento orbital L . O momento angular total será dado por:

$$J = L + S \quad (3.19)$$

Os níveis atômicos descritos por estes momentos angulares decompõem-se em $2J + 1$ subníveis ao serem submetidos a um campo magnético externo de módulo B . É possível demonstrar através da teoria de perturbações da mecânica quântica, calculando-se a energia entre dois estados de matriz m e m' que os desdobramentos de energia devido ao efeito Zeeman são:

$$\Delta E = \mu_B B g m_j \quad (3.20)$$

$$\text{Onde } g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \text{ e } m_j = -J, -J + 1 \dots +J$$

Assim, a presença do campo magnético levanta a degenerência no nível, desdobrando-o em $2J + 1$ componentes, uma para cada valor de m_j . A grandeza g é chamada de fator de Landé e depende do nível atômico que está sendo considerado. Já μ_B é uma constante chamada de magneton de Bohr, dado por $\mu_B = e/2m_0$ (onde m_0 é a massa do elétron).

Este resultado é válido quando B é fraco em relação ao campo magnético interno do átomo. Para os casos de B muito alto, o acoplamento LS será suprimido e os momentos L e S irão precessionar em torno de B . O Hamiltoniano da interação Zeeman para uma rede spins de tamanho i , submetida a um campo magnético externo de módulo B será dado por:

$$H_z = - \sum_i^N \vec{B} \cdot \vec{m}_i \quad (3.21)$$

3.2.5 Interação com Anisotropia Magnética

Outro termo de contribuição no Hamiltoniano do sistema estudado, é referente a anisotropia. A anisotropia é uma tendência de que o sistema demonstre um comportamento específico de uma certa propriedade em uma dada direção preferencial. Por exemplo, se a

susceptibilidade magnética de um sistema não varia de acordo com a direção medida, dizemos que este sistema é isotrópico em relação a esta propriedade, caso contrário, dizemos que o sistema apresenta uma anisotropia em sua susceptibilidade magnética. Como o magnetismo nos materiais está intrinsecamente relacionado com a simetria da rede, muitos fenômenos magnéticos apresentam dependência de uma direção específica. É possível classificar a anisotropia em três tipos principais: magnetoestrictiva, magnetostática e magnetocristalina. Abordaremos aqui a anisotropia de íon único que é um tipo de anisotropia magnetocristalina.

As anisotropias magnetocristalinas são propriedades que descrevem como a estrutura da rede cristalina afeta os processos de troca envolvendo spins vizinhos que se orientam paralelamente. Devido a simetria da rede, determinados eixos exibem maior facilidade para serem magnetizados. Esta magnetização dá origem a uma energia de anisotropia (que é mínima quando os momentos magnéticos estão orientados nestes eixos) e os eixos que exibem este comportamento são chamados de eixos fáceis de magnetização. Elas podem ser de íon único (originam-se na interação entre os orbitais e o potencial da rede) ou de dois íons (que se originam nas interações dipolo-dipolo). A anisotropia de íon único se deve essencialmente às interações eletrostáticas dos orbitais sobre o acoplamento spin-órbita. Através da teoria de perturbação de segunda ordem é possível demonstrar que seu Hamiltoniano é:

$$H_k = \sum_i^N K(m_i^z)^2 \quad (3.22)$$

É possível notar que este Hamiltoniano apresenta uma quebra de simetria em relação ao Hamiltoniano clássico de Heisenberg. Neste caso, K corresponde a constante de anisotropia e m_i^z é o momento magnético localizado no sítio de número i .

3.2.6 Hamiltoniano

O Hamiltoniano que descreve o comportamento do sistema estudado será dada pela soma das energias das interações descritas nas seções anteriores: Troca, DM, Zeeman e Anisotropia, conforme a eq. (3.23):

$$H = H_j + H_{DM} + H_z + H_k \quad (3.23)$$

Que pode ser escrita como:

$$\mathcal{H} = -\sum_{i,j \in N} J_{ij} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \sum_{i,j \in N} \vec{D}_{i,j} \cdot (\vec{m}_i \times \vec{m}_j) - \sum_i \mu \vec{H} \cdot \vec{m}_i - \sum_i K (\vec{m}_i \cdot \hat{z})^2 \quad (3.24)$$

No termo de Zeeman estamos adotando que o campo magnético externo é dado por:

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (3.25)$$

onde μ é o momento magnético atômico.

3.3 Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert

Nesta seção discutiremos a equação utilizada para descrever a dinâmica da magnetização do sistema que será estudado neste trabalho. As passagens a seguir têm como referência os textos das referências ^{33,104}.

O momento angular associado a um momento magnético pode ser expresso como:

$$\vec{M} = -\gamma \vec{L} \quad (3.26)$$

sendo que γ é a constante giromagnética. O movimento de precessão que um momento magnético executa ao ser submetido a um campo magnético efetivo na ausência de amortecimento é descrito pela equação do torque:

$$\vec{T} = \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \quad (3.27)$$

onde

$$\vec{H}_{eff} = \frac{-\delta U[M \sim (\sim r, t)]}{\delta M \sim (\sim r, t)} \quad (3.27.1)$$

O campo efetivo $\vec{H}_{eff}$ não se limita apenas a campos magnéticos externos aplicados a um momento magnético, mas sim a qualquer campo que atue sobre os momentos magnéticos desde que seja definida a energia potencial com relação ao trabalho das forças que são exercidas

sobre os momentos magnéticos, neste caso serão consideradas as interações do Hamiltoniano da eq. (3.24).

Sabendo que a taxa de variação do momento angular no tempo é igual ao torque, pode-se escrever:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\vec{M}}{\gamma} \right) = \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \quad (3.28)$$

No equilíbrio esta taxa de variação é zero (portanto sem torque), porém é possível acrescentar um termo de amortecimento viscoso que atua na equação acima antes que o equilíbrio seja atingido. Um termo proporcional à variação do momento magnético é adicionado ao campo efetivo e é dado por $-\eta \partial \vec{M} / \partial t$, sendo η uma constante positiva. Este termo retarda o movimento do momento magnético e alinha $\vec{M}$ paralelamente a $\vec{H}_{eff}$, o que nos dá a equação de Gilbert para o movimento:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M} \times \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \quad (3.29)$$

onde $\alpha = |\gamma||m||\eta|$ é a constante de Gilbert. Aplicando o produto vetorial nos dois lados da eq. (3.29) por $\vec{M}$, obtêm-se:

$$\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M} \times \vec{M} \times \left(\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \right) \quad (3.30)$$

E aplicando a identidade $a \times (b \times c) = (a \cdot c)b - (a \cdot b)c$ para reescrever o segundo termo da eq. (3.30), é possível mostrar que:

$$\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = \gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \alpha M \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \quad (3.31)$$

substituindo (3.31) em (3.29), chega-se em:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = \frac{-\gamma}{1+\alpha^2} \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\gamma}{1+\alpha^2} \frac{\alpha}{M} \times \vec{M} \times \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \quad (3.32)$$

é possível reescrever a constante giromagnética da seguinte forma:

$$\gamma' = \frac{\gamma}{1 + \alpha^2} \quad (3.32.1)$$

e, portanto:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma' \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \gamma' \frac{\alpha}{M} \times \vec{M} \times \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \quad (3.33)$$

É usual dividir os dois lados da equação pela magnetização M e definir o vetor normalizado $\vec{m} = \vec{M}/M$:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = -\gamma' \vec{m} \times \vec{H}_{eff} + \gamma' \alpha \times \vec{m} \times \vec{m} \times \vec{H}_{eff} \quad (3.34)$$

A eq. (3.34) apresenta vantagens na resolução devido à ausência do primeiro termo da eq. (3.31) no lado esquerdo, porém a forma mais encontrada na literatura costuma ser a eq. (3.29). Fazendo a substituição do vetor normalizado $\vec{m}$ nesta equação, considerando uma rede de momentos magnéticos discretos $\vec{m}_i$, $i = 1, 2, 3 \dots n$ onde i representa o índice de cada sítio associado ao momento magnético e chamando a constante giromagnética da eq. (3.32.1) de γ' , a eq. (3.34) se torna:

$$\frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\gamma \vec{m}_i \times \vec{H}_i^{eff} + \alpha \vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} \quad (3.35)$$

A fim de que a corrente polarizada de spins aplicada ao sistema seja considerada, dois novos termos são acrescentados na eq. (3.35):

$$\frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\gamma \vec{m}_i \times \vec{H}_i^{eff} + \alpha \vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} + \frac{pa^3}{2e} (\vec{j} \cdot \vec{\nabla}) \vec{m}_i + \frac{pa^3\beta}{2e} [\vec{m}_i \times (\vec{j} \cdot \vec{\nabla}) \vec{m}_i] \quad (3.36)$$

sendo que ρ é a polarização de spin da corrente e a o parâmetro da rede. Estes dois últimos termos descrevem o acoplamento entre os spins e a corrente elétrica polarizada, representada pelo vetor $\vec{j}$. O penúltimo termo é chamado de transferência de torque de spin ou STT (do inglês *spin transfer torque*) e é obtido ao assumirmos que os spins dos elétrons de condução

são sempre paralelos aos momentos magnéticos locais devido a interação de troca e ao acoplamento de Hund. O último termo descreve o acoplamento entre a corrente de magnetização local devido a efeitos não adiabáticos, os quais não serão considerados neste trabalho ($\beta = 0$) pois em baixas correntes estes efeitos podem ser desprezados ¹⁰⁵, o que faz com que a eq. (3.36) se torne:

$$\frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\gamma \vec{m}_i \times \vec{H}_{eff} + \alpha \vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} + \frac{pa^3}{2e} (\vec{j} \cdot \vec{\nabla}) \vec{m}_i \quad (3.37)$$

4 MODELO, SIMULAÇÃO E MÉTODOS

4.1 Modelo Atomístico

O comportamento dinâmico dos skyrmions pode ser descrito através da equação LLG, que permite a descrição detalhada da dinâmica de magnetização. Das possíveis aproximações normalmente utilizadas para resolver esta equação, resultam três diferentes modelos: modelo de partículas, modelo micromagnético e modelo atomístico. Para o estudo do comportamento dinâmico coletivo dos skyrmions, o modelo mais adequado é o de partículas, onde considerarmos os skyrmions como objetos rígidos pontuais ^{17,18}. Esta aproximação é muito conveniente do ponto de vista computacional, entretanto, ela não leva em consideração os detalhes microscópicos do sistema. Efeitos como deformação ou aniquilação, não são considerados. Quando queremos conhecer em detalhes o comportamento microscópico, os modelos mais apropriados são o micromagnético e o atomístico.

Dentro do formalismo micromagnético, as propriedades magnéticas atômicas são calculadas em média sobre um pequeno volume de espaço, tipicamente $(2 - 10 \text{ nm})^3$, e assume-se que a direção da magnetização dentro desta célula varia continuamente ¹⁰⁶. Esta aproximação permitiu a solução da configuração magnética do estado fundamental de estruturas magnéticas complexas por meio da minimização de energia e também simulações do comportamento dinâmico da magnetização através da solução numérica da equação LLG ¹⁰⁶. Hoje, o modelo micromagnético é uma ferramenta de pesquisa padrão devido à disponibilidade de pacotes de software amigáveis ao usuário, como OOMMF e MUMAX3, e a capacidade de simular estruturas relativamente grandes acessíveis experimentalmente.

Entretanto, as simulações micromagnéticas são fundamentalmente limitadas pela formulação contínua, que requer que a direção da magnetização varie lentamente no espaço e no tempo. Esta limitação significa que a dinâmica dos ferrimagnetos e antiferromagnetos não pode ser simulada adequadamente, pois a direção intrínseca da magnetização varia fortemente na escala atômica. Em altas temperaturas, o mesmo problema existe, pois as flutuações térmicas levam à desordem do spin na escala atômica. Muitos materiais e dispositivos tecnologicamente importantes dependem de filmes e estruturas ultrafinos, onde as próprias propriedades do material variam na escala de comprimento atômico e não podem ser descritas adequadamente pelo modelo micromagnético. Assim, a aplicabilidade limitada deste formalismo apresenta uma barreira para a compreensão da dinâmica de muitos materiais e dispositivos magnéticos.

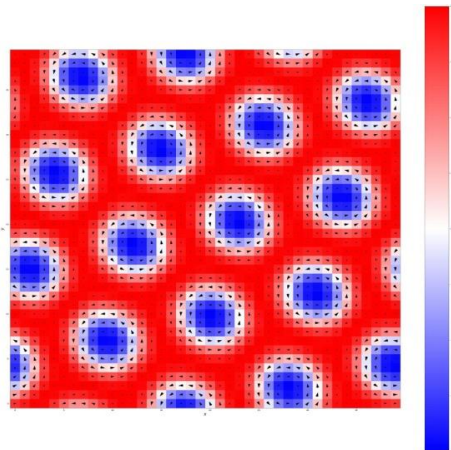
Neste sentido, uma grande inovação veio com a implementação do modelo conhecido como atomístico para o comportamento dinâmico dos momentos de dipolo atômicos. Embora pioneiras no final do século XX ¹⁰⁷, as simulações de dinâmica atomística eram muito caras computacionalmente para serem úteis na prática, até a virada do século XXI. A estrutura teórica com uma equação clássica de movimento permitiu a consideração natural de antiferromagnetos e ferrimagnetos ¹⁰⁸, bem como defeitos de nível atômico encontrados em nanopartículas, superfícies e interfaces onde a direção da magnetização pode mudar significativamente na escala atômica. O modelo atomístico também permite o estudo natural da dinâmica de magnetização de alta temperatura perto e acima da temperatura de Curie (onde os spins são paramagnéticos), excitações de spin e densidade de estados de onda de spin (DOS - *density of states*) ¹⁰⁹. Todas estas características evitam a limitação fundamental da aproximação contínua do formalismo micromagnético, e levaram a um renascimento da modelagem de materiais magnéticos, onde as propriedades macroscópicas de materiais magnéticos podem ser simuladas usando um modelo microscópico, com um link direto para as propriedades eletrônicas subjacentes, responsáveis pelo surgimento de interações magnéticas.

Em simulações com spins no modelo atomístico, a interação de troca costuma ser a mais forte e é responsável pelo alinhamento atômico dos spins. Em ferromagnetos, onde a constante de troca é $J > 0$, a formação de domínios magnéticos que levam a um comportamento macroscópico clássico é observada. Já nos antiferromagnetos, onde $J < 0$, os spins atômicos estão alinhados de forma antiparalela e a magnetização líquida é zero. Em materiais onde a constante de Dzyaloshinskii-Moriya está presente, a relação entre a constante J e a constante D é o que origina a formação de estruturas magnéticas como os skyrmions. Para aplicações spintrônicas, o fator mais importante é a estabilidade do material ao atingir determinado estado magnético. Esta estabilidade é determinada pelas preferências de alinhamento ao longo de uma determinada direção cristalográfica, característica esta que é conhecida como anisotropia magnetocristalina. Uma das formas mais simples em que esta anisotropia se apresenta é através da preferência de um eixo magnético em detrimento de outros (uniaxial). Magnetos simples como Fe e Ni apresentam anisotropias cúbicas onde os spins exibem uma preferência de alinhamento ao longo de seis ou oito eixos de simetria da estrutura cristalina.

4.2 Simulações

Usando o modelo atomístico ^{110,111} simulamos um filme fino ferromagnético que comporta a presença de skyrmions do tipo Neél desconsiderando efeitos de temperatura, $T = 0\text{ K}$, sob a influência de um campo magnético aplicado de forma perpendicular ao plano do filme (eixo z). O Hamiltoniano do sistema, que considera as interações presentes ^{13,35,49}, está demonstrado na eq. (3.24). Conforme explicado no capítulo 3, o primeiro termo do lado direito da eq. (3.24) corresponde a interação de troca entre os vizinhos mais próximos, que compõem o conjunto N . Consideramos uma rede quadrada de spins com parâmetro de rede a e constante de troca J_{ij} entre os spins i e j . O segundo termo é a constante de Dzyaloshinskii-Moriya interfacial, onde D_{ij} é o vetor de Dzyaloshinskii-Moriya entre os spins i, j , para filmes finos. O terceiro termo corresponde a interação de Zeeman, considerando o momento magnético μ e o último termo é a anisotropia de eixo fácil, onde K_1 é a constante de anisotropia. As constantes de anisotropia e de Dzyaloshinskii-Moriya são dadas em termos da constante de troca J . Antes que a dinâmica de magnetização do sistema fosse simulada, foi efetuada uma fase de testes envolvendo a minimização da energia do Hamiltoniano (3.24) a fim de buscar resultados conhecidos na literatura. Durante esta fase, foram utilizadas redes quadradas de spins orientados de forma aleatória, com 40×40 spins nas dimensões x e y respectivamente com parâmetro de rede $a = 0.5\text{ nm}$, cuja dimensão total correspondia a $20\text{ nm} \times 20\text{ nm}$. A Figura 4.1 representa uma rede hexagonal de skyrmions que foi obtida nesta fase do trabalho.

Figura 4.1 - Imagem de uma rede de 40×40 spins ($20\text{ nm} \times 20\text{ nm}$) obtida através do método de Monte Carlo

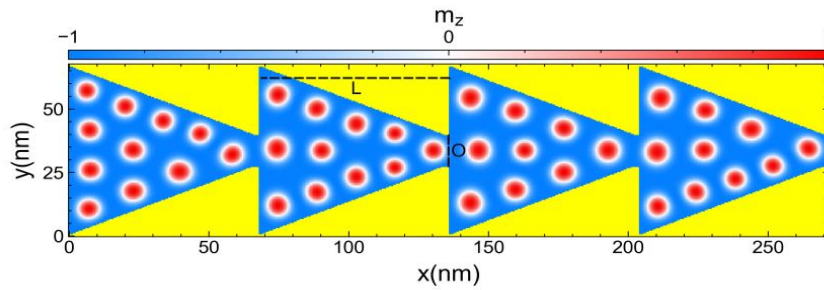


Fonte: Autoria Própria.

Legenda: Os skyrmions estão representados em azul. O mapa de calor representa a variação da magnetização no eixo Z . Neste exemplo o último termo da eq. (3.24) é desprezado pois não existem defeitos na rede. Para mais detalhes, consultar o apêndice A.

Estas simulações estão descritas em maiores detalhes no Apêndice A, juntamente com os métodos utilizados. Uma vez confirmados os resultados conhecidos da literatura (fase helicoidal e fase de skyrmions), pôde-se então partir para o problema principal a ser investigado nesta dissertação: A dinâmica de magnetização de um sistema de skyrmions submetido a aplicação de uma corrente de spins polarizados, interagindo com uma rede de geometria do tipo funil. Para este caso, foi simulado um filme fino de $272 \text{ nm} \times 68 \text{ nm}$ contendo defeitos anisotrópicos em forma de funil ao longo do eixo x , conforme pode ser observado na Figura 4.2. No decorrer das simulações a abertura do funil (O) variou e a largura (L) foi mantida fixa em 68 nm .

Figura 4.2 - Imagem ilustrando a geometria do sistema



Fonte: Rocha *et al.* (2023) ¹¹².

Legenda: O funil é construído alinhando-se às bordas inferior e superior da amostra com um arranjo assimétrico em forma de dentes de serra (parte amarela). O funil tem comprimento L e abertura O , conforme indicado na figura. Dentro do funil, a cor que varia do azul ao vermelho indica a magnetização fora do plano m_z . Os skyrmions estão ilustrados como círculos vermelhos.

A interação dipolar foi desprezada, uma vez que é esperado que seja muito pequena para filmes ultrafinos ¹¹³. As paredes do funil são compostas por spins rígidos com $\vec{m}_F = \hat{z}$ fixos em F onde o conjunto F corresponde à região amarela, fora do funil. Os spins rígidos correspondem a uma simplificação que representa spins com um alto valor de anisotropia. Por exemplo, se estes spins fossem substituídos por spins que possuem $K_1 = 5J$, os resultados permaneceriam os mesmos.

A dinâmica dos spins do sistema é regida pela eq. (3.37), sendo incluídas apenas as correntes de STT adiabáticas. Neste caso, foi considerada a hipótese de que os spins são sempre paralelos aos momentos magnéticos $\vec{m}$ ^{7,70}. Os efeitos não adiabáticos de transferência de torque de spins não foram considerados, pois não apresentam influência considerável para

skyrmions movimentados a baixas correntes ¹⁰⁵. A aplicação da corrente se deu na direção $-y$, com $\vec{j} = -j\hat{y}$. Esta direção foi escolhida em detrimento ao eixo x pois proporciona uma maior interação dos skyrmions com as paredes magnéticas rígidas, o que resulta em uma velocidade aumentada do skyrmion ao longo da parede do funil ^{69,73,114,115}.

Para medir a quantidade de skyrmions do sistema, utilizamos cálculos que nos permitem medir a carga topológica na amostra, onde cada skyrmion possui a carga $Q = \pm 1$ dependendo da direção do campo aplicado. Pelo fato de estar utilizando uma rede discreta de spins, os cálculos da carga topológica foram feitos utilizando uma técnica chamada de “abordagem baseada em rede” ¹¹⁶. Este método pode reduzir as variações na carga topológica devido a imprecisões nas derivadas das diferenças finitas, principalmente quando a nucleação, a aniquilação e as flutuações térmicas são consideradas no modelo. A velocidade dos skyrmions é calculada usando o campo eletromagnético emergente ^{49,68}:

$$E_i^{\text{em}} = \frac{\hbar}{e} \vec{m} \cdot (\partial_i \vec{m} \times \partial_t \vec{m}), \quad B_i^{\text{em}} = \frac{\hbar}{2e} \varepsilon_{ijk} \vec{m} \cdot (\partial_j \vec{m} \times \partial_k \vec{m}) \quad (4.1)$$

Onde ε_{ijk} é o tensor antissimétrico. A velocidade de arraste $\vec{v}_d$ é calculada de acordo com $\vec{E}^{\text{em}} = -\vec{v}_d \times \vec{B}^{\text{em}}$ ^{49,68}. Caso o sistema fosse antiferromagnético, uma alternativa para o cálculo da velocidade seria utilizar o vetor de Néel ¹¹⁷.

Durante as simulações foram fixados os valores $\alpha = 0.04$, $p = -1.0$ e $a = 0.5 \text{ nm}$. As seguintes constantes para o material foram utilizadas: $J = 1 \text{ meV}$, $D = 0.18 \text{ J}$, e $K_1 = 0.01 \text{ J}$. O campo magnético aplicado foi $\mu H = -0.5(D^2/J)\hat{z}$. Este valor de campo foi escolhido afim de que fosse possível a formação de skyrmions na amostra ^{7,49}. Além da relação D/J , a própria geometria do sistema influencia no tamanho dos skyrmions, e em nosso caso, na fase de estabilização dos sistemas, o diâmetro dos skyrmions corresponde a aproximadamente $d = 8.80 \text{ nm}$. Cada simulação foi iniciada através de uma configuração inicial aleatória, onde uma rede de spins orientados aleatoriamente foi relaxada utilizando a equação (3.37) sem corrente ($j = 0$). O sistema foi relaxado utilizando 3×10^7 passos de tempo para garantir que uma solução estável fosse alcançada. A partir da estabilização, foi introduzida uma corrente finita de spins polarizados para que a dinâmica do sistema fosse avaliada. Utilizamos o método de integração de Runge-Kutta de quarta ordem ¹¹⁸. O tempo é normalizado por $t = (\hbar/J)$ e a corrente de spins é dada por $\vec{j} = (2eJ/a^2\hbar)\vec{j}'$. Neste caso τ and j' são as unidades

normalizadas e adimensionais utilizadas no código e que são convertidas novamente para as dimensões das unidades.

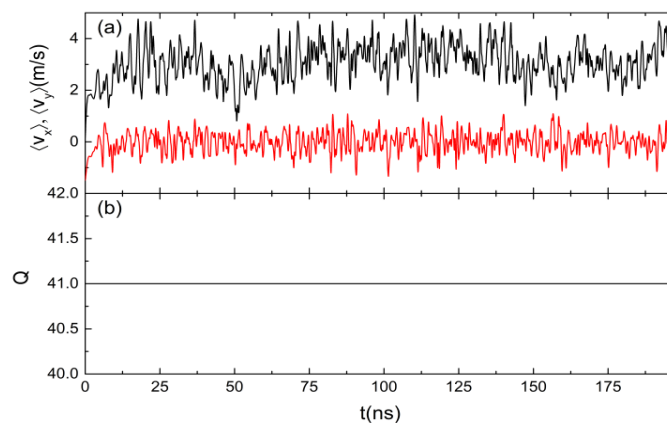
5 RESULTADOS

Nesta seção serão descritos os resultados encontrados através das simulações efetuadas e que dizem respeito a dinâmica do sistema. Sendo assim, o transporte de skyrmions e suas interações foram analisados. Isto foi feito através da variação dos valores de corrente e de abertura dos funis. Os resultados aqui descritos foram publicados ¹¹² e podem ser consultados juntamente com o material suplementar.

5.1 Transporte de Skyrmions

Com a finalidade de analisar a corrente necessária para gerar movimento nos skyrmions, foi analisado inicialmente um funil de abertura $O = 12.5 \text{ nm}$ submetido a uma corrente de $j = 0.39 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$. O comportamento das velocidades e da carga topológica está representado na Figura 5.1 e de acordo com a Figura 5.1b, podemos ver que a carga topológica permanece constante, o que indica que esta corrente não é suficientemente alta para gerar aniquilação de skyrmions.

Figura 5.1 – Gráfico das velocidades e da carga topológica em função do tempo para o sistema sem aniquilação

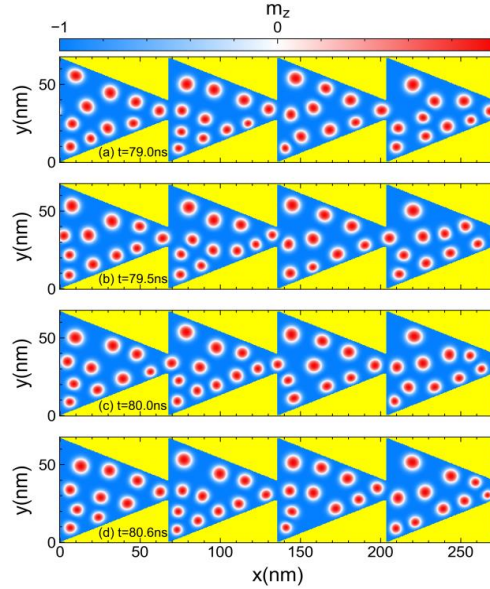


Fonte: Rocha *et al.* (2023) ¹¹².

Legenda: (a) Velocidade $\langle V_x \rangle$ (preto) e $\langle V_y \rangle$ (vermelho) vs. tempo t (b) Carga topológica correspondente vs. t para um sistema com $j = 0.39 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ e $O = 12.5 \text{ nm}$. Ambos $\langle V_x \rangle$ e $\langle V_y \rangle$ possuem sinais de ruído. A velocidade oscila em torno de $\langle V_x \rangle \approx 3 \text{ m/s}$ e $\langle V_y \rangle \approx 0 \text{ m/s}$, o que indica um movimento líquido na direção x com oscilações paralelas ao eixo do funil, sem movimentação ao redor da direção y . A carga topológica $Q = 41$ é constante, indicando que não ocorre aniquilação dos skyrmions.

Foram graficadas as velocidades médias: $\langle V_x \rangle = |Q|^{-1} \sum_i^{|Q|} v_d \cdot \hat{x}$ e $\langle V_y \rangle = |Q|^{-1} \sum_i^{|Q|} v_d \cdot \hat{y}$ e a carga topológica Q em função do tempo t . Em 5.1 (a), ambas as velocidades exibem um ruído que é resultado da interação skyrmion-skyrmion e da interação skyrmion-parede dentro das placas do funil. Como consequência dessas interações skyrmion-skyrmion, skyrmion-corrente e skyrmion-parede, os skyrmions podem sofrer deformações dentro do funil criando excitações internas e um movimento turbulento que acarreta ruídos na velocidade. Na média, os skyrmions tem velocidades $\langle V_x \rangle \approx 3 \text{ m/s}$ e $\langle V_y \rangle \approx 0 \text{ m/s}$. O que indica que os skyrmions adquirem um movimento líquido ao longo do funil e se deslocam de um funil para outro na direção x . Em contrapartida, não existe um movimento resultante em y , mas apenas oscilações na velocidade. Na Figura 5.1 (b), a carga topológica é constante em $Q = 41$, indicando que 41 skyrmions estão presentes na amostra e que não há efeitos de aniquilação. A Figura 5.2 mostra as imagens geradas durante o movimento do sistema da Figura 5.1.

Figura 5.2 - Imagens geradas da configuração de skyrmions em diferentes momentos durante sua movimentação através do funil com $j = 0.39 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ e $O = 12.5 \text{ nm}$



Fonte: Rocha *et al.* (2023) ¹¹².

Legenda: valores de tempo (a) $t = 79.0 \text{ ns}$. (b) $t = 79.5 \text{ ns}$. (c) $t = 80.0 \text{ ns}$. (d) $t = 80.6 \text{ ns}$.

Uma vez que a corrente externa é aplicada na direção $-y$, os skyrmions na parte de cima do funil são maiores e os skyrmions na parte de baixo são menores, essa diferença de tamanho gera um acúmulo de skyrmions na parte de baixo. A compressão dos skyrmions contra as paredes faz com que eles deslizem pelas paredes do funil na direção $+x$, até chegar à próxima

abertura que se localiza a direita. A abertura do funil representa uma barreira para os skyrmions, tanto do lado direito quanto do lado esquerdo. No entanto, os skyrmions (que executam seu movimento vindos da esquerda) passam por essa barreira com alta velocidade. Esses skyrmions experimentam um efeito de gargalo (*bottleneck*), e como resultado, apenas um skyrmion por vez consegue passar pela abertura e ir para o próximo funil da direita. Durante a passagem de um funil para outro, o skyrmion se deforma e encolhe. Os skyrmions na parte de cima e nos cantos de baixo permanecem sem mobilidade.

5.2 Aniquilação de Skyrmions

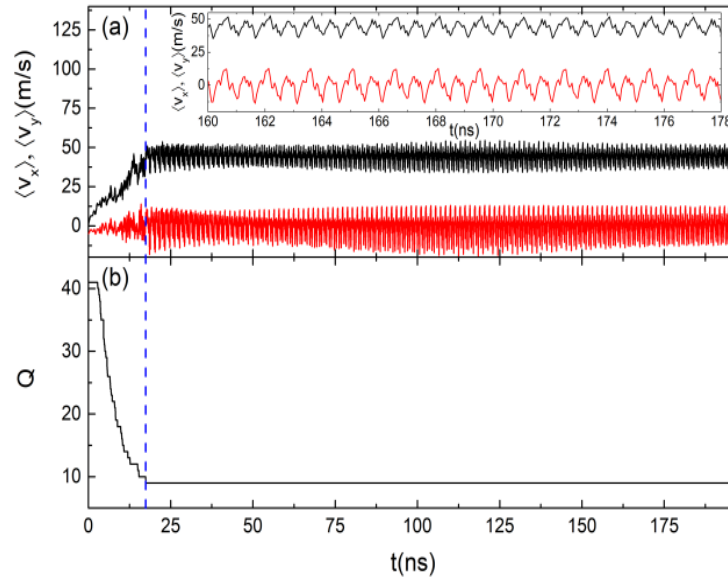
Nesta seção será discutida a influência do efeito de aniquilação sobre o transporte dos skyrmions. Quando a corrente aplicada é baixa, os skyrmions se movem lentamente através da rede de funis, sofrendo deformações e um efeito conhecido como *jamming* (ou engarrafamento), mas não sofrem aniquilação. De maneira geral, *jamming* é o efeito que descreve o acúmulo de partículas devido a um engarrafamento, onde as partículas reduzem a sua velocidade média pois apenas poucas partículas podem passar pela abertura disponível. Este nome provém do termo “trânsito”, do inglês *traffic jam*. Na Figura 5.3 (a), foram graficadas as velocidades médias $\langle V_x \rangle$ e $\langle V_y \rangle$ em função do tempo t para um sistema com $O = 12.5 \text{ nm}$ e um valor de corrente $j = 1.36 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$, enquanto na Figura 5.3 (b), apresentamos a carga topológica Q versus o tempo t . Para $t = 0$ existem 41 skyrmions presentes na amostra, o que equivale a $Q = 41$.

À medida que o tempo avança, podemos verificar que ocorre aniquilação de skyrmions, o que pode ser observado no gráfico já que a carga topológica diminuí até o valor mínimo $Q = Q_f = 9$. As linhas pontilhadas azuis em $t = 17 \text{ ns}$ mostram o momento em que o processo de aniquilação termina, indicado pelo fato de que o número de skyrmions permanece constante para t maiores. Durante o período de aniquilação, o sinal da velocidade $\langle V_x \rangle$ aumenta com o tempo. Este crescimento é resultado da destruição dos skyrmions, o que aumenta o espaço dentro do funil para os skyrmions restantes, diminuindo o efeito de engarrafamento e possibilitando uma maior mobilidade dos skyrmions na direção x . Neste sistema existem dois mecanismos principais que influenciam na aniquilação:

(i) A pressão exercida pela corrente aplicada empurra os skyrmions para a parede inferior do funil.

(ii) Skyrmions que são empurrados pela corrente também exercem uma pressão nos skyrmions que estão mais próximos das paredes.

Figura 5.3 – Gráfico das velocidades e da carga topológica em função do tempo para o sistema com aniquilação



Fonte: Rocha *et al.* (2023) ¹¹².

Legenda: (a) Sinais da velocidade $\langle V_x \rangle$ (preto) e $\langle V_y \rangle$ (vermelho) vs. t e (b) A carga topológica Q correspondente vs. t para um sistema com $j = 1.36 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ e $O = 12.5 \text{ nm}$. A linha pontilhada azul em $t = 17 \text{ ns}$ indica o fim do processo de aniquilação, o zoom em (a) demonstra os detalhes da velocidade periódica da parte principal do gráfico.

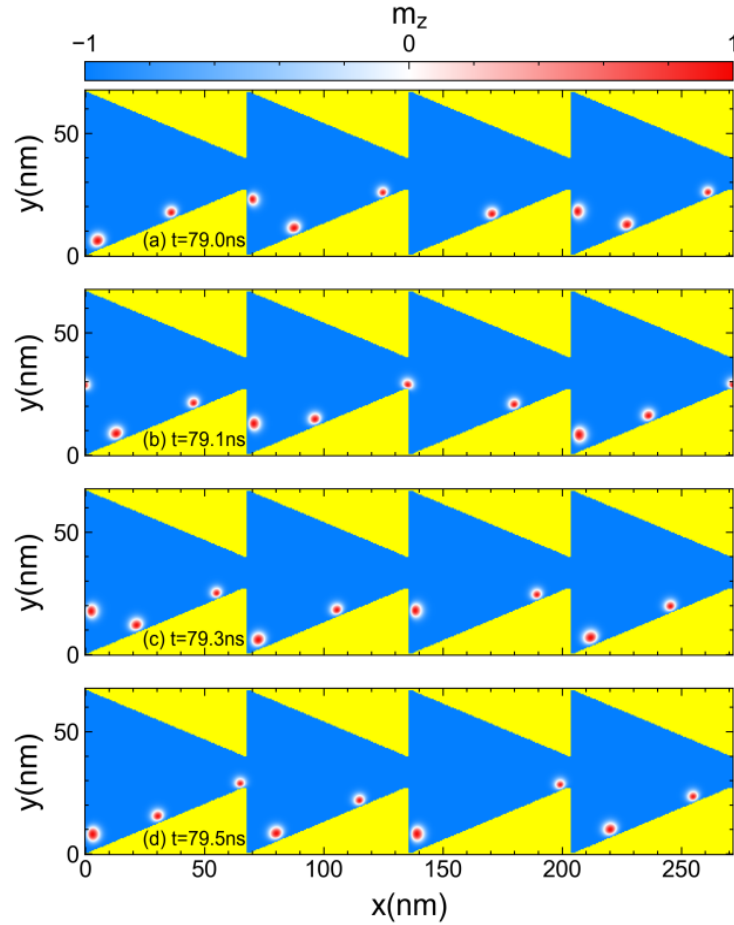
O processo de aniquilação é bem similar ao que foi observado para uma rede conforme de skyrmions submetida a aplicação de corrente contínua (*dc, direct current*) ¹¹⁵. Neste estudo, foram feitas simulações envolvendo corrente *dc* e corrente alternada (*ac, alternate current*), nas quais pode-se observar que a aplicação da corrente *dc* gerou uma movimentação mais veloz dos skyrmions, porém com um maior risco de aniquilação do que para corrente *ac*. O processo de aniquilação encontrado na aplicação da corrente *dc* é bastante parecido com o que foi encontrado na Figura 5.3 e consiste no deslocamento dos skyrmions até as paredes da amostra, onde eles sofrem uma deformação seguida de encolhimento, além de estarem submetidos a um gradiente de força devido à pressão dos skyrmions que se localizam nas fileiras superiores. A soma destes fatores é o que faz com que os skyrmions sejam aniquilados. Desde que o processo não aniquile todos os skyrmions da amostra, e que os demais skyrmions remanescentes também tenham sofrido encolhimento em seu tamanho (devido à pressão da corrente aplicada), eles

estarão aptos a passar com mais facilidade através da abertura do funil e a velocidade resultante na direção do fluxo aumentará. Em adição a este efeito, os skyrmions restantes interagem com as paredes e sofrem um incremento em sua velocidade através do efeito Magnus (*Magnus velocity boost*)^{69,73}.

Após o fim do processo de aniquilação, a velocidade não sofre mais aumento, em vez disso, ela exibe um comportamento oscilatório periódico, conforme destacado na Figura 5.3 (a) no intervalo $160 \leq t \leq 178 \text{ ns}$. O pico da velocidade ocorre nos momentos em que a maioria dos skyrmions interage com as paredes inferiores do funil, onde o aumento de velocidade devido ao efeito *Magnus velocity boost* pode ocorrer. A velocidade mínima ocorre toda vez que um skyrmion remanescente alcança a ponta do funil e deve superar a barreira para chegar ao próximo funil. Neste regime, o número de skyrmions restantes é pequeno o suficiente para que a distância entre os skyrmions seja suficientemente grande, fazendo com que a interação entre eles seja mínima e como consequência faz com que a interação predominante seja a interação dos skyrmions com as paredes do funil, diferente do que foi observado na seção 5.1. Em poucas palavras, os skyrmions restantes movem-se como se fossem skyrmions únicos na amostra. As velocidades oscilam entre os valores $\langle V_x \rangle \approx 45 \text{ m/s}$ e $\langle V_y \rangle \approx 0 \text{ m/s}$. A frequência da oscilação depende tanto do tamanho do funil L , quanto da densidade de corrente j , sendo maior para funis curtos e menor para corrente baixas. O comportamento periódico pode ocorrer em sistemas onde cada funil comporta um número de skyrmions em estados estacionários suficientemente pequeno para permitir que todos os skyrmions fluam pela parede do funil, permitindo que a corrente e a interação com as paredes predominem sobre a interação entre os skyrmions.

Ilustrações dos skyrmions sob o movimento periódico são demonstradas na Figura 5.4 e no material suplementar do artigo originado por esta dissertação¹¹², o qual inclui um vídeo ilustrando o processo de aniquilação para $t < 17 \text{ ns}$ e o movimento periódico para $t > 17 \text{ ns}$.

Figura 5.4 - Figuras das configurações dos skyrmions em diferentes momentos ilustrando o movimento periódico dos skyrmions contendo um total de 9 skyrmions ($Q_f = 9$) com $j = 1.36 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ e $O = 12.5 \text{ nm}$ para diferentes tempos após o fim do processo de aniquilação



Fonte: Rocha *et al.* (2023) ¹¹².

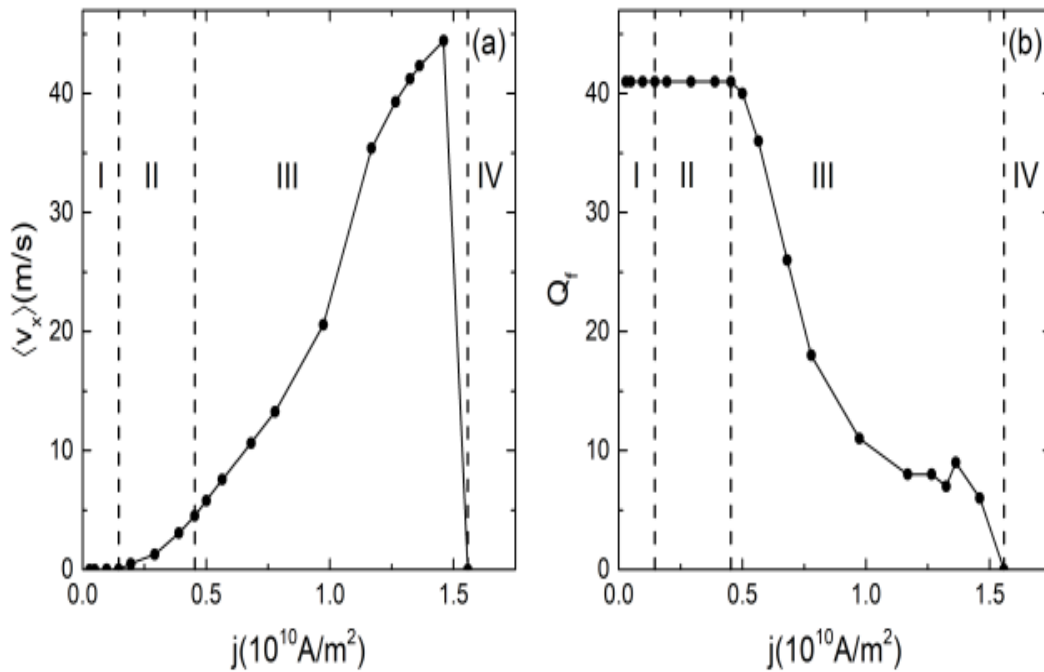
Legenda: Valores de tempo (a) $t = 79.0 \text{ ns}$. (b) $t = 79.1 \text{ ns}$. (c) $t = 79.3 \text{ ns}$. (d) $t = 79.5 \text{ ns}$.

5.3 Corrente de transporte

Nas seções anteriores, foi demonstrado que a densidade da corrente aplicada pode afetar significativamente o comportamento dos skyrmions e determinar quando o processo de aniquilação pode acontecer. O próximo passo foi investigar detalhadamente como a magnitude da corrente pode modificar a dinâmica dos skyrmions. A abertura do funil foi fixada em $O = 12 \text{ nm}$ e as correntes variaram em um intervalo entre $0.03 \times 10^{10} \text{ A/m}^2 \leq j \leq 1.58 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$.

Na Figura 5.5 (a), foram plotadas as velocidades no eixo x $\langle V_x \rangle$ vs. a densidade de corrente aplicada j . Foi encontrado um incremento monotônico em $\langle V_x \rangle$ com o incremento da corrente para $j = 1.45 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$. Na região com centros de *pinning*, denominada de região I, os skyrmions exibem um movimento transiente, e uma compressão suave contra as paredes do funil.

Figura 5.5 – Gráficos da velocidade média dos skyrmions e da Carga topológica em função da Corrente para o sistema com aniquilação



Fonte: Rocha *et al.* (2023) ¹¹².

Legenda: (a) $\langle V_x \rangle$ e (b) carga topológica final Q_f vs. a corrente aplicada j em um sistema com uma abertura fixa $O = 12.5 \text{ nm}$. As linhas pontilhadas indicam as fronteiras de quatro fases dinâmicas: I - sem movimento, II - movimento sem aniquilação, III - movimento com aniquilação e IV - aniquilação completa dos skyrmions. Existe um incremento monotônico em $\langle V_x \rangle$ com aumento de j até que todos os skyrmions da amostra sejam aniquilados, o que ocorre para valores de corrente acima de $j \geq 1.56 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$. Q_f exibe um comportamento de estabilidade nas regiões entre I e II, seguidas de um comportamento monotônico de queda (até $Q_f = 0$) conforme j aumenta.

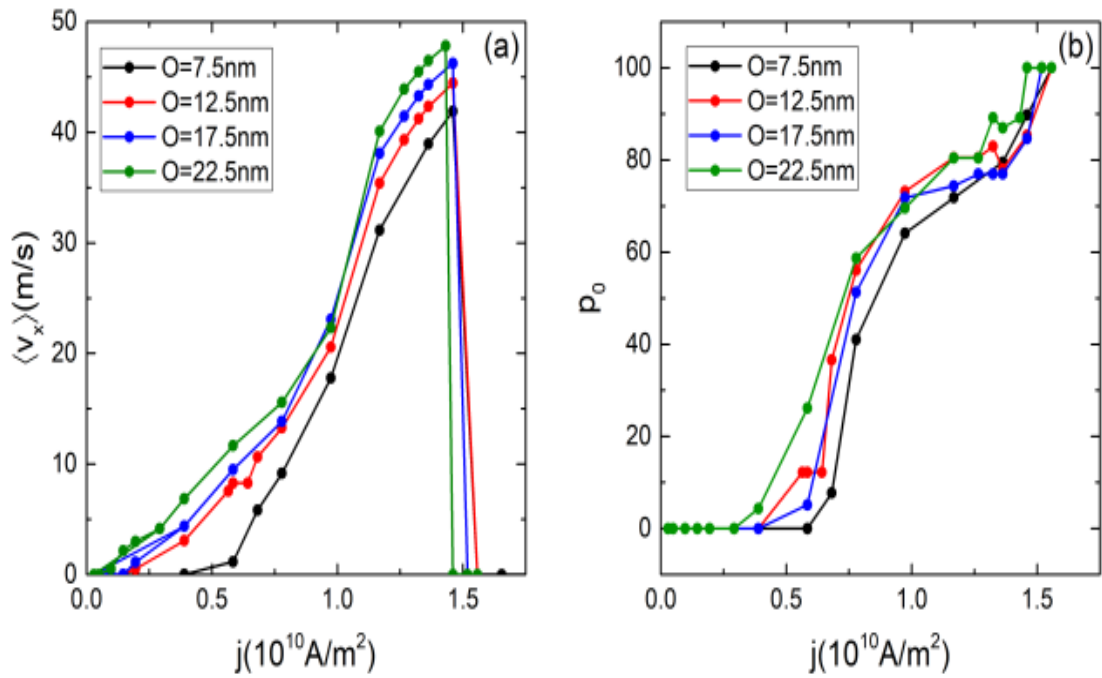
A região II é onde ocorre movimento sem aniquilação e se inicia quando os skyrmions são movidos com corrente suficiente para vencer a barreira de potencial do afunilamento do funil, um valor de $j = 0.15 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$. A Figura 5.5 (b) indica a carga topológica vs. j e mostra que nas regiões I e II, a carga topológica permanece constante até $Q_f = 41$. É importante ressaltar que para cada valor de j aplicado, primeiramente os skyrmions foram

estabilizados na amostra com $j = 0$ e posteriormente a corrente externa foi aplicada, o que pode resultar na mudança na carga topológica representada em 5.5 (b). Na Figura 5.5 (b), foi representado apenas o valor da carga topológica final Q_f vs. a corrente aplicada j , ou seja, apenas o valor da carga topológica após a estabilização do sistema. Na região III, para $j > 0.45 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$, os skyrmions se movimentam, mas o processo de aniquilação ocorre e o número de skyrmions na amostra diminui com o aumento de j , resultando no aumento da velocidade média dos skyrmions. Existem algumas pequenas oscilações na carga topológica Q_f quando $j \approx 1.25 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ e isto é resultado da baixa quantidade de skyrmions na amostra para estas grandes correntes. O aumento de velocidade resulta em colisões mais fortes contra as paredes do funil, deformando ainda mais os skyrmions e iniciando o processo de aniquilação que foi descrito anteriormente. O incremento monotônico de $\langle V_x \rangle$ com j nas regiões II e III é consequência do aumento da velocidade (*Magnus velocity boost*) causado pelos skyrmions que deslizam sobre as paredes. Na região IV, para $j > 1.45 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ existe uma aniquilação completa de todos os skyrmions na amostra e a velocidade média do sistema rapidamente vai a zero.

5.4 Abertura do Funil

Até este ponto foram considerados skyrmions interagindo com uma rede de funis de abertura fixada em $O = 12.5 \text{ nm}$. O próximo passo envolveu a mudança do tamanho da abertura e a análise de como isso influenciou a dinâmica uma vez que o tamanho da abertura impacta diretamente no efeito *bottleneck* (quando os skyrmions se acumulam e ficam presos no gargalo do funil). Aberturas pequenas aumentam este efeito, enquanto aberturas maiores o reduzem, isto demonstra a importância da análise da variação da abertura no transporte e na aniquilação dos skyrmions, assim como em sua dinâmica. As aberturas foram variadas em um intervalo $5 \text{ nm} \leq O \leq 25 \text{ nm}$ para corrente aplicadas em um intervalo $0.03 \times 10^{10} \text{ A/m}^2 \leq j \leq 1.58 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$.

Figura 5.6 – Gráfico da Velocidade média dos skyrmions $\langle V_x \rangle$ vs Taxa de aniquilação p_0



Fonte: Rocha *et al.* (2023) ¹¹².

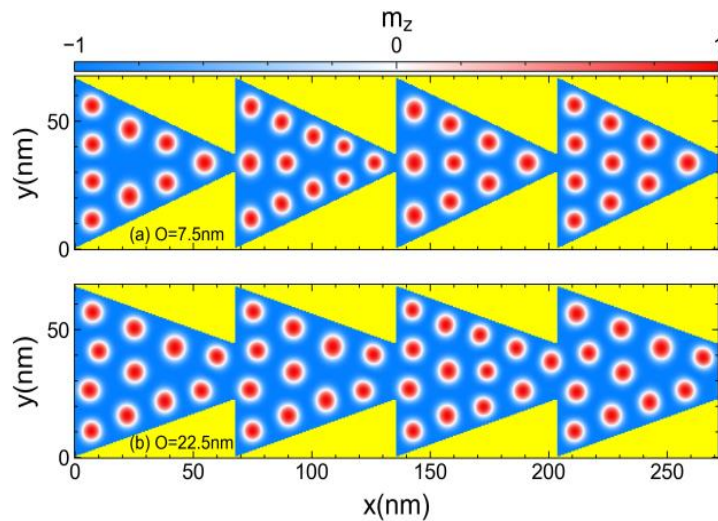
Legenda: (a) Velocidade média dos skyrmions $\langle V_x \rangle$ e (b) Probabilidade de aniquilação p_0 que mostra a porcentagem de skyrmions aniquilados durante a simulação vs. a corrente aplicada j para quatro valores diferentes de abertura O dos funis: $O = 7.5 \text{ nm}$ (linha preta), $O = 12.5 \text{ nm}$ (vermelha), $O = 17.5 \text{ nm}$ (azul) e $O = 22.5 \text{ nm}$ (verde).

Na Figura 5.6 foi plotada a média da velocidade $\langle V_x \rangle$, e a probabilidade de aniquilação p_0 versus a densidade da corrente aplicada para diferentes aberturas de funil. Aqui p_0 descreve a fração de skyrmions presentes originalmente na amostra e que são aniquilados quando o estado estacionário é alcançado. O comportamento geral de ambos $\langle V_x \rangle$ e p_0 não muda quando existe variação na abertura do funil, em vez disso, os valores de j em que as diferentes fases se iniciam é alterado conforme O muda. O valor limite da corrente de *depinning* diminui à medida que O aumenta. Por exemplo, para $O = 7.5 \text{ nm}$ foi encontrado que o valor de *depinning* é $j = 0.39 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$, o que é muito maior do que o valor de *depinning* $j = 0.05 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ para $O = 22.5 \text{ nm}$.

Aberturas pequenas aumentam o efeito *bottleneck*, fazendo com que seja necessária mais energia para que os skyrmions sofram deformação a fim de atravessar a barreira de energia

que separa os funis adjacentes. Conforme a abertura aumenta, menos energia é necessária para que os skyrmions se movam e as correntes de *depinning* são menores. A Figura 5.6 (b) mostra a probabilidade de extinção p_0 para uma fração de skyrmions que estão submetidos a uma redução das correntes de *depinning*. Ainda nesta mesma imagem a fração de skyrmions aniquilada de acordo com o valor de j é mostrada. Pequenas diferenças aparecem conforme a abertura do funil muda, mas de maneira geral o comportamento é o mesmo. Existe um platô livre de aniquilação em regiões que abrangem baixas correntes. A Figura 5.5 (b) mostra as regiões I e II onde os skyrmions permanecem aprisionados ou podem fluir sem aniquilação, seguidos da região III onde ocorre aniquilação que aumenta até a região IV para altas correntes. O início do processo de aniquilação vai para valores menores de j com o aumento da abertura do funil, pois funis com aberturas maiores permitem que mais skyrmions possam se estabilizar na amostra, uma vez que existe mais espaço livre para estabilização dos skyrmions e o campo magnético é mantido constante. Com mais skyrmions na amostra, a interação skyrmion-skyrmion se torna mais importante, contribuindo para o processo de aniquilação.

Figura 5.7 - Figura obtida a partir da simulação para uma rede de skyrmions em equilíbrio obtida com $j = 0$ para diferentes aberturas de funil.



Fonte: Rocha *et al.* (2023) ¹¹².

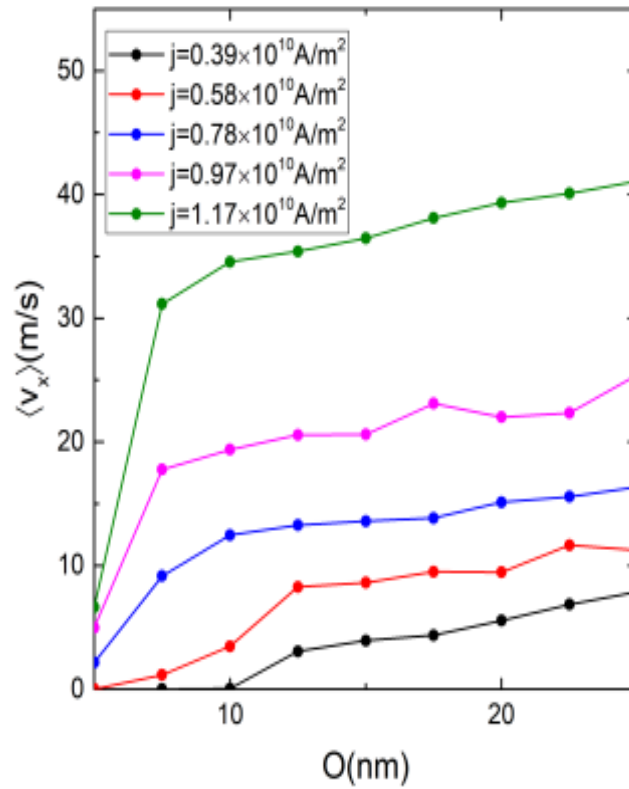
Legenda: valores de abertura (a) $O = 7.5 \text{ nm}$, (b) $O = 22.25 \text{ nm}$. Em (a) existem $Q = 39$ skyrmions e em (b) existem $Q = 46$ skyrmions. Alguns skyrmions podem ser estabilizados quando a abertura do funil é reduzida, o que afeta a dinâmica quando a corrente é aplicada.

A Figura 5.7 mostra os estados iniciais de mínimas energias obtidos com $j = 0$ para os sistemas com $O = 7.5 \text{ nm}$ e $O = 22.5 \text{ nm}$. Para $O = 22.5 \text{ nm}$ na Figura 5.7 (b) as pontas mais largas dos funis permitem um maior espaçamento e acomodação dos skyrmions na amostra, resultando em uma estabilização com $Q = 46$ skyrmions. Por outro lado, para $O = 7.5 \text{ nm}$, o menor espaçamento proporciona a estabilização com $Q = 39$ skyrmions. Como consequência, quando uma corrente é aplicada em $O = 22.5 \text{ nm}$, existe uma grande compressão de skyrmions contra as paredes inferiores do funil. Este aumento de pressão favorece o aumento da aniquilação dos skyrmions e um grande valor de p_0 . Em contrapartida, para $O = 7.5 \text{ nm}$ na Figura 5.7 (a), a diminuição no número de skyrmions que foram estabilizados na amostra, causa também uma diminuição na pressão exercida nas paredes inferiores do funil quando uma força de transporte é aplicada. Finalmente, quando as aberturas se tornam maiores, a orientação das paredes do funil é quase paralela ao eixo x e perpendicular à força aplicada na direção $-y$. Isto faz com que funis com aberturas maiores sejam mais efetivos em exercer pressão contra a linha inferior de skyrmions (próximos as paredes inferiores) e reduzir a corrente limite na qual a aniquilação ocorre.

Na Figura 5.8, foram graficados $\langle V_x \rangle$ vs. a abertura do funil O para diversos valores de corrente a fim de ilustrar com maior precisão como a velocidade de transporte dos skyrmions é afetada pela abertura do funil. Foi encontrado um crescimento monotônico em $\langle V_x \rangle$ que acompanha o crescimento de O para todos os valores da corrente externa j . O incremento em $\langle V_x \rangle$ tende a uma saturação à medida que O se tornar mais largo. Esta saturação varia de acordo com a magnitude da corrente aplicada, quanto maiores as correntes, maiores as velocidades de saturação. Conforme o funil se torna muito largo, a própria estrutura do funil deixa de influenciar o movimento, fazendo com que o sistema se torne parecido com o caso das *racetracks* ^{36,73,119}.

Para baixos valores de corrente aplicada, como $j = 0.39 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ os skyrmions não podem ser transportados quando $O \leq 10 \text{ nm}$, devido ao efeito de engarrafamento. O limite da corrente de *depinning* também diminui para pequenos valores de O . Por exemplo, para $j = 0.58 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ o valor de abertura necessário para que ocorra o *depinning* é em torno de $O = 5 \text{ nm}$.

Figura 5.8 – Gráfico de $\langle V_x \rangle$ vs abertura do funil O para diferentes valores j

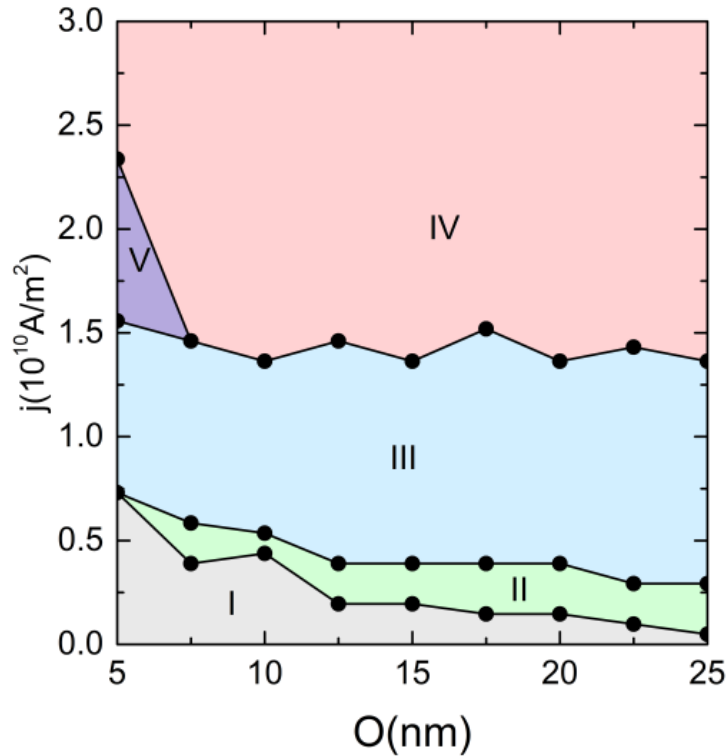


Fonte: Rocha *et al.* (2023)¹¹².

Legenda: Valores de corrente aplicados, $j = 0.39 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ (linha preta), $j = 0.58 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ (vermelha), $j = 0.78 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ (azul), $j = 0.97 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ (magenta) e $j = 1.17 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$ (verde).

Para sistematizar o comportamento geral de transporte dos skyrmions na geometria de funis, a Figura 5.9 mostra o diagrama de fases como função da corrente j aplicada vs. a abertura do funil O , onde destacam-se cinco regimes. A região I, é a fase estática ou a fase *pinned*, onde os skyrmions não exibem movimento resultante e está presente para todos os valores de O considerados neste trabalho, mas o limiar de valor de corrente que determina a existência desta fase diminui com o aumento da abertura O . Para pequenos valores de O , a região I se torna mais proeminente devido ao engarrafamento dos skyrmions produzido por um forte acúmulo dos skyrmions (efeito *bottleneck*). Na região II, os skyrmions são transportados através dos funis sem que ocorra aniquilação e o número de skyrmions é conservado. Esta região aparece em um intervalo curto de corrente e desaparece quando $O \leq 5 \text{ nm}$. Quando $O = 5 \text{ nm}$, a abertura do funil é muito pequena para permitir a passagem de skyrmions estáveis. E a parte que se move de um funil para o outro sofre forte deformação seguida de aniquilação, e, portanto, não há passagem para os demais funis.

Figura 5.9 – Diagrama de fases em função da corrente aplicada j versus a abertura do funil O , evidenciando cinco diferentes regiões



Fonte: Rocha *et al.* (2023)¹¹².

Legenda: Região I (cinza) - sem movimento. Região II (verde) – movimento sem aniquilação. Região III (azul claro) – movimento com aniquilação. Região IV (vermelho) – aniquilação de todos os skyrmions. Região V (roxo) – fase de *pinning* reentrante onde não existe movimento dos skyrmions.

A região III consiste no transporte de skyrmions com aniquilação parcial. Aqui, os skyrmions podem ser transportados através dos funis, mas com uma parte sofrendo aniquilação. Nesta fase, os skyrmions são transportados através do funil, porém apenas uma fração representada por p_0 (sendo que $p_0 > 0$) dos skyrmions originais presentes na amostra são aniquilados. Esta aniquilação resulta primeiramente da aplicação da corrente que produz uma pressão dos skyrmions diretamente contra as paredes inferiores e de outros skyrmions localizados acima que pressionam os skyrmions de baixo. Isto faz com que os skyrmions inferiores encolham e se deformem a ponto de serem aniquilados. Na região IV, ocorre a aniquilação completa dos skyrmions. O valor limite de j para que isto ocorra é quase que independente de O e está próximo de $j \approx 1.5 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$. Isto é esperado por conta do valor crítico da corrente que aniquila os skyrmions, o qual depende exclusivamente da pressão exercida pela força de transporte e não do ângulo das paredes do funil ou das interações skyrmion-skyrmion. Para aberturas muito pequenas $O < 7.5 \text{ nm}$, foi encontrada uma fase de

pinning reentrante denominada de fase V. Neste regime, os skyrmions começam a ser aniquilados quando a corrente externa é aplicada, mas somente alguns poucos skyrmions permanecem na amostra e se tornam incapazes de passar através das aberturas pequenas que separam os funis, resultando em uma nova configuração estática (*pinned*). Para estas aberturas pequenas, o transporte de um funil até outro é majoritariamente definido pelas interações coletivas dos skyrmions, onde cada skyrmion empurra o skyrmion vizinho pela ponta do funil em um processo de reação em cadeia. Quando a corrente atinge a fronteira inferior da região V, a maioria dos skyrmions da amostra é aniquilada e este movimento coletivo é destruído, o que aprisiona os skyrmions dentro dos funis, fazendo com que fiquem sem movimento líquido.

6 CONCLUSÃO

Através da utilização de simulações atomísticas, neste trabalho investigamos o comportamento dinâmico de uma rede de skyrmions interagindo com uma rede de *pinnings* de geometria do tipo funil. O sistema recebeu a aplicação de diferentes valores de correntes de spins polarizados. A direção escolhida para aplicação das correntes foi $-y$, ou seja, perpendicular ao eixo do funil. Foi observado que os skyrmions são transportados pelas correntes devido a uma combinação da força de Magnus e dos efeitos coletivos entre os skyrmions. Para valores de corrente logo acima do valor de *depinning*, os skyrmions podem ser transportados sem que ocorra aniquilação. Para valores intermediários os skyrmions se movem, porém alguns skyrmions são destruídos no processo, como resultado da interação skyrmion-parede do funil e das interações skyrmion-skyrmion. A corrente externa aplicada faz com que os skyrmions da parte de cima do funil exerçam pressão sobre os skyrmions da parte inferior, causando deformação até o ponto em que os skyrmions inferiores são aniquilados. Conforme os skyrmions são aniquilados, as interações coletivas são reduzidas e os skyrmions remanescentes se movem mais livremente através dos funis. Para altos valores de corrente, como por exemplo $j \approx 1.5 \times 10^{10} \text{ A/m}^2$, a pressão provocada pela corrente aplicada é tão forte que todos os skyrmions são simplesmente aniquilados. Foi demonstrado também que o tamanho da abertura do funil desempenha um papel importante em sua dinâmica. É necessário que haja mais energia para que os skyrmions passem através de aberturas menores, uma vez que precisam se deformar de uma forma significativa para passar pela abertura e como resultado, à medida que as aberturas dos funis diminuem, o movimento se inicia para correntes cada vez maiores. Para aberturas maiores, os skyrmions se deformam menos e necessitam de menos energia para passar através da abertura. O valor de início da aniquilação diminui à medida que a abertura aumenta. Aberturas grandes proporcionam mais espaço livre onde os skyrmions podem se estabilizar sem aplicação de corrente e com um campo magnético fixo. Quando a corrente é aplicada, a densidade de skyrmions aumenta a pressão induzida pela corrente nos skyrmions superiores e como consequência o valor limite da aniquilação diminui nos funis com este tipo de abertura.

Uma consideração importante a se fazer acerca de nossas simulações está relacionada à razão D/J , a qual foi mantida fixa em $D/J = 0.18$ (exceto nos cálculos do apêndice A). Uma vez que o campo magnético aplicado é constante, a razão D/J afeta o tamanho dos skyrmions. Um aumento nesta taxa resulta na redução do tamanho dos skyrmions^{69,120,121}, o que por sua

vez afeta os comportamentos de deformação e aniquilação, já que skyrmions menores passam a se comportar de forma similar a corpos rígidos ¹¹⁵. As deformações observadas nas simulações apresentadas poderiam ser menos frequentes ou não ocorrer caso D/J fosse maior e o sistema poderia ser bem similar ao que foi observado utilizando o modelo de partículas ⁶⁹, onde os efeitos coletivos dos skyrmions foram estudados em geometrias do tipo funil. Em outra publicação ⁶⁹, nosso grupo investigou os efeitos de engarrafamento (*jamming*) e de obstrução (*clogging*) dos skyrmions através de um modelo baseado em partículas ¹⁷, onde os efeitos de aniquilação não foram considerados devido às limitações do modelo utilizado. Porém nesta dissertação, conseguimos analisar o impacto destes efeitos devido ao detalhamento oferecido pelo modelo atomístico, o que permitiu investigar em maiores detalhes as perturbações externas, deformações e aniquilações ocorridas no sistema.

Um detalhe interessante que foi observado é que a velocidade média dos skyrmions apresenta oscilações, que são resultantes das interações coletivas do sistema, conforme mostrado na Figura 6.3. Além disso, é possível visualizar os skyrmions se movimentando em uma fase sem aniquilação, uma fase com aniquilação parcial e uma fase com aniquilação total, além de uma fase de *pinning* reentrante (para aberturas estreitas).

Esta nuance de detalhes não foi observada em simulações com o modelo baseado em partículas ⁶⁹, pois os resultados com este modelo são aplicáveis a skyrmions muito pequenos (devido a semelhança com corpos rígidos). Para os casos de D/J pequenos (comparados com o que foi apresentado nesta dissertação) os skyrmions poderiam ser maiores, se deformar mais e ser aniquilados com mais facilidade. Em contrapartida devido ao seu tamanho maior, supõe-se que estes skyrmions experimentariam uma dificuldade maior em passar pela abertura do funil. Mudar D/J pode levar a resultados distintos do que foi apresentado aqui e a novas direções em trabalhos futuros.

Os resultados das simulações apresentadas podem auxiliar as linhas de pesquisa experimentais e algumas técnicas para validar o que foi simulado incluem a obtenção de imagens de skyrmions pela técnica MOKE (*magneto-optic Kerr effect*) ¹²², microscopia de Lorentz, TEM (*transmission electron microscopy*) ⁹, MFM (*magnetic force microscopy*) ¹²³ e outras técnicas para medir diferenças no efeito Hall topológico ⁶⁸. Mudanças no efeito Hall topológico podem ser utilizadas para detectar campos elétricos emergentes, os quais são proporcionais à velocidade dos skyrmions. Estes métodos são adequados para uma detecção quantitativa da velocidade dos skyrmions e das fases dinâmicas que foram observadas nas simulações desta dissertação.

Outra observação importante diz respeito aos efeitos de temperatura, os quais não foram considerados neste trabalho. Porém, é esperado que flutuações térmicas possam induzir a um efeito de skyrmion *creep motion* ¹²⁴ para correntes baixas, afetando o processo de aniquilação e a localização dos pontos de transição das fases dinâmicas. Foi demonstrado recentemente ¹²⁵ que em temperaturas baixas, um único skyrmion pode ser criado ou aniquilado, porém para altas temperaturas, uma singularidade de Bloch é encontrada nas extremidades dos skyrmions. Isto pode afetar os mecanismos de aniquilação apresentados em nossos resultados, indicando que simulações que consideram efeitos de temperatura também possuem uma perspectiva interessante no entendimento da dinâmica de skyrmions. Outros aspectos que podem afetar a dinâmica deste sistema são imperfeições como vacâncias, impurezas ou grãos com valores diferentes de anisotropia que podem contribuir com um efeito extra de *pinning* ^{25,126} e afetar o processo de aniquilação. Além disso, variações na constante de Dzyaloshinskii-Moriya (devido à diferenças encontradas em regiões distintas da amostra) podem mudar a helicidade dos skyrmions e consequentemente sua dinâmica ¹²⁷. As implicações das imperfeições do material também são um tópico de bastante interesse para pesquisas futuras.

De maneira geral, a pesquisa apresentada neste trabalho elucida alguns comportamentos envolvendo o efeito coletivo, a dinâmica e a aniquilação que ocorre em sistemas nanométricos de skyrmions sob o efeito de *pinning*s com geometria em formato de funil quando estes recebem a aplicação de uma corrente de spins polarizados. Através de nossas simulações foi possível caracterizar quais valores de abertura (O) e quais valores de corrente (j) permitem a movimentação de skyrmions sem aniquilação. Estes resultados apontam perspectivas interessantes no que diz respeito à utilização de skyrmions como portadores de informação, uma vez que para esta finalidade é importante controlar o movimento e a aniquilação dos skyrmions. Isto pode ser evidenciado pois em determinadas faixas de valores de O e de j , os skyrmions apresentam as duas características almejadas: Um eixo (em nosso caso, o eixo x) onde ocorre movimento líquido, e a conservação da carga topológica Q (ausência de aniquilação) a partir de um certo intervalo de tempo t . Foi observado que a interação com as paredes representa um ganho de velocidade no eixo de movimento devido ao efeito *Magnus velocity boost*. Após a análise dos resultados, é esperado que os sistemas propostos neste trabalho possam ser implementados e se tornem uma alternativa na criação de novos dispositivos spintrônicos baseados em skyrmions.

7 REFERÊNCIAS

- 1 SKYRME, T. H. R. A unified field theory of mesons and baryons. **Nuclear Physics**, [s. l.], v. 31, p. 556–569, 1 mar. 1962. ISSN 0029-5582. DOI 10.1016/0029-5582(62)90775-7.
- 2 BERTOLO, L. **Propriedades do Espaço**. [S. l.: s. n.], [s. d.]. Disponível em: https://www.bertolo.pro.br/fisica_cosmologia/Cosmologia/Cosmology/Properties-of-Space.htm. Acesso em: 7 set. 2024.
- 3 BOGDANOV, A. N.; YABLONSKII, D. A. Thermodynamically stable “vortices” in magnetically ordered crystals. The mixed state of magnets. **Soviet Physics JETP**, [s. l.], v. 68, n. 1, p. 101, 20 abr. 1988.
- 4 RÖSSLER, U. K.; BOGDANOV, A. N.; PFLEIDERER, C. Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals. **Nature**, [s. l.], v. 442, n. 7104, p. 797–801, 17 ago. 2006. ISSN 0028-0836. DOI 10.1038/nature05056.
- 5 MÜHLBAUER, S. et al. Skyrmion Lattice in a Chiral Magnet. **Science**, [s. l.], v. 323, n. 5916, p. 915–919, 13 fev. 2009. ISSN 0036-8075, 1095-9203. DOI 10.1126/science.1166767.
- 6 WOO, S. et al. Observation of room-temperature magnetic skyrmions and their current-driven dynamics in ultrathin metallic ferromagnets. **Nature Materials**, [s. l.], v. 15, n. 5, p. 501–506, maio 2016. ISSN 1476-1122, 1476-4660. DOI 10.1038/nmat4593.
- 7 IWASAKI, J.; MOCHIZUKI, M.; NAGAOSA, N. Universal current-velocity relation of skyrmion motion in chiral magnets. **Nature Communications**, [s. l.], v. 4, p. ncomms2442, 12 fev. 2013. ISSN 2041-1723. DOI 10.1038/ncomms2442.
- 8 FERT, A.; CROS, V.; SAMPAIO, J. Skyrmions on the track. **Nature Nanotechnology**, [s. l.], v. 8, n. 3, p. 152–156, mar. 2013. ISSN 1748-3387. DOI 10.1038/nnano.2013.29.
- 9 YU, X. Z. et al. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal. **Nature**, [s. l.], v. 465, n. 7300, p. 901–904, 17 jun. 2010. ISSN 0028-0836. DOI 10.1038/nature09124.
- 10 ABRIKOSOV, A. A. The magnetic properties of superconducting alloys. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, [s. l.], v. 2, n. 3, p. 199–208, jan. 1957. ISSN 00223697. DOI 10.1016/0022-3697(57)90083-5.
- 11 VAKILI, H. et al. Skyrmionics—Computing and memory technologies based on topological excitations in magnets. **Journal of Applied Physics**, [s. l.], v. 130, n. 7, p. 070908, 1 ago. 2021. ISSN 0021-8979, 1089-7550. DOI 10.1063/5.0046950.
- 12 SONIN, E. B. Magnus force in superfluids and superconductors. **Physical Review B**, [s. l.], v. 55, n. 1, p. 485–501, 1 jan. 1997. ISSN 0163-1829, 1095-3795. DOI 10.1103/PhysRevB.55.485.
- 13 GRUBER, R. et al. Skyrmion pinning energetics in thin film systems. **Nature Communications**, [s. l.], v. 13, n. 1, p. 3144, 6 jun. 2022. ISSN 2041-1723. DOI 10.1038/s41467-022-30743-4.

- 14 LIU, Y.-H.; LI, Y.-Q. A mechanism to pin skyrmions in chiral magnets. **Journal of Physics: Condensed Matter**, [s. l.], v. 25, n. 7, p. 076005, jan. 2013. ISSN 0953-8984. DOI 10.1088/0953-8984/25/7/076005.
- 15 GONG, X.; JING, K. Y.; LU, J.; WANG, X. R. Skyrmion pinning by disk-shaped defects. **Physical Review B**, [s. l.], v. 105, n. 9, p. 094437, 29 mar. 2022. ISSN 2469-9950, 2469-9969. DOI 10.1103/PhysRevB.105.094437.
- 16 STOSIC, D.; LUDERMIR, T. B.; MILOŠEVIĆ, M. V. Pinning of magnetic skyrmions in a monolayer Co film on Pt(111): Theoretical characterization and exemplified utilization. **Physical Review B**, [s. l.], v. 96, n. 21, p. 214403, 1 dez. 2017. ISSN 2469-9950, 2469-9969. DOI 10.1103/PhysRevB.96.214403.
- 17 LIN, S.-Z.; REICHHARDT, C.; BATISTA, C. D.; SAXENA, A. Particle model for skyrmions in metallic chiral magnets: Dynamics, pinning, and creep. **Physical Review B**, [s. l.], v. 87, n. 21, p. 214419, 17 jun. 2013. DOI 10.1103/PhysRevB.87.214419.
- 18 THIELE, A. A. Steady-State Motion of Magnetic Domains. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 30, n. 6, p. 230–233, 5 fev. 1973. DOI 10.1103/PhysRevLett.30.230.
- 19 BOHLEIN, T.; BECHINGER, C. Experimental Observation of Directional Locking and Dynamical Ordering of Colloidal Monolayers Driven across Quasiperiodic Substrates. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 109, n. 5, p. 058301, 31 jul. 2012. DOI 10.1103/PhysRevLett.109.058301.
- 20 REICHHARDT, C.; OLSON REICHHARDT, C. J. Directional locking effects and dynamics for particles driven through a colloidal lattice. **Physical Review E**, [s. l.], v. 69, n. 4, p. 041405, 30 abr. 2004. DOI 10.1103/PhysRevE.69.041405.
- 21 YU, X. Z. et al. Near room-temperature formation of a skyrmion crystal in thin-films of the helimagnet FeGe. **Nature Materials**, [s. l.], v. 10, n. 2, p. 106–109, fev. 2011. ISSN 1476-4660. DOI 10.1038/nmat2916.
- 22 SPALDIN, N. A. **Magnetic materials: fundamentals and device applications**. Cambridge, Uk ; New York: Cambridge University Press, 2003. 213 p. ISBN 978-0-521-81631-1.
- 23 MA, F.; REICHHARDT, C.; GAN, W.; REICHHARDT, C. J. O.; LEW, W. S. Emergent geometric frustration of artificial magnetic skyrmion crystals. **Physical Review B**, [s. l.], v. 94, n. 14, p. 144405, 5 out. 2016. ISSN 2469-9950, 2469-9969. DOI 10.1103/PhysRevB.94.144405.
- 24 REICHHARDT, C.; RAY, D.; REICHHARDT, C. J. O. Quantized transport for a skyrmion moving on a two-dimensional periodic substrate. **Physical Review B**, [s. l.], v. 91, n. 10, p. 104426, 26 mar. 2015. DOI 10.1103/PhysRevB.91.104426.
- 25 REICHHARDT, C.; RAY, D.; REICHHARDT, C. J. O. Collective Transport Properties of Driven Skyrmions with Random Disorder. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 114, n. 21, p. 217202, 27 maio 2015. DOI 10.1103/PhysRevLett.114.217202.

- 26 DÍAZ, S. A.; REICHHARDT, C. J. O.; AROVAS, D. P.; SAXENA, A.; REICHHARDT, C. Fluctuations and noise signatures of driven magnetic skyrmions. **Physical Review B**, [s. l.], v. 96, n. 8, p. 085106, 2 ago. 2017. DOI 10.1103/PhysRevB.96.085106.
- 27 CHUDNOVSKY, E. M.; GARANIN, D. A. Skyrmion glass in a 2D Heisenberg ferromagnet with quenched disorder. **New Journal of Physics**, [s. l.], v. 20, n. 3, p. 033006, 27 mar. 2018. ISSN 1367-2630. DOI 10.1088/1367-2630/aab576.
- 28 REICHHARDT, C.; REICHHARDT, C. J. O. Nonlinear transport, dynamic ordering, and clustering for driven skyrmions on random pinning. **Physical Review B**, [s. l.], v. 99, n. 10, p. 104418, 14 mar. 2019. ISSN 2469-9950, 2469-9969. DOI 10.1103/PhysRevB.99.104418.
- 29 REICHHARDT, C.; REICHHARDT, C. J. O. Noise fluctuations and drive dependence of the skyrmion Hall effect in disordered systems. **New Journal of Physics**, [s. l.], v. 18, n. 9, p. 095005, set. 2016. ISSN 1367-2630. DOI 10.1088/1367-2630/18/9/095005.
- 30 REICHHARDT, C.; REICHHARDT, C. J. O. Shapiro spikes and negative mobility for skyrmion motion on quasi-one-dimensional periodic substrates. **Physical Review B**, [s. l.], v. 95, n. 1, p. 014412, 12 jan. 2017. DOI 10.1103/PhysRevB.95.014412.
- 31 NAVAU, C.; DEL-VALLE, N.; SANCHEZ, A. Analytical trajectories of skyrmions in confined geometries: Skyrmionic racetracks and nano-oscillators. **Physical Review B**, [s. l.], v. 94, n. 18, p. 184104, 10 nov. 2016. ISSN 2469-9950, 2469-9969. DOI 10.1103/PhysRevB.94.184104.
- 32 REICHHARDT, C.; REICHHARDT, C. J. O. Vortex molecular crystal and vortex plastic crystal states in honeycomb and kagomé pinning arrays. **Physical Review B**, [s. l.], v. 76, n. 6, p. 064523, 17 ago. 2007. DOI 10.1103/PhysRevB.76.064523.
- 33 HILLEBRANDS, B.; OUNADJELA, K. **Spin Dynamics in Confined Magnetic Structures II**. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2003. (Topics in Applied Physics, 87). ISBN 978-3-540-46097-8.
- 34 HSU, P.-J.; KUBETZKA, A.; FINCO, A.; ROMMING, N.; VON BERGMANN, K.; WIESENDANGER, R. Electric-field-driven switching of individual magnetic skyrmions. **Nature Nanotechnology**, [s. l.], v. 12, n. 2, p. 123–126, fev. 2017. ISSN 1748-3387, 1748-3395. DOI 10.1038/nnano.2016.234.
- 35 IWASAKI, J.; MOCHIZUKI, M.; NAGAOSA, N. Current-induced skyrmion dynamics in constricted geometries. **Nature Nanotechnology**, [s. l.], v. 8, n. 10, p. 742–747, out. 2013. ISSN 1748-3395. DOI 10.1038/nnano.2013.176.
- 36 SAMPAIO, J.; CROS, V.; ROHART, S.; THIAVILLE, A.; FERT, A. Nucleation, stability and current-induced motion of isolated magnetic skyrmions in nanostructures. **Nature Nanotechnology**, [s. l.], v. 8, n. 11, p. 839–844, nov. 2013. ISSN 1748-3395. DOI 10.1038/nnano.2013.210.
- 37 CORTÉS-ORTUÑO, D. et al. Thermal stability and topological protection of skyrmions in nanotracks. **Scientific Reports**, [s. l.], v. 7, n. 1, p. 4060, 22 jun. 2017. ISSN 2045-2322. DOI 10.1038/s41598-017-03391-8.

- 38 BESSARAB, P. F.; UZDIN, V. M.; JÓNSSON, H. Method for finding mechanism and activation energy of magnetic transitions, applied to skyrmion and antivortex annihilation. **Computer Physics Communications**, [s. l.], v. 196, p. 335–347, nov. 2015. ISSN 00104655. DOI 10.1016/j.cpc.2015.07.001.
- 39 ROHART, S.; MILTAT, J.; THIAVILLE, A. Path to collapse for an isolated Néel skyrmion. **Physical Review B**, [s. l.], v. 93, n. 21, p. 214412, 14 jun. 2016. ISSN 2469-9950, 2469-9969. DOI 10.1103/PhysRevB.93.214412.
- 40 ZHU, J. et al. Voltage-Induced Ferromagnetic Resonance in Magnetic Tunnel Junctions. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 108, n. 19, p. 197203, 9 maio 2012. ISSN 0031-9007, 1079-7114. DOI 10.1103/PhysRevLett.108.197203.
- 41 ZHANG, X.; EZAWA, M.; ZHOU, Y. Magnetic skyrmion logic gates: conversion, duplication and merging of skyrmions. **Scientific Reports**, [s. l.], v. 5, n. 1, p. 9400, 24 mar. 2015. ISSN 2045-2322. DOI 10.1038/srep09400.
- 42 KANG, W.; HUANG, Y.; ZHANG, X.; ZHOU, Y.; ZHAO, W. Skyrmion-Electronics: An Overview and Outlook. **Proceedings of the IEEE**, [s. l.], v. 104, n. 10, p. 2040–2061, out. 2016. ISSN 0018-9219, 1558-2256. DOI 10.1109/JPROC.2016.2591578.
- 43 INTEL. **Moore's Law and Intel Innovation**. [S. l.: s. n.], [s. d.]. Disponível em: <https://www.intel.com/content/www/us/en/history/museum-gordon-moore-law.html>. Acesso em: 16 set. 2021.
- 44 KIRKPATRICK, S.; GELATT, C. D.; VECCHI, M. P. Optimization by Simulated Annealing. **Science**, [s. l.], v. 220, n. 4598, p. 671–680, 13 maio 1983. ISSN 0036-8075, 1095-9203. DOI 10.1126/science.220.4598.671.
- 45 ZHANG, X. et al. Skyrmion-skyrmion and skyrmion-edge repulsions in skyrmion-based racetrack memory. **Scientific Reports**, [s. l.], v. 5, n. 1, p. 7643, 6 jan. 2015. ISSN 2045-2322. DOI 10.1038/srep07643.
- 46 WRIGHT, D. C.; MERMIN, N. D. Crystalline liquids: the blue phases. **Reviews of Modern Physics**, [s. l.], v. 61, n. 2, p. 385–432, 1 abr. 1989. ISSN 0034-6861. DOI 10.1103/RevModPhys.61.385.
- 47 HO, T.-L. Spinor Bose Condensates in Optical Traps. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 81, n. 4, p. 742–745, 27 jul. 1998. ISSN 0031-9007, 1079-7114. DOI 10.1103/PhysRevLett.81.742.
- 48 SONDHI, S. L.; KARLHEDE, A.; KIVELSON, S. A.; REZAYI, E. H. Skyrmions and the crossover from the integer to fractional quantum Hall effect at small Zeeman energies. **Physical Review B**, [s. l.], v. 47, n. 24, p. 16419–16426, 15 jun. 1993. DOI 10.1103/PhysRevB.47.16419.
- 49 SEKI, S.; MOCHIZUKI, M. **Skyrmions in Magnetic Materials**. 1st ed. 2016 edition ed. Cham: Springer, 20 nov. 2015. 69 p. ISBN 978-3-319-24649-9.

- 50 YU, X. et al. Variation of skyrmion forms and their stability in MnSi thin plates. **Physical Review B**, [s. l.], v. 91, n. 5, p. 054411, 17 fev. 2015. ISSN 1098-0121, 1550-235X. DOI 10.1103/PhysRevB.91.054411.
- 51 HUANG, S. X.; CHIEN, C. L. Extended Skyrmion Phase in Epitaxial FeGe (111) Thin Films. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 108, n. 26, p. 267201, 26 jun. 2012. ISSN 0031-9007, 1079-7114. DOI 10.1103/PhysRevLett.108.267201.
- 52 HEINZE, S. et al. Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions. **Nature Physics**, [s. l.], v. 7, n. 9, p. 713–718, set. 2011. ISSN 1745-2473. DOI 10.1038/nphys2045.
- 53 FERT, A.; REYREN, N.; CROS, V. Magnetic skyrmions: advances in physics and potential applications. **Nature Reviews Materials**, [s. l.], v. 2, n. 7, p. 17031, jul. 2017. ISSN 2058-8437. DOI 10.1038/natrevmats.2017.31.
- 54 ROMMING, N. et al. Writing and Deleting Single Magnetic Skyrmions. **Science**, [s. l.], v. 341, n. 6146, p. 636–639, 9 ago. 2013. DOI 10.1126/science.1240573.
- 55 HAMAMOTO, K.; EZAWA, M.; NAGAOSA, N. Purely electrical detection of a skyrmion in constricted geometry. **Applied Physics Letters**, [s. l.], v. 108, n. 11, p. 112401, 14 mar. 2016. ISSN 0003-6951, 1077-3118. DOI 10.1063/1.4943949.
- 56 BOGDANOV, A.; HUBERT, A. Thermodynamically stable magnetic vortex states in magnetic crystals. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, [s. l.], v. 138, n. 3, p. 255–269, 1 dez. 1994. ISSN 0304-8853. DOI 10.1016/0304-8853(94)90046-9.
- 57 PAPPAS, C. et al. Chiral Paramagnetic Skyrmion-like Phase in MnSi. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 102, n. 19, p. 197202, 15 maio 2009. ISSN 0031-9007, 1079-7114. DOI 10.1103/PhysRevLett.102.197202.
- 58 PFLEIDERER, C. et al. Skyrmion lattices in metallic and semiconducting B20 transition metal compounds. **Journal of Physics: Condensed Matter**, [s. l.], v. 22, n. 16, p. 164207, mar. 2010. ISSN 0953-8984. DOI 10.1088/0953-8984/22/16/164207.
- 59 ADAMS, T. et al. Long-Range Crystalline Nature of the Skyrmion Lattice in MnSi. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 107, n. 21, p. 217206, 18 nov. 2011. ISSN 0031-9007, 1079-7114. DOI 10.1103/PhysRevLett.107.217206.
- 60 TONOMURA, A. et al. Real-Space Observation of Skyrmion Lattice in Helimagnet MnSi Thin Samples. **Nano Letters**, [s. l.], v. 12, n. 3, p. 1673–1677, 14 mar. 2012. ISSN 1530-6984, 1530-6992. DOI 10.1021/nl300073m.
- 61 MÜNZER, W. et al. Skyrmion lattice in the doped semiconductor $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$. **Physical Review B**, [s. l.], v. 81, n. 4, p. 041203, 20 jan. 2010. DOI 10.1103/PhysRevB.81.041203.
- 62 SHIBATA, K. et al. Towards control of the size and helicity of skyrmions in helimagnetic alloys by spin–orbit coupling. **Nature Nanotechnology**, [s. l.], v. 8, n. 10, p. 723–728, out. 2013. ISSN 1748-3387, 1748-3395. DOI 10.1038/nnano.2013.174.

- 63 KADOWAKI, K.; OKUDA, K.; DATE, M. Magnetization and Magnetoresistance of MnSi. I. **Journal of the Physical Society of Japan**, [s. l.], v. 51, n. 8, p. 2433–2438, 15 ago. 1982. ISSN 0031-9015, 1347-4073. DOI 10.1143/JPSJ.51.2433.
- 64 NEUBAUER, A. et al. Topological Hall Effect in the A Phase of MnSi. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 102, n. 18, p. 186602, 4 maio 2009. ISSN 0031-9007, 1079-7114. DOI 10.1103/PhysRevLett.102.186602.
- 65 EVERSCHOR-SITTE, K.; MASELL, J.; REEVE, R. M.; KLÄUI, M. Perspective: Magnetic skyrmions—Overview of recent progress in an active research field. **Journal of Applied Physics**, [s. l.], v. 124, n. 24, p. 240901, 28 dez. 2018. ISSN 0021-8979. DOI 10.1063/1.5048972.
- 66 JONIETZ, F. et al. Spin Transfer Torques in MnSi at Ultralow Current Densities. **Science**, [s. l.], v. 330, n. 6011, p. 1648–1651, 17 dez. 2010. ISSN 0036-8075, 1095-9203. DOI 10.1126/science.1195709.
- 67 YU, X. Z. et al. Skyrmion flow near room temperature in an ultralow current density. **Nature Communications**, [s. l.], v. 3, p. ncomms1990, 7 ago. 2012. ISSN 2041-1723. DOI 10.1038/ncomms1990.
- 68 SCHULZ, T. et al. Emergent electrodynamics of skyrmions in a chiral magnet. **Nature Physics**, [s. l.], v. 8, n. 4, p. 301–304, abr. 2012. ISSN 1745-2473, 1745-2481. DOI 10.1038/nphys2231.
- 69 SOUZA, J. C. B.; VIZARIM, N. P.; REICHHARDT, C. J. O.; REICHHARDT, C.; VENEGAS, P. A. Clogging, diode and collective effects of skyrmions in funnel geometries. **New Journal of Physics**, [s. l.], v. 24, n. 10, p. 103030, out. 2022. ISSN 1367-2630. DOI 10.1088/1367-2630/ac9749.
- 70 ZANG, J.; MOSTOVOY, M.; HAN, J. H.; NAGAOSA, N. Dynamics of Skyrmion Crystals in Metallic Thin Films. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 107, n. 13, p. 136804, 23 set. 2011. DOI 10.1103/PhysRevLett.107.136804.
- 71 SAHA, S. et al. Formation of Néel-type skyrmions in an antidot lattice with perpendicular magnetic anisotropy. **Physical Review B**, [s. l.], v. 100, n. 14, p. 144435, 25 out. 2019. DOI 10.1103/PhysRevB.100.144435.
- 72 KERN, L.-M. et al. Deterministic Generation and Guided Motion of Magnetic Skyrmions by Focused He⁺ - Ion Irradiation. **Nano Letters**, [s. l.], v. 22, n. 10, p. 4028–4035, 25 maio 2022. ISSN 1530-6984, 1530-6992. DOI 10.1021/acs.nanolett.2c00670.
- 73 JUGE, R. et al. Helium Ions Put Magnetic Skyrmions on the Track. **Nano Letters**, [s. l.], 19 mar. 2021. DOI 10.1021/acs.nanolett.1c00136. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/epdf/10.1021/acs.nanolett.1c00136>. Acesso em: 1 set. 2023.
- 74 MÜLLER, J.; ROSCH, A. Capturing of a magnetic skyrmion with a hole. **Physical Review B**, [s. l.], v. 91, n. 5, p. 054410, 17 fev. 2015. DOI 10.1103/PhysRevB.91.054410.
- 75 KRAUSE, S.; WIESENDANGER, R. Skyrmionics gets hot. **Nature Materials**, [s. l.], v. 15, n. 5, p. 493–494, maio 2016. ISSN 1476-1122, 1476-4660. DOI 10.1038/nmat4615.

- 76 PIACENTE, G.; PEETERS, F. M. Pinning and depinning of a classic quasi-one-dimensional Wigner crystal in the presence of a constriction. **Physical Review B**, [s. l.], v. 72, n. 20, p. 205208, 30 nov. 2005. ISSN 1098-0121, 1550-235X. DOI 10.1103/PhysRevB.72.205208.
- 77 YU, K.; HESSELBERTH, M. B. S.; KES, P. H.; PLOURDE, B. L. T. Vortex dynamics in superconducting channels with periodic constrictions. **Physical Review B**, [s. l.], v. 81, n. 18, p. 184503, 10 maio 2010. ISSN 1098-0121, 1550-235X. DOI 10.1103/PhysRevB.81.184503.
- 78 REES, D. G.; TOTSUJI, H.; KONO, K. Commensurability-Dependent Transport of a Wigner Crystal in a Nanoconstriction. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 108, n. 17, p. 176801, 25 abr. 2012. ISSN 0031-9007, 1079-7114. DOI 10.1103/PhysRevLett.108.176801.
- 79 ZIMMERMANN, U.; SMALLENBURG, F.; LÖWEN, H. Flow of colloidal solids and fluids through constrictions: dynamical density functional theory versus simulation. **Journal of Physics: Condensed Matter**, [s. l.], v. 28, n. 24, p. 244019, 22 jun. 2016. ISSN 0953-8984, 1361-648X. DOI 10.1088/0953-8984/28/24/244019.
- 80 WAMBAUGH, J. F.; REICHHARDT, C.; OLSON, C. J.; MARCHESONI, F.; NORI, F. Superconducting Fluxon Pumps and Lenses. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 83, n. 24, p. 5106–5109, 13 dez. 1999. ISSN 0031-9007, 1079-7114. DOI 10.1103/PhysRevLett.83.5106.
- 81 YU, K. et al. Asymmetric weak-pinning superconducting channels: Vortex ratchets. **Physical Review B**, [s. l.], v. 76, n. 22, p. 220507, 21 dez. 2007. ISSN 1098-0121, 1550-235X. DOI 10.1103/PhysRevB.76.220507.
- 82 REICHHARDT, C. J. O.; REICHHARDT, C. Commensurability, jamming, and dynamics for vortices in funnel geometries. **Physical Review B**, [s. l.], v. 81, n. 22, p. 224516, 17 jun. 2010. ISSN 1098-0121, 1550-235X. DOI 10.1103/PhysRevB.81.224516.
- 83 VLASKO-VLASOV, V.; BENSEMAN, T.; WELP, U.; KWOK, W. K. Jamming of superconducting vortices in a funnel structure. **Superconductor Science and Technology**, [s. l.], v. 26, n. 7, p. 075023, 1 jul. 2013. ISSN 0953-2048, 1361-6668. DOI 10.1088/0953-2048/26/7/075023.
- 84 MIGITA, K.; YAMADA, K.; NAKATANI, Y. Controlling skyrmion motion in an angelfish-type racetrack memory by an AC magnetic field. **Applied Physics Express**, [s. l.], v. 13, n. 7, p. 073003, 1 jul. 2020. ISSN 1882-0778, 1882-0786. DOI 10.35848/1882-0786/ab9efb.
- 85 SOUZA, J. C. B.; VIZARIM, N. P.; REICHHARDT, C. J. O.; REICHHARDT, C.; VENEGAS, P. A. Skyrmion ratchet in funnel geometries. **Physical Review B**, [s. l.], v. 104, n. 5, p. 054434, 25 ago. 2021. DOI 10.1103/PhysRevB.104.054434.
- 86 TOMASELLO, R.; MARTINEZ, E.; ZIVIERI, R.; TORRES, L.; CARPENTIERI, M.; FINOCCHIO, G. A strategy for the design of skyrmion racetrack memories. **Scientific Reports**, [s. l.], v. 4, n. 1, p. 6784, 29 out. 2014. ISSN 2045-2322. DOI 10.1038/srep06784.

- 87 FENG, Y.; ZHANG, X.; ZHAO, G.; XIANG, G. A Skyrmion Diode Based on Skyrmion Hall Effect. **IEEE Transactions on Electron Devices**, [s. l.], v. 69, n. 3, p. 1293–1297, mar. 2022. ISSN 1557-9646. DOI 10.1109/TED.2021.3138837.
- 88 JUNG, D.-H. et al. Magnetic skyrmion diode: Unidirectional skyrmion motion via symmetry breaking of potential energy barriers. **Physical Review B**, [s. l.], v. 104, n. 6, p. L060408, 23 ago. 2021. ISSN 2469-9950, 2469-9969. DOI 10.1103/PhysRevB.104.L060408.
- 89 NAGAOSA, N.; TOKURA, Y. Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions. **Nature Nanotechnology**, [s. l.], v. 8, n. 12, p. 899–911, dez. 2013. ISSN 1748-3395. DOI 10.1038/nnano.2013.243.
- 90 ROWLAND, J.; BANERJEE, S.; RANDERIA, M. Skyrmions in chiral magnets with Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling. **Physical Review B**, [s. l.], v. 93, n. 2, p. 020404, 19 jan. 2016. ISSN 2469-9950, 2469-9969. DOI 10.1103/PhysRevB.93.020404.
- 91 KIM, K.-W.; MOON, K.-W.; KERBER, N.; NOTHELFER, J.; EVERSCHOR-SITTE, K. Asymmetric skyrmion Hall effect in systems with a hybrid Dzyaloshinskii-Moriya interaction. **Physical Review B**, [s. l.], v. 97, n. 22, p. 224427, 25 jun. 2018. ISSN 2469-9950, 2469-9969. DOI 10.1103/PhysRevB.97.224427.
- 92 PAVARINI, E.; KOCH, E.; ANDERS, F.; JARRELL, M.; INSTITUTE FOR ADVANCED SIMULATION; GERMAN RESEARCH SCHOOL FOR SIMULATION SCIENCES. **Correlated electrons: from models to materials: lecture notes of the Autumn School Correlated Electrons 2012: at Forschungszentrum Jülich, 3-7 September 2012**. Jülich: Forschungszentrum Jülich, Zentralbibliothek, Verl, 2012. 450 p. (Schriften des Forschungszentrums Jülich. Reihe Modeling and Simulation, Band 2). ISBN 978-3-89336-796-2.
- 93 RUDERMAN, M. A.; KITTEL, C. Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons. **Physical Review**, [s. l.], v. 96, n. 1, p. 99–102, 1 out. 1954. ISSN 0031-899X. DOI 10.1103/PhysRev.96.99.
- 94 YOSIDA, K. Magnetic Properties of Cu-Mn Alloys. **Physical Review**, [s. l.], v. 106, n. 5, p. 893–898, 1 jun. 1957. ISSN 0031-899X. DOI 10.1103/PhysRev.106.893.
- 95 ANDERSON, P. W. Antiferromagnetism. Theory of Superexchange Interaction. **Physical Review**, [s. l.], v. 79, n. 2, p. 350–356, 15 jul. 1950. ISSN 0031-899X. DOI 10.1103/PhysRev.79.350.
- 96 GOODENOUGH, J. B. An interpretation of the magnetic properties of the perovskite-type mixed crystals $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_{3-\lambda}$. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, [s. l.], v. 6, n. 2–3, p. 287–297, ago. 1958. ISSN 00223697. DOI 10.1016/0022-3697(58)90107-0.
- 97 KANAMORI, J. Superexchange interaction and symmetry properties of electron orbitals. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, [s. l.], v. 10, n. 2–3, p. 87–98, jul. 1959. ISSN 00223697. DOI 10.1016/0022-3697(59)90061-7.

- 98 DZYALOSHINSKY, I. A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, [s. l.], v. 4, n. 4, p. 241–255, 1 jan. 1958. ISSN 0022-3697. DOI 10.1016/0022-3697(58)90076-3.
- 99 MORIYA, T. Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism. **Physical Review**, [s. l.], v. 120, n. 1, p. 91–98, 1 out. 1960. DOI 10.1103/PhysRev.120.91.
- 100 EDERER, C.; FENNIE, C. J. Electric-field switchable magnetization via the Dzyaloshinskii–Moriya interaction: FeTiO_3 versus BiFeO_3 . **Journal of Physics: Condensed Matter**, [s. l.], v. 20, n. 43, p. 434219, 29 out. 2008. ISSN 0953-8984, 1361-648X. DOI 10.1088/0953-8984/20/43/434219.
- 101 MOCHIZUKI, M.; SEKI, S. Dynamical magnetoelectric phenomena of multiferroic skyrmions. **Journal of Physics: Condensed Matter**, [s. l.], v. 27, n. 50, p. 503001, 23 dez. 2015. ISSN 0953-8984, 1361-648X. DOI 10.1088/0953-8984/27/50/503001.
- 102 KÉZSMÁRKI, I. et al. Néel-type skyrmion lattice with confined orientation in the polar magnetic semiconductor GaV_4S_8 . **Nature Materials**, [s. l.], v. 14, n. 11, p. 1116–1122, nov. 2015. ISSN 1476-1122, 1476-4660. DOI 10.1038/nmat4402.
- 103 IFSC/USP. Efeito Zeeman. [S. l., s. d.]. Disponível em: <https://www.ifsc.usp.br/~lavfis/images/BDApostilas/ApEfZeeman/Zee-man-1.pdf>. Acesso em: 8 set. 2023.
- 104 GILBERT, T. L. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. **IEEE Transactions on Magnetics**, [s. l.], v. 40, n. 6, p. 3443–3449, nov. 2004. ISSN 0018-9464. DOI 10.1109/TMAG.2004.836740.
- 105 LITZIUS, K. et al. Skyrmion Hall effect revealed by direct time-resolved X-ray microscopy. **Nature Physics**, [s. l.], v. 13, n. 2, p. 170–175, fev. 2017. ISSN 1745-2481. DOI 10.1038/nphys4000.
- 106 FIDLER, J.; SCHREFFL, T. Micromagnetic modelling - the current state of the art. **Journal of Physics D: Applied Physics**, [s. l.], v. 33, n. 15, p. R135–R156, 7 ago. 2000. ISSN 0022-3727, 1361-6463. DOI 10.1088/0022-3727/33/15/201.
- 107 ANTROPOV, V. P.; KATSNELSON, M. I.; VAN SCHILFGAARDE, M.; HARMON, B. N. Ab Initio Spin Dynamics in Magnets. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 75, n. 4, p. 729–732, 24 jul. 1995. ISSN 0031-9007, 1079-7114. DOI 10.1103/PhysRevLett.75.729.
- 108 NOWAK, Ulrich. Classical Spin Models. In: KRONMÜLLER, Helmut; PARKIN, Stuart. **Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials**. 1. ed. [S. l.]: Wiley, 27 jul. 2007. ISBN 978-0-470-02217-7. DOI 10.1002/9780470022184.hmm205. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/9780470022184.hmm205>. Acesso em: 23 set. 2024.
- 109 SKUBIC, B.; HELLSVIK, J.; NORDSTRÖM, L.; ERIKSSON, O. A method for atomistic spin dynamics simulations: implementation and examples. **Journal of Physics: Condensed Matter**, [s. l.], v. 20, n. 31, p. 315203, 6 ago. 2008. ISSN 0953-8984, 1361-648X. DOI 10.1088/0953-8984/20/31/315203.

- 110 EVANS, R. F. L.; FAN, W. J.; CHUREEMART, P.; OSTLER, T. A.; ELLIS, M. O. A.; CHANTRELL, R. W. Atomistic spin model simulations of magnetic nanomaterials. **Journal of Physics: Condensed Matter**, [s. l.], v. 26, n. 10, p. 103202, 12 mar. 2014. ISSN 0953-8984, 1361-648X. DOI 10.1088/0953-8984/26/10/103202.
- 111 EVANS, Richard F. L. Atomistic Spin Dynamics. In: ANDREONI, Wanda; YIP, Sidney. **Handbook of Materials Modeling**. Cham: Springer International Publishing, 2018. p. 1–23. ISBN 978-3-319-50257-1. DOI 10.1007/978-3-319-50257-1_147-1. Disponível em: http://link.springer.com/10.1007/978-3-319-50257-1_147-1. Acesso em: 8 set. 2024.
- 112 ROCHA, F. S.; SOUZA, J. C. B.; VIZARIM, N. P.; REICHHARDT, C. J. O.; REICHHARDT, C.; VENEGAS, P. A. Skyrmion transport and annihilation in funnel geometries. **Journal of Physics: Condensed Matter**, [s. l.], v. 36, n. 11, p. 115801, dez. 2023. ISSN 0953-8984. DOI 10.1088/1361-648X/ad1218.
- 113 PAUL, S.; HALDAR, S.; VON MALOTTKI, S.; HEINZE, S. Role of higher-order exchange interactions for skyrmion stability. **Nature Communications**, [s. l.], v. 11, n. 1, p. 4756, 21 set. 2020. ISSN 2041-1723. DOI 10.1038/s41467-020-18473-x.
- 114 ZHANG, X.; XIA, J.; LIU, X. Particle-like skyrmions interacting with a funnel obstacle. **Physical Review B**, [s. l.], v. 106, n. 9, p. 094418, 14 set. 2022. ISSN 2469-9950, 2469-9969. DOI 10.1103/PhysRevB.106.094418.
- 115 SOUZA, J. C. B.; VIZARIM, N. P.; REICHHARDT, C. J. O.; REICHHARDT, C.; VENEGAS, P. A. Spontaneous skyrmion conformal lattice and transverse motion during dc and ac compression. **New Journal of Physics**, [s. l.], v. 25, n. 5, p. 053020, maio 2023. ISSN 1367-2630. DOI 10.1088/1367-2630/acd46f.
- 116 KIM, J.-V.; MULKERS, J. On quantifying the topological charge in micromagnetics using a lattice-based approach. **IOP SciNotes**, [s. l.], v. 1, n. 2, p. 025211, ago. 2020. ISSN 2633-1357. DOI 10.1088/2633-1357/abad0c.
- 117 SILVA, R. C.; SILVA, R. L.; MOREIRA, J. C.; MOURA-MELO, W. A.; PEREIRA, A. R. Channeling skyrmions: Suppressing the skyrmion Hall effect in ferrimagnetic nanostripes. **Journal of Applied Physics**, [s. l.], v. 135, n. 18, p. 183902, 14 maio 2024. ISSN 0021-8979, 1089-7550. DOI 10.1063/5.0206403.
- 118 UFMG. Métodos de Euler e Runge-Kutta. [S. l., s. d.]. Disponível em: <https://repositorio.ufmg.br/bitstream/1843/48530/1/Metodos%20de%20Euler%20e%20Runge%20Kutta.pdf>. Acesso em: 8 set. 2024.
- 119 PURNAMA, I.; GAN, W. L.; WONG, D. W.; LEW, W. S. Guided current-induced skyrmion motion in 1D potential well. **Scientific Reports**, [s. l.], v. 5, n. 1, p. 10620, 29 maio 2015. ISSN 2045-2322. DOI 10.1038/srep10620.
- 120 WANG, X. S.; YUAN, H. Y.; WANG, X. R. A theory on skyrmion size. **Communications Physics**, [s. l.], v. 1, n. 1, p. 1–7, 4 jul. 2018. ISSN 2399-3650. DOI 10.1038/s42005-018-0029-0.

- 121 SIEMENS, A.; ZHANG, Y.; HAGEMMEISTER, J.; VEDMEDENKO, E. Y.; WIESENDANGER, R. Minimal radius of magnetic skyrmions: statics and dynamics. **New Journal of Physics**, [s. l.], v. 18, n. 4, p. 045021, abr. 2016. ISSN 1367-2630. DOI 10.1088/1367-2630/18/4/045021.
- 122 JIANG, W. et al. Direct observation of the skyrmion Hall effect. **Nature Physics**, [s. l.], v. 13, n. 2, p. 162–169, fev. 2017. ISSN 1745-2481. DOI 10.1038/nphys3883.
- 123 LEGRAND, W. et al. Room-temperature stabilization of antiferromagnetic skyrmions in synthetic antiferromagnets. **Nature Materials**, [s. l.], v. 19, n. 1, p. 34–42, jan. 2020. ISSN 1476-4660. DOI 10.1038/s41563-019-0468-3.
- 124 REICHHARDT, C.; REICHHARDT, C. J. O. Thermal creep and the skyrmion Hall angle in driven skyrmion crystals. **Journal of Physics: Condensed Matter**, [s. l.], v. 31, n. 7, p. 07LT01, dez. 2018. ISSN 0953-8984. DOI 10.1088/1361-648X/aaefd7.
- 125 CHARALAMPIDIS, I.; BARKER, J. **Metadynamics calculations of the effect of thermal spin fluctuations on skyrmion stability**. [S. l.]: arXiv, 4 out. 2023. arXiv: 2310.03169 [cond-mat]. n. arXiv:2310.03169. DOI 10.48550/arXiv.2310.03169. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/2310.03169>. Acesso em: 21 nov. 2023.
- 126 KIM, J.-V.; YOO, M.-W. Current-driven skyrmion dynamics in disordered films. **Applied Physics Letters**, [s. l.], v. 110, n. 13, p. 132404, 27 mar. 2017. ISSN 0003-6951. DOI 10.1063/1.4979316.
- 127 SILVA, R. L.; SILVA, R. C.; PEREIRA, A. R. Affecting the structure of skyrmions using ferromagnetic nanodisks with inhomogeneous properties: switching skyrmion helicity and polarity. **Journal of Physics D: Applied Physics**, [s. l.], v. 56, n. 1, p. 015001, nov. 2022. ISSN 0022-3727. DOI 10.1088/1361-6463/ac9b6d.
- 128 ANGELOTTI, W. F. D.; FONSECA, A. L. D.; TORRES, G. B.; CUSTODIO, R. Uma abordagem simplificada do método Monte Carlo Quântico: da solução de integrais ao problema da distribuição eletrônica. **Química Nova**, [s. l.], v. 31, n. 2, p. 433–444, 2008. ISSN 0100-4042. DOI 10.1590/S0100-40422008000200044.
- 129 METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, A. H.; TELLER, E. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. **The Journal of Chemical Physics**, [s. l.], v. 21, n. 6, p. 1087–1092, 1 jun. 1953. ISSN 0021-9606. DOI 10.1063/1.1699114.
- 130 WIKIPÉDIA. Fluxograma – Algoritmo de Metropolis. [S. l.], 2007. Disponível em: https://pt.wikipedia.org/wiki/M%C3%A9todo_de_Monte_Carlo#/media/Ficheiro:FMFluxogramaMetropolis.jpg.
- 131 TSALLIS, C.; STARIOLO, D. A. Generalized simulated annealing. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, [s. l.], v. 233, n. 1, p. 395–406, 15 nov. 1996. ISSN 0378-4371. DOI 10.1016/S0378-4371(96)00271-3.
- 132 CEPERLEY, D.; ALDER, B. Quantum Monte Carlo. **Science**, [s. l.], v. 231, n. 4738, p. 555–560, 7 fev. 1986. ISSN 0036-8075, 1095-9203. DOI 10.1126/science.231.4738.555.

133 SZU, H.; HARTLEY, R. Fast simulated annealing. **Physics Letters A**, [s. l.], v. 122, n. 3, p. 157–162, 8 jun. 1987. ISSN 0375-9601. DOI 10.1016/0375-9601(87)90796-1.

134 TSALLIS, C. Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics. **Journal of Statistical Physics**, [s. l.], v. 52, n. 1–2, p. 479–487, jul. 1988. ISSN 0022-4715, 1572-9613. DOI 10.1007/BF01016429.

APÊNDICE A – COMPLEMENTO AO CAPÍTULO 5

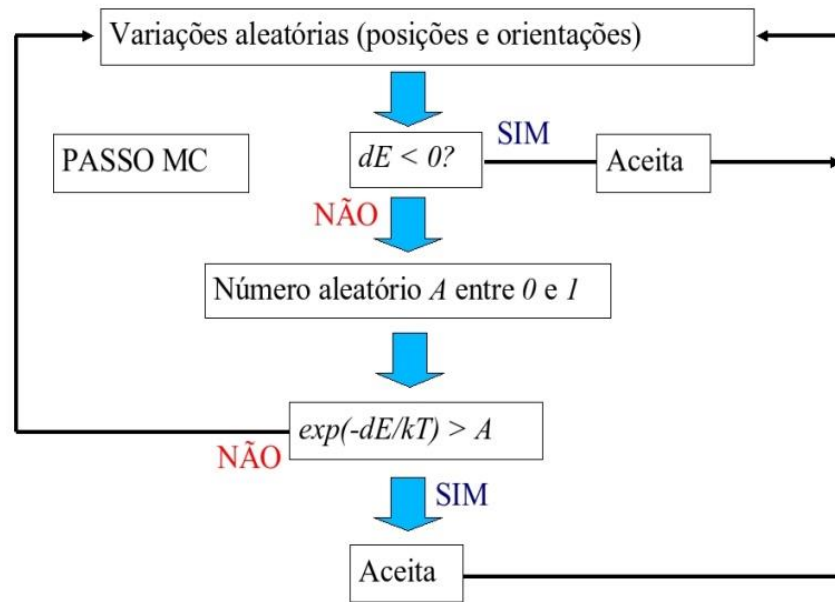
A1 Monte Carlo

Atualmente a expressão "método de Monte Carlo" é associada ao uso de métodos estatísticos que empregam grandes amostragens aleatórias para obter resultados numéricos. Ao estimar a probabilidade de ocorrência de um evento, pode-se simular um número independente de amostras e computar a proporção de vezes em que ele ocorre, por isso, este método tem sido utilizado há muito tempo como forma de obter aproximações numéricas de funções onde o cálculo analítico é muito difícil de ser alcançado ou mesmo impossível. Seu nome é uma homenagem ao caráter aleatório proveniente dos jogos de roleta de Monte Carlo no principado de Mônaco. Existem também, registros de sua utilização na segunda metade do séc. XIX, quando foram realizadas experiências empregando informações casuísticas ¹²⁸. Porém, seu estabelecimento se deu principalmente em 1944 quando foi utilizado como ferramenta de pesquisa para o desenvolvimento da bomba atômica. Desde então o método vem sendo utilizado em diversas áreas do conhecimento devido à simplicidade de seus algoritmos e a sua eficiência.

O algoritmo de Metropolis ¹²⁹ é um dos métodos de Monte Carlo mais conhecidos em Física, e tem como objetivo determinar valores esperados de sistemas simulados, através do cálculo de uma média sobre a amostra.

A elaboração do algoritmo visa a obtenção de uma amostra que siga a distribuição de Boltzman. Um dos trunfos de se utilizar o algoritmo de Metropolis está ligada ao fato de não ser necessário levar em conta a probabilidade da configuração propriamente dita, e sim a razão entre duas dadas configurações que podem ser determinadas independente das outras. Em contrapartida do princípio de que para se determinar a probabilidade de uma dada configuração seria necessário conhecer a chance de ocorrência de todas as outras configurações, o que no caso de variáveis contínuas implica no fato de que seria necessária uma integração da densidade de probabilidade sobre todo o espaço de configurações, o que na prática torna-se um processo custoso quando são utilizadas variáveis da ordem de centenas. O processo pode ser entendido a partir do fluxograma da Figura A.1:

Figura A1 - Fluxograma do algoritmo de Metropolis



Fonte: Página da web Wikipédia – Método de Monte Carlo ¹³⁰.

Dadas duas configurações m e n quaisquer, a razão entre suas probabilidades P_m e P_n pode ser dada pela eq. (A1):

$$\frac{P_m}{P_n} = \frac{\exp(-\frac{U_m}{k_b T})}{\exp(-\frac{U_n}{k_b T})} = \exp(-\frac{U_m - U_n}{k_b T}) \quad (\text{A.1})$$

1 - É gerada uma configuração inicial aleatória (respeitando-se os graus de liberdade e as restrições do sistema). A esta configuração é atribuído o índice m , onde k_b é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. Esta configuração é então aceita como uma amostra válida do sistema.

2 - É gerada uma nova configuração através de pequenas alterações na configuração inicial, designada pelo índice n .

3 - Se a energia da nova configuração for menor que a anterior, é atribuída a ela, o índice m , caso contrário os passos adicionais abaixo são realizados:

3.1 - Gera-se um número aleatório entre 0 e 1 e se este número for menor que P_n/P_m aceita-se n como a nova configuração m , do contrário m é mantida como a nova configuração.

4 - Os passos 2 e 3 são repetidos até que um critério de parada seja satisfeito. Cada uma destas repetições é chamada de passo Monte Carlo (MC).

A2 Simulated Annealing

O *Simulated Annealing* (SA) ou recozimento simulado em português, é um algoritmo baseado no algoritmo de simulação proposto por Metropolis ¹²⁹ que incorpora ideias de física estatística e está relacionado ao problema da busca por um mínimo global de uma função. Seu funcionamento é baseado na analogia entre este problema e a técnica utilizada na metalurgia para alterar as propriedades físicas de um metal através de um resfriamento gradual, chamado de recozimento ou recristalização. O SA é uma técnica utilizada em sistemas que possuem múltiplos extremos, pois técnicas mais simples, baseadas no gradiente da função poderiam nos levar a mínimos locais ¹³¹. A primeira versão do algoritmo foi proposta por Kirkpatrick ⁴⁴ para sistemas clássicos e estendida para sistemas quânticos por Ceperley e Alder ¹³². Esta versão é conhecida como *Classical Simulated Annealing* (CSA ou *Boltzmann machine*) e baseia-se na distribuição de Boltzmann-Gibbs. Por outro lado, variantes desta técnica têm sido utilizadas. Szu ¹³³ utiliza a distribuição de Cauchy-Lorentz e propôs o que viria a ser conhecido como *Fast Simulated Annealing* (FSA ou *Cauchy machine*), devido a maior velocidade de resfriamento do algoritmo, o que tornou o processo mais eficiente como um todo. Em 1996, Constantino Tsallis e Daniel Stariolo ¹³¹ elaboraram uma versão do algoritmo que generaliza as duas versões

anteriores, o *Generalized Simulated Annealing* (GSA) que por sua vez baseia-se na estatística de Tsallis ¹³⁴. A manipulação adequada de parâmetros pode transformar o GSA em CSA ou FSA ¹³¹.

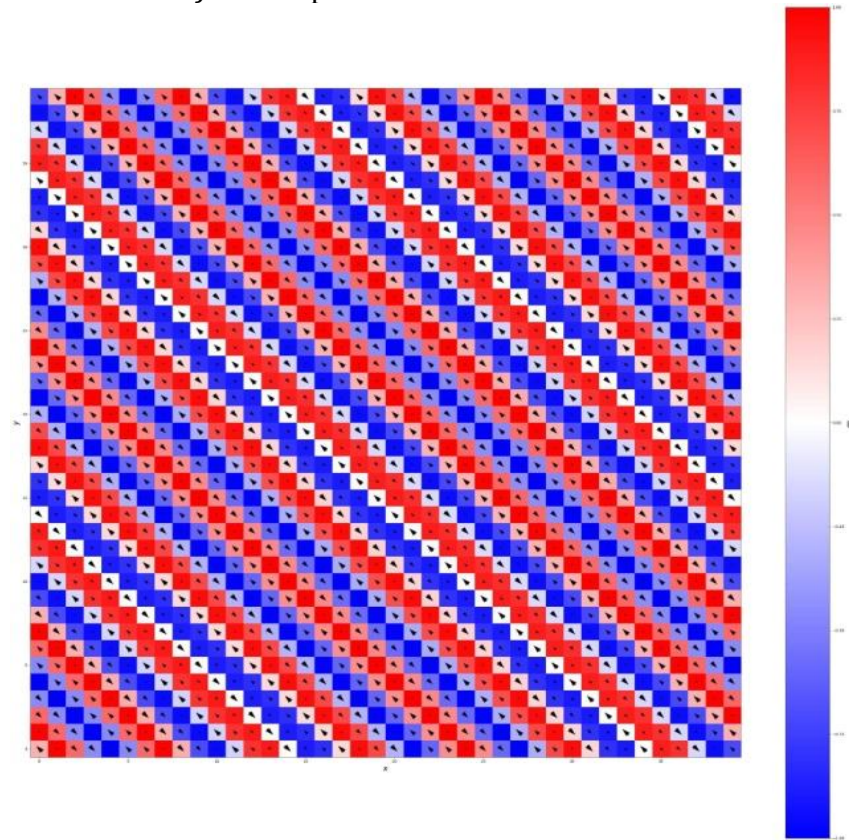
Em linhas gerais, a técnica *Simulated Annealing* utiliza uma função de “visita” para determinar o domínio da função procurada. Além disso existe uma função que serve como critério de aceite para saber se a configuração energética do novo passo deve ser aceita ou rejeitada. Os passos utilizados são os que foram descritos na seção A1. Cada uma das técnicas (FSA, CSA e GSA) descritas possui uma função específica de visita e de cálculo da temperatura.

A3 Minimizações

Nesta seção estão reunidas figuras que representam o estado de mínima energia encontrado para uma rede de spins 40×40 (em x e em y) através da minimização do Hamiltoniano (3.24) utilizando a técnica GSA. As redes minimizadas nesta seção não foram utilizadas nos cálculos envolvendo a dinâmica de magnetização, uma vez que o estudo da magnetização partiu da relaxação de redes aleatórias de spins através da equação LLG sem corrente (conforme descrito na seção 6). Portanto, as simulações aqui apresentadas serviram como uma etapa didática dos estudos envolvendo o Hamiltoniano (3.24), que teve a finalidade de observar fases do sistema já conhecidas na literatura, como a rede hexagonal de skyrmions e a rede helicoidal. Para isso, foram executados 10^6 passos de Monte Carlo para três redes do mesmo tamanho, com spins orientados de forma aleatória como estado inicial. As Figuras A3.1, A3.2 e A3.3 apresentam as figuras encontradas após a minimização de cada sistema e apresentam uma rede que apresenta a fase helicoidal (Figura A3.1), uma rede hexagonal de skyrmions (Figura A3.2) e uma rede que apresenta skyrmions estáveis e skyrmions que sofreram deformações devido a interação com *pinnings* (Figura A3.3). Todos os sistemas foram simulados com $J = 1.0 \text{ meV}$ e o tamanho do passo utilizado na integração foi de $h = 0.01$.

A3.1 Rede sem pinnings e sem aplicação de campo magnético

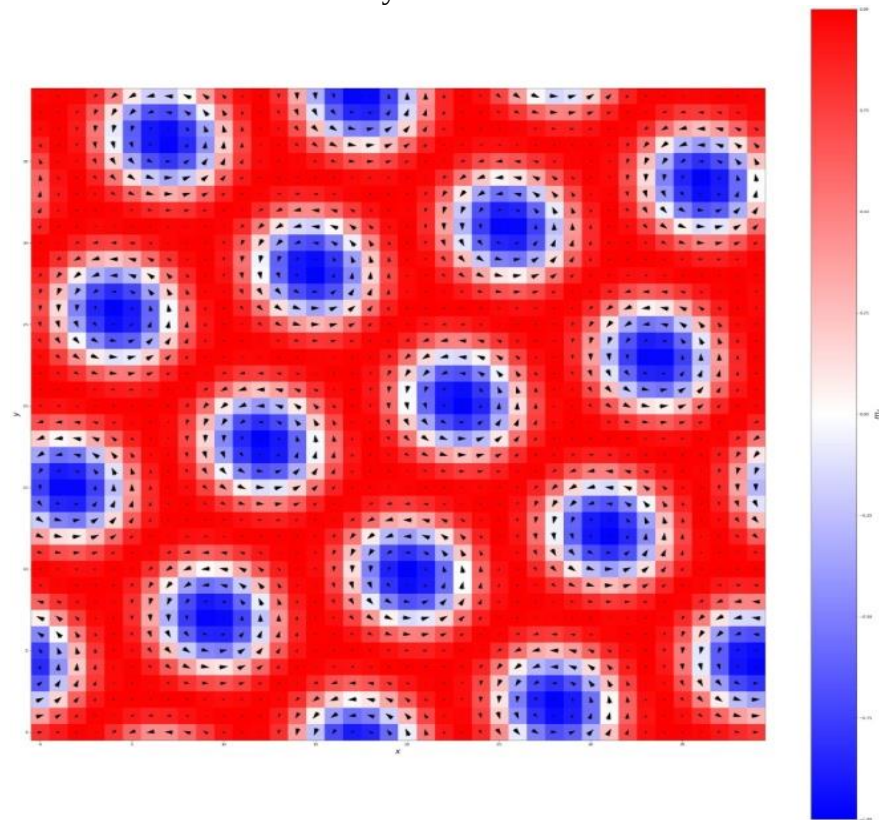
Figura A3.1 - Figura encontrada após a minimização de um sistema com constante Dzyaloshinskii-Moriya $D = 2.45 J$, constante de anisotropia $A = 0 J$ e campo magnético externo $B = 0 J$ onde é possível observar o estado helicoidal



Fonte: Autoria Própria.

A3.2 Rede sem pinnings e com aplicação de campo magnético

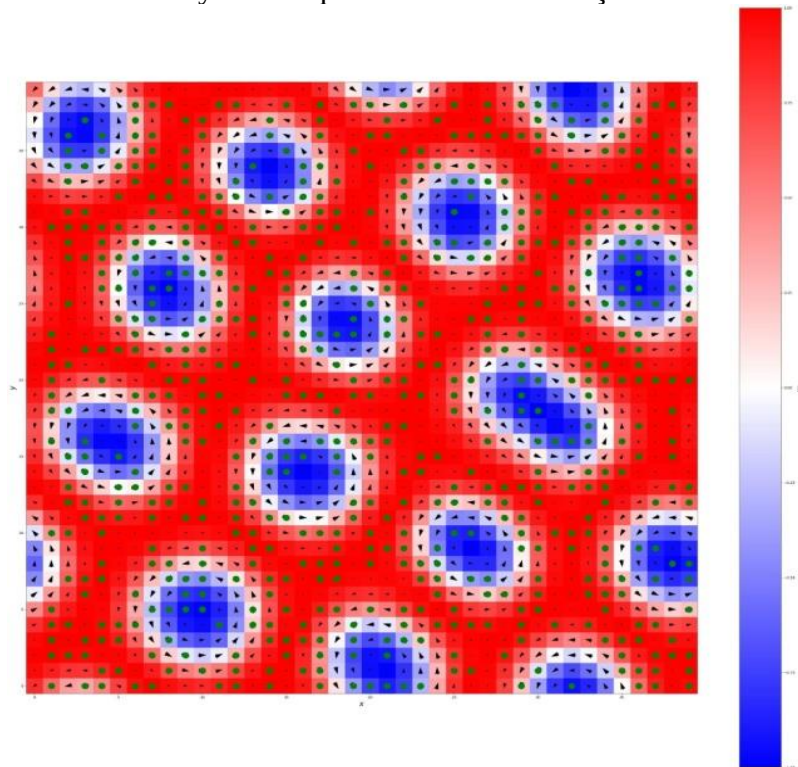
Figura A3.2 - Figura encontrada após a minimização de um sistema com constante Dzyaloshinskii-Moriya $D = 0.7 J$, constante de anisotropia $A = 0$ e campo magnético externo aplicado no eixo z com $B_z = 0.4 D^2/J$ onde é possível observar uma rede hexagonal de skyrmions



Fonte: Autoria Própria.

A3.3 Rede com pinnings e aplicação de campo magnético externo

Figura A3.4 - Figura encontrada após a minimização de um sistema com constante Dzyaloshinskii-Moriya $D = 0.7 J$, constante de anisotropia $A = 0.2 J$ e campo magnético externo aplicado ao eixo z com $B_z = 0.4 D^2/J$ onde é possível observar a formação de skyrmions que sofreram deformação.



Fonte: Autoria Própria.