

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA COMPUTACIONAL

Daniel Santiago da Silva

SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO SOBRE A
FORMAÇÃO DE TEXTURAS DE SPIN EM
HAMILTONIANAS DE HEISENBERG

Volta Redonda – RJ

2022

Daniel Santiago da Silva

SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO SOBRE A FORMAÇÃO DE TEXTURAS DE
SPIN EM HAMILTONIANAS DE HEISENBERG

Monografia de Conclusão de Curso apresentada
ao Departamento de Física do Instituto de Ciê-
ncias Exatas, da Universidade Federal Fluminense,
como parte dos requisitos necessários à obtenção
do título de Bacharel em Física Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Adriano de Souza Martins

Volta Redonda – RJ

2022

Ficha catalográfica automática - SDC/BAVR
Gerada com informações fornecidas pelo autor

S586s Silva, Daniel Santiago da
SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO SOBRE A FORMAÇÃO DE TEXTURAS DE
SPIN EM HAMILTONIANAS DE HEISENBERG / Daniel Santiago da Silva
; Adriano de Souza Martins, orientador. Volta Redonda, 2022.
88 f.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Física)-
Universidade Federal Fluminense, Instituto de Ciências
Exatas, Volta Redonda, 2022.

1. Física da Matéria Condensada. 2. Magnetismo. 3. Modelo
de Heisenberg. 4. Monte Carlo. 5. Produção intelectual. I.
Martins, Adriano de Souza, orientador. II. Universidade
Federal Fluminense. Instituto de Ciências Exatas. III.
Título.

CDD -

Daniel Santiago da Silva

SIMULAÇÕES DE MONTE CARLO SOBRE A FORMAÇÃO DE TEXTURAS DE
SPIN EM HAMILTONIANAS DE HEISENBERG

Monografia de Conclusão de Curso apresentada
ao Departamento de Física do Instituto de Ciê-
ncias Exatas, da Universidade Federal Fluminense,
como parte dos requisitos necessários à obtenção
do título de Bacharel em Física Computacional.

Aprovada em 11 de julho de 2022.

BANCA EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente
gov.br ADRIANO DE SOUZA MARTINS
Data: 12/07/2022 08:42:47-0300
Verifique em <https://verificador.iti.br>

Prof. Dr. Adriano de Souza Martins - Orientador
Universidade Federal Fluminense - UFF



Prof. Dr. Licinio Lima Silva Portugal
Universidade Federal Fluminense - UFF



Assinado digitalmente por
THADEU JOSINO PEREIRA PENNA
2022.07.12 11:15:25 BRT

Prof. Dr. Thadeu Josino Pereira Penna
Universidade Federal Fluminense - UFF

Volta Redonda – RJ

2022

Resumo

Texturas de *spin* são padrões que os próprios formam em um determinado material, ou seja, é a distribuição espacial de suas orientações nos sítios (posições bem definidas) que formam um cristal. O exemplo mais conhecido é a formação de domínios magnéticos em materiais ferromagnéticos, isto é, pequenas regiões onde os *spins* em média estão orientados ao longo da mesma direção. A orientação dos *spins* e, consequentemente, a formação dos domínios e texturas dependem de três fatores: da temperatura, do campo magnético externo aplicado e da interação com os demais *spins* do sistema, sendo a mais conhecida a interação de troca. A interação de troca pode favorecer tanto o alinhamento paralelo (ferromagnetismo) como o antiparalelo (antiferromagnetismo). Nas últimas décadas, outros padrões de orientação dos *spins* têm sido medidos experimentalmente, em particular os padrões quirais e a formação de skyrmions, estes definidos como excitações locais em um domínio magnético com características topológicas únicas. A origem destes padrões é a interação de Dzyaloshinskii-Moriya, ou troca antissimétrica, cuja origem vem da falta de simetria de inversão em um material. Neste trabalho foi realizado um estudo computacional sobre a formação de padrões de *spin* em sistemas com interação de troca, anisotropia magnetocristalina, Dzyaloshinskii-Moriya e Zeeman, onde foi quantificado suas mudanças em função da temperatura externa, do campo aplicado e do alcance das interações, isso foi feito utilizando-se do modelo de Heisenberg e do método de Monte Carlo.

Palavras-chave: Modelo de Heisenberg, Monte Carlo, Dzyaloshinskii-Moriya, Anisotropia Magnetocristalina, Skyrmions, Efeito Zeeman, Ferromagnetismo.

Abstract

Spin textures are patterns that they form in a given material, that is, it is the spatial distribution of their orientations at the sites (well-defined positions) that form a crystal. The best known example is the formation of magnetic domains in ferromagnetic materials, that is, small regions where the spins on average are oriented along the same direction. The orientation of the spins and, consequently, the formation of domains and textures depend on three factors: the temperature, the applied external magnetic field and the interaction with the other spins of the system, the best known being the exchange interaction. The exchange interaction can favor both parallel (ferromagnetism) and antiparallel (antiferromagnetism) alignment. In the last decades, other spin orientation patterns have been experimentally measured, in particular chiral patterns and the formation of skyrmions, which are defined as local excitations in a magnetic domain with unique topological characteristics. The origin of these patterns is the Dzyaloshinskii-Moriya interaction, or antisymmetric exchange, whose origin comes from the lack of inversion symmetry in a material. In this work, a computational study was carried out on the formation of spin patterns in systems with exchange interaction, magnetocrystalline anisotropy, Dzyaloshinskii-Moriya and Zeeman, where their changes were quantified as a function of the external temperature, the applied field and the range of interactions, this was done using the Heisenberg model and the Monte Carlo method.

Keywords: Heisenberg Model, Monte Carlo, Dzyaloshinskii-Moriya, Magnetocrystalline Anisotropy, Skyrmions, Zeeman Effect, Ferromagnetism.

Dedicado aos meus pais, João e Marisa.

Agradecimentos

Aos meus pais, João e Marisa, que com muito sacrifício e luta, me deram todo o apoio e suporte necessário para alcançar esse objetivo.

À minha namorada, Alessandra, pela ajuda, carinho e suporte que me dedicou em todos os momentos.

Aos professores do ICEx, em particular do Departamento de Física, e, principalmente, ao Prof. Adriano, pela orientação, ajuda e ensinamentos.

Aos meus amigos de curso, pelas opiniões, esclarecimentos, estudos e momentos que vivemos.

Aos meus demais amigos, que sempre me apoiaram e confiaram em mim.

”Ninguém nunca descobre do que se trata a vida, e isso não importa. Explore o mundo. Quase tudo é realmente interessante se você aprofundar o suficiente.”

Richard P. Feynman

Listas de Figuras

2.1 Representação do comportamento diamagnético	5
2.2 Representação do comportamento paramagnético	5
2.3 Representação do comportamento ferromagnético	6
2.4 Representação do gráfico da magnetização de um material ferromagnético	7
2.5 Representação de um skyrmion magnético	8
4.1 Representação das redes cristalinas em 2 dimensões	16
4.2 Representação das redes cristalinas em 3 dimensões	17
4.3 Representação da forma cristalina do NaCl	18
4.4 Representação da célula unitária do NaCl	19
4.5 Interações entre vizinhos na rede quadrada	20
4.6 Interações entre vizinhos na rede cúbica simples	21
5.1 Representação do comportamento dos <i>spins</i> devido a interação de troca $(J > 0)$	23
5.2 Representação do comportamento dos <i>spins</i> devido a anisotropia magneto水晶 (A > 0)	24
5.3 Representação do comportamento dos <i>spins</i> devido ao efeito Zeeman	25
5.4 Representação da DMI no caso de íons vizinhos e um íon ligante (um caso de <i>superexchange</i>)	26
7.1 Fluxograma do funcionamento do algoritmo utilizado na simulação	30
7.2 Representação da condição periódica de contorno aplicada no algoritmo	32
7.3 Energia média por <i>spin</i> pelo número de passos de Monte Carlo	33
7.4 Módulo do vetor magnetização média pelo número de passos de Monte Carlo	33

8.1 Energia média por <i>spin</i> (em unidades de J) pela temperatura (em K) com tamanhos de rede diferentes	36
8.2 Calor específico (em eV/K) pela temperatura (em K) com tamanhos de rede diferentes	37
8.3 Análise da derivada da energia	38
8.4 Módulo do vetor magnetização média pela temperatura (em K) com tamanhos de rede diferentes	39
8.5 Susceptibilidade magnética pela temperatura (em K) com tamanhos de rede diferentes	40
8.6 Quarto cumulante de Binder vs $k_B T/J$ para diferentes tamanhos de rede	41
8.7 Configurações de <i>spin</i> para as temperaturas de 10K, 190K, 340K e 500K	42
8.8 Energia média por <i>spin</i> (em unidades de J_1) pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 > 0$)	43
8.9 Calor específico (em eV/K) pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 > 0$)	44
8.10 Módulo do vetor magnetização média pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 > 0$)	45
8.11 Susceptibilidade magnética pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 > 0$)	46
8.12 Quarto cumulante de Binder vs $k_B T/J_1$ para diferentes tamanhos de rede ($J_2 = J_1/2$)	47
8.13 Quarto cumulante de Binder vs $k_B T/J_1$ para diferentes tamanhos de rede ($J_2 = J_1/4$)	47
8.14 Temperatura crítica (em K) por α	48
8.15 Configurações de <i>spin</i> com segundos vizinhos ($J_2 > 0$) para as temperaturas de 10K, 340K, 500K e 900K	49
8.16 Energia média por <i>spin</i> (em unidades de J_1) pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 < 0$)	50
8.17 Calor específico (em eV/K) pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 < 0$)	51
8.18 Módulo do vetor magnetização média pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 < 0$)	52

8.19 Susceptibilidade magnética pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 < 0$)	53
8.20 Configurações de <i>spin</i> com segundos vizinhos ($J_2 < 0$) para as temperaturas de 10K, 190K, 340K e 500K	54
8.21 Configurações de <i>spin</i> com segundos vizinhos ($J_2 < 0$) para as temperaturas de 10K, 190K, 340K e 500K	55
8.22 Energia média por <i>spin</i> (em unidades de J) pela temperatura (em K) com termo da anisotropia magnetocristalina	56
8.23 Calor específico (em eV/K) pela temperatura (em K) com termo da anisotropia magnetocristalina	57
8.24 Módulo do vetor magnetização média pela temperatura (em K) com termo da anisotropia magnetocristalina	58
8.25 Susceptibilidade magnética pela temperatura (em K) com termo da anisotropia magnetocristalina	59
8.26 Configurações de <i>spin</i> com termo de anisotropia para as temperaturas de 10K, 190K, 340K e 500K	60
8.27 Energia média por <i>spin</i> (em unidades de J) pela temperatura (em K) com termo do efeito Zeeman	61
8.28 Calor específico (em eV/K) pela temperatura (em K) com termo do efeito Zeeman	62
8.29 Módulo do vetor magnetização média pela temperatura (em K) com termo do efeito Zeeman	63
8.30 Susceptibilidade magnética pela temperatura (em K) com termo do efeito Zeeman	64
8.31 Configurações de <i>spin</i> com termo do efeito Zeeman para as temperaturas de 10K, 190K, 340K e 500K	65
8.32 Configurações de <i>spin</i> com termo da DMI e efeito Zeeman em uma rede quadrada para as temperaturas de 10K, 60K, 190K e 340K	67
8.33 Configurações de <i>spin</i> em uma rede quadrada para as temperaturas de 10K, 60K, 190K e 340K	68

Listas de Tabelas

4.1 Parâmetros de rede das redes cristalinas em 2 dimensões	16
4.2 Parâmetros de rede dos sistemas cristalinos em 3 dimensões	17

Sumário

Resumo	iv
Abstract	v
Agradecimentos	vii
Lista de Figuras	xii
Lista de Tabelas	xiii
1 Introdução	1
2 Conceitos de Magnetismo	3
2.1 Comportamentos Magnéticos	3
2.1.1 Diamagnetismo	4
2.1.2 Paramagnetismo	5
2.1.3 Ferromagnetismo	6
2.2 Skyrmins Magnéticos	7
3 Conceitos de Termofísica	9
3.1 Formulações Fundamentais	9
3.2 Obtenção dos valores esperados	10
3.3 Obtenção das observáveis	11
3.4 Temperatura Crítica	13
4 Conceitos de Física dos Sólidos	15
4.1 Rede Cristalina	15
4.2 Estrutura Cristalina	18

4.3 Célula Unitária	19
4.4 Interações entre vizinhos	19
5 Modelo de Heisenberg	22
5.0.1 Interação de troca	22
5.0.2 Anisotropia magnetocrystalina	23
5.0.3 Efeito Zeeman	24
5.0.4 Interação Dzyaloshinskii-Moriya	25
5.1 O modelo	26
6 Monte Carlo	28
6.1 O método	28
6.2 Algoritmo de Metropolis	29
7 Simulação	30
8 Resultados e Discussões	35
8.1 Comportamento do sistema para diferentes tamanhos de rede	35
8.2 Efeito dos segundos vizinhos	42
8.2.1 $J_2 > 0$	43
8.2.2 $J_2 < 0$	49
8.3 Efeito da anisotropia magnetocrystalina	55
8.4 Efeito do campo externo	60
8.5 Efeito da interação de Dzyaloshinskii-Moriya	65
9 Conclusão	69
Referências Bibliográficas	69

Capítulo 1

Introdução

Desde a primeira observação do comportamento magnético, sistemas que possuem esse tipo de interação sempre despertaram interesse no meio científico [1, 2, 3] e, nas últimas décadas, esse interesse vem crescendo ano a ano. O aumento no interesse nesses sistemas se deve à possibilidade de aplicações práticas [4, 5, 6, 7] (em dispositivos de armazenamento de dados de alta densidade, spintrônica, etc...) somado a grande sinergia entre experimento e teoria existente nesta área de magnetismo, em particular, na utilização de métodos computacionais para o estudo dos fenômenos magnéticos na escala tanto microscópica quanto nanoscópica [8, 9, 10]. Com relação a estes métodos computacionais, eles variam desde a utilização de métodos de primeiros princípios baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) [11, 12] como a utilização de modelos de campo médio [13] como o de Modelo de Ising e o de Heisenberg, por exemplo. Isto é, aliado a sinergia entre experimento e teoria com a expansão do leque de possibilidades de aplicações práticas [14, 15, 16] como a criação de novos dispositivos que podem revolucionar a tecnologia atual, essa área se torna cada vez mais atraente para novas pesquisas.

No estudo teórico destes materiais, a escolha do modelo a ser utilizado dependerá do tipo de material envolvido e do ambiente físico ao qual o mesmo está inserido. Especificado ambos, a obtenção das configurações de equilíbrio dos momentos magnéticos do sistema podem ser obtidas a partir de métodos como o de Monte Carlo. Em relação ao modelo utilizado, o Modelo de Heisenberg é uma ferramenta interessante e recebe mais atenção já que pode ser utilizado para descrever as propriedades de diversos materiais magnéticos, anisotrópicos e isolantes. A hamiltoniana descrita por esse modelo pode variar de acordo com os termos levados em consideração: além do termo de troca, será considerado também

o termo de anisotropia magnetocrystalina, o termo da interação de Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) e o termo do efeito Zeeman.

Tratando-se dos termos, a anisotropia magnetocrystalina surge devido a forma e estrutura do cristal em questão e, como consequência, resulta numa direção preferencial de alinhamento dos *spins* atômicos¹. No caso da DMI, a causa é a falta de simetria de inversão no composto, sendo responsável por uma parte do comportamento ferromagnético fraco em um material, pela formação de skyrmions magnéticos, padrões quirais de textura dos *spins*, etc... Já o efeito Zeeman surge como consequência da interação entre os momentos magnéticos dos *spins* com um campo magnético externo aplicado no material, e isso fará com que os *spins* se alinhem com o sentido do campo externo aplicado. Por fim, a interação de troca, em um ferromagneto, faz com que os momentos magnéticos de átomos vizinhos se alinhem paralelos uns aos outros, formando assim domínios (regiões microscópicas magnetizadas).

Dito isso, esse trabalho está dividido em 9 capítulos. Nos capítulos 2, 3 e 4 são discutidos e apresentados alguns conceitos necessários de Magnetismo, Termodinâmica, Estatística e Física dos Sólidos. Nos capítulos 5, 6 e 7 são discutidos e explicados assuntos referentes a realização da simulação. No capítulo 8, os resultados são apresentados e a discussão acerca deles é realizada. E, por fim, no capítulo 9 a conclusão é efetuada.

¹Que, como simplificação, será referido apenas como *spin* no restante do trabalho.

Capítulo 2

Conceitos de Magnetismo

2.1 Comportamentos Magnéticos

As propriedades magnéticas [1] dos materiais já eram conhecidas desde a antiguidade clássica e foram estudadas de maneira mais profunda a partir do século XX. Todas substâncias apresentam características magnéticas em todas temperaturas, mostrando que o magnetismo é uma propriedade básica de qualquer material e, por esse motivo, entender essa característica se torna extremamente importante. Esse comportamento magnético tem origem quântica, vindo exclusivamente de duas fontes: do momento angular orbital atômico e momento angular do *spin* dos elétrons que compõem a matéria.

Quando exposto a um campo magnético externo \vec{H} , o material irá reagir de uma certa forma e isso determinará seu comportamento magnético, que pode ser dividido em sete tipos diferentes: ferromagnetismo, ferrimagnetismo [17], antiferromagnetismo [17], paramagnetismo, diamagnetismo, vidro de *spin* [18] e gelo de *spin* [19].

A magnetização de um material [20] é definida pelo vetor magnetização \vec{M} , dado por

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{\mu}_i \quad (2.1)$$

onde V é o volume e $\vec{\mu}$ é o momento de dipolo magnético.

Pode-se relacionar o vetor magnetização com o campo magnético \vec{B} através de

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) \quad (2.2)$$

onde μ_0 é a permeabilidade magnética no vácuo e \vec{H} é definido como um campo auxiliar (depende da corrente e é o que mede-se em laboratório).

Então, quando um material é submetido a um campo auxiliar \vec{H} tem-se uma resposta da magnetização que é conhecida como susceptibilidade magnética, definida de forma geral como

$$\chi_{ij}^d = \frac{\partial \vec{M}_i}{\partial \vec{H}_j} \quad (2.3)$$

Quando o meio é linear e o campo aplicado é pequeno, vale a seguinte relação

$$\vec{M} = \chi \vec{H} \quad (2.4)$$

Dada as equações (2.2) e (2.4), pode-se definir o campo magnético \vec{B} , portanto, como

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (2.5)$$

onde μ é a permeabilidade magnética do material e é definida como $\mu = \mu_0(1 + \chi)$.

2.1.1 Diamagnetismo

Inicialmente é importante ressaltar que todos os materiais apresentam comportamento diamagnético, mas, devido a sua fraca magnetização, esse comportamento só pode ser observado quando não há outro tipo de magnetismo ocorrendo simultaneamente, isto é, ele só pode ser notado quando o material em questão é exclusivamente diamagnético.

Materiais **diamagnéticos** ($\chi < 0$) podem ser definidos como materiais que, ao serem colocados na presença de um campo magnético externo, produzem um momento magnético no sentido oposto à do campo aplicado, causado por uma mudança no movimento orbital dos elétrons. Essa mudança acontece pela força eletromotriz induzida que aumenta em cada átomo e que, por conta disso, varia a velocidade dos elétrons: a velocidade dos que giram em uma direção aumenta, ao passo que elétrons que giram na direção oposta tem sua velocidade diminuída. Resumindo, materiais diamagnéticos possuem uma magnetização oposta ao campo externo aplicado, que é muito fraca e se torna novamente nula assim que o campo externo é extinto. Alguns materiais que apresentam este comportamento são: o cobre, zinco, prata, ouro, etc... A figura 2.1 exemplifica esse comportamento.

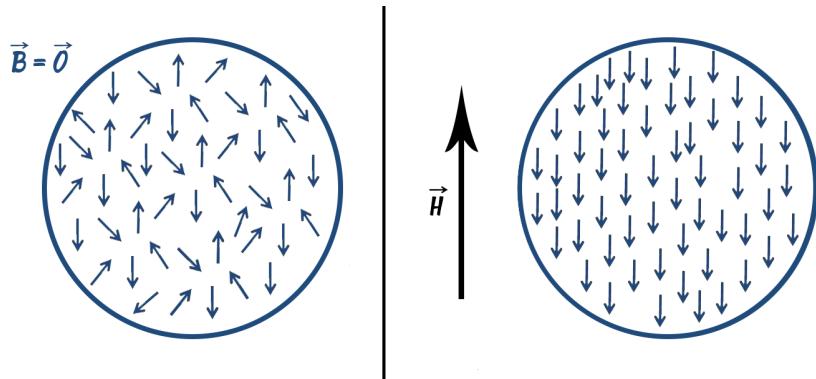


Figura 2.1: Representação do comportamento diamagnético

2.1.2 Paramagnetismo

Em materiais **paramagnéticos** ($\chi > 0$) os momentos de *spins* se orientam aleatoriamente, de forma que o material não apresenta um momento magnético resultante. Entretanto, quando há a presença de um campo magnético externo esses dipolos são rotacionados e se alinham a esse campo. Em suma, materiais paramagnéticos possuem uma magnetização paralela ao campo externo, que é fraca e se torna novamente nula quando o campo externo é extinto. Alguns materiais que apresentam este comportamento são: o óxido de ferro, oxigênio, titânio, alumínio, etc... A figura 2.2 exemplifica esse comportamento.

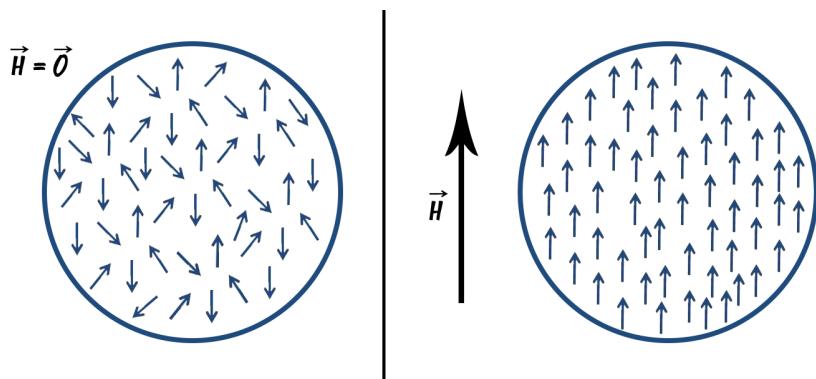


Figura 2.2: Representação do comportamento paramagnético

Tanto materiais paramagnéticos quanto diamagnéticos não são considerados magnéticos, uma vez que exibem magnetização apenas na presença de um campo magnético externo.

2.1.3 Ferromagnetismo

Pode-se inicialmente definir o ferromagnetismo como uma manifestação especial do paramagnetismo. Em materiais **ferromagnéticos** ($\chi \gg 0$), os dipolos magnéticos vizinhos se alinham paralelos uns aos outros, formando domínios magnéticos (regiões microscópicas magnetizadas). Isso acontece mesmo sem um campo externo estar atuando sobre o material, ou seja, um ferromagneto possui magnetização natural não nula. Além disso, esse tipo de material quando exposto a um campo magnético externo é fortemente magnetizado no mesmo sentido do campo aplicado e como possui uma “memória magnética”¹, quando esse campo externo for retirado, o alinhamento dos domínios permanece no mesmo sentido. Alguns materiais que apresentam este comportamento são: o ferro, cobalto, níquel, etc... A figura 2.3 exemplifica esse comportamento.

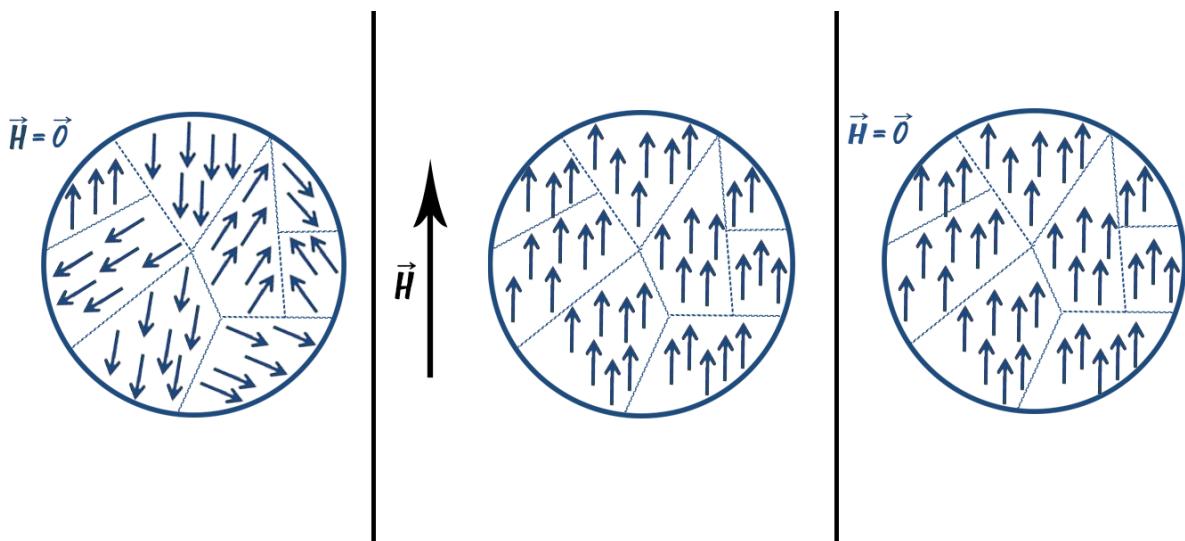


Figura 2.3: Representação do comportamento ferromagnético

Esse alinhamento é mantido indeterminadamente ou até que esse material seja elevado a uma temperatura crítica T_c , denominada Temperatura de Curie, onde essa magnetização se torna nula, e, acima dessa temperatura, o ferromagneto se transforma em um paramagneto, isto é, ocorre uma transição de fase. A figura 2.4 exemplifica essa transição.

¹Capacidade de manter o alinhamento dos *spins* por tempo indeterminado.

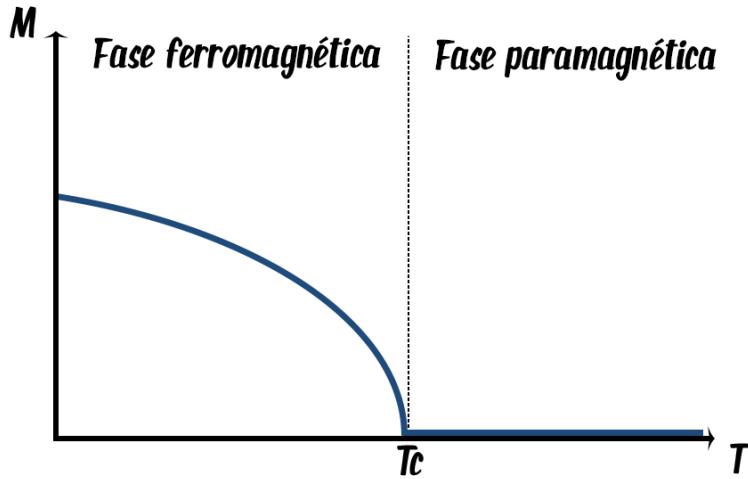


Figura 2.4: Representação do gráfico da magnetização de um material ferromagnético

Essa magnetização natural que os ferromagnetos possuem pode não ser percebida mesmo abaixo da temperatura T_c , esse fato ocorre por esses materiais serem divididos em domínios magnetizados que apontam em direções diferentes e isso faz com que o material tenha praticamente a mesma quantidade de domínios apontando em cada sentido, sendo assim, a magnetização resultante se torna praticamente nula.

2.2 Skyrmins Magnéticos

Devido ao interesse na obtenção da formação de skyrmions magnéticos deste trabalho, é necessário entender, ainda que brevemente, o que são os skyrmions.

Pode-se definir um skyrmion como um soliton (onda solitária com estabilidade invariável, mesmo após uma colisão com outro soliton), mas, mais especificamente como um soliton topológico, isto significa que sua estabilidade surge pela sua topologia [21]. Apesar de inicialmente ter sido criado para descrever bárions [22], eles já foram encontrados como solução de efeitos quânticos e previstos como excitações em sistemas magnéticos (um caso especial dos skyrmions).

Os skyrmions magnéticos são excitações locais em um sistema magnético e são classificados como quasipartículas. Quasipartículas podem ser descritas brevemente como configurações que possuem características bem definidas e conservadas, como por exemplo: carga, rotação, posição, momentum e etc... Elas só ocorrem em sistemas com várias partículas e se comportam como uma só partícula, apesar de não ser. Isto é, esse fenômeno

está intimamente ligado com um comportamento coletivo, ou seja, várias partículas que apresentam um comportamento em conjunto, sendo notado principalmente em sólidos. Sobre os skyrmions magnéticos, pode-se tentar visualizá-los como um vórtice nos *spins* em um conjunto de sítios na rede. A figura 2.5 faz uma representação simplificada do que seria um skyrmion magnético em uma rede de *spins*

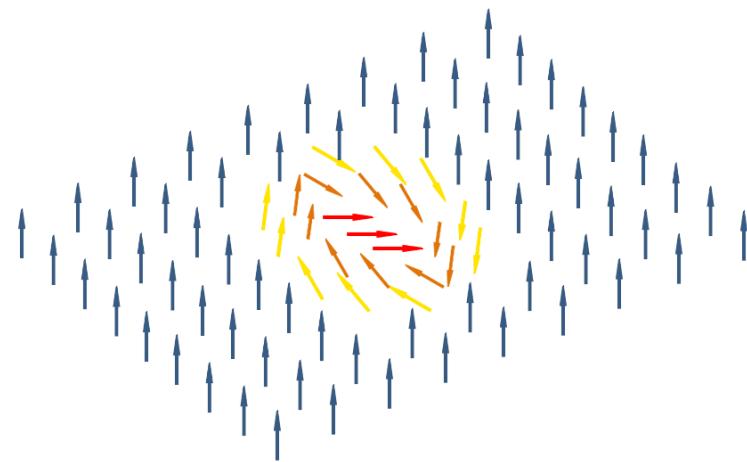


Figura 2.5: Representação de um skyrmion magnético

Capítulo 3

Conceitos de Termofísica

3.1 Formulações Fundamentais

Para se obter informações precisas de um sistema, um dos passos necessários é compreender o processo de variação do mesmo conforme os parâmetros externos sofram mudanças. Para isso, pode-se partir da equação da energia interna U do sistema [23], sabendo que $U = U(S, V, M, \{N\})$, onde S é a entropia, V é o volume, M é a magnetização e $\{N\} = \sum_{i=1}^N N_i$ é o número de moléculas dos elementos químicos. Então

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V,M,\{N\}} dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S,M,\{N\}} dV + \left(\frac{\partial U}{\partial M}\right)_{S,V,\{N\}} dM + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial U}{\partial N_i}\right)_{S,V,M,\{N\}-N_i} dN_i$$

Ou ainda

$$dU = TdS - PdV + HdM + \sum_{i=1}^N \mu_i dN_i \quad (3.1)$$

Pegando outro resultado da termodinâmica, a energia livre de Helmholtz é definida por

$$F = U - TS$$

Portanto, sua diferencial é

$$dF = dU - TdS - SdT \quad (3.2)$$

Ou ainda, substituindo (3.1) em (3.2)

$$dF = -PdV + HdM + \sum_{i=1}^N \mu_i dN_i - SdT$$

De onde, dentre outras relações, pode-se encontrar

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,M,\{N\}} \quad (3.3)$$

e

$$H = \left(\frac{\partial F}{\partial M} \right)_{T,V,\{N\}} \quad (3.4)$$

Outro resultado da termodinâmica é a definição do calor específico (a campo constante) que pode ser escrito como

$$C_H = \left(\frac{dQ}{dT} \right)_H$$

E, também da definição

$$dQ = TdS$$

Logo

$$C_H = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H$$

Usando o resultado encontrado em (3.3), conclui-se que

$$C_H = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_H \quad (3.5)$$

Para a susceptibilidade magnética, da definição, tem-se que

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T \quad (3.6)$$

Onde, se usarmos (3.4) e (3.6), conclui-se que

$$\chi_T = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial M^2} \right)_T^{-1} \quad (3.7)$$

3.2 Obtenção dos valores esperados

Dado um processo qualquer com N resultados possíveis pode-se atribuir um valor $P(A_i) = P_i \geq 0$ como a probabilidade de ocorrer cada evento A_i desse processo [23], [24]. Se em N medidas se obter N_i resultados com o evento A_i , a probabilidade P_i será descrita por

$$P_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N}$$

isto é, uma distribuição de probabilidades.

Onde

$$\sum_{i=1}^N P_i = 1$$

Sendo assim, o valor esperado de um processo A_i pode ser encontrado por

$$\langle A \rangle = \sum_{i=1}^N P_i A_i \quad (3.8)$$

Esse resultado também se estende para potências de A, isto é

$$\langle A^n \rangle = \sum_{i=1}^N P_i A_i^n \quad (3.9)$$

Portanto, dada a definição de variância descrita por

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = (A_i - \langle A \rangle)^2$$

Podemos utilizar o resultado de (3.9) e chegar em

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \sum_{i=1}^N P_i (A_i - \langle A \rangle)^2$$

Que, expandido, se torna

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \sum_{i=1}^N P_i A_i^2 - 2 \sum_{i=1}^N P_i A_i \langle A \rangle + \sum_{i=1}^N P_i \langle A \rangle^2$$

Onde, se usarmos os resultados mostrados até o momento, pode-se concluir que

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (3.10)$$

3.3 Obtenção das observáveis

Da termodinâmica, sabe-se que, se estamos considerando um ensemble canônico pode-se descrever a probabilidade como

$$P_i = \frac{e^{-\beta U_i}}{Z} \quad (3.11)$$

onde $\beta = \frac{1}{kT}$ e Z é a função partição do sistema, que é definida como

$$Z = \sum_{i=1}^N e^{-\beta U_i}$$

onde $e^{-\beta U_i}$ é conhecido como peso de Boltzmann.

Se usarmos então (3.8), (3.11) e realizarmos uma soma sobre todos os estados acessíveis ao sistema pode-se escrever o valor esperado de uma grandeza termodinâmica como

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} = \frac{\sum_{i=1}^N A_i e^{-\beta U_i}}{\sum_{i=1}^N e^{-\beta U_i}}$$

Se esse conjunto de configurações for escolhido de acordo com uma distribuição de probabilidade P_i , temos

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} = \frac{\sum_{i=1}^N P_i^{-1} A_i e^{-\beta U_i}}{\sum_{i=1}^N P_i^{-1} e^{-\beta U_i}}$$

Portanto, usando (3.11), chega-se em

$$\bar{A} = \frac{\sum_{i=1}^N A_i}{N} \quad (3.12)$$

que mostra que o valor esperado de uma grandeza se reduz a uma simples média aritmética fazendo tais considerações.

Geralmente, em um sistema de *spins*, as quantidades termodinâmicas de interesse são a energia, a magnetização, o calor específico e a susceptibilidade magnética, portanto, é necessário alguma forma de tratar esses valores estatisticamente. Para a energia e a magnetização esse processo é simples, já que, no limite termodinâmico, elas serão aproximadamente iguais ao seu valor esperado, isto é

$$E \approx \langle U \rangle \quad (3.13)$$

e

$$M \approx \langle M \rangle \quad (3.14)$$

Para o calor específico, pode-se partir da relação obtida em (3.5) e, para a susceptibilidade magnética parte-se da relação obtida em (3.7). Para tais processos, é necessária utilizar outro resultado já conhecido da termodinâmica que é a relação entre a energia livre de Helmholtz e a função partição, isto é

$$F = -kT \ln Z$$

onde k é a constante de Boltzmann.

Sendo assim, a equação (3.5) se torna

$$C_H = T \left[\frac{\partial^2(kT \ln Z)}{\partial T} \right]_H$$

Ou ainda

$$C_H = kT \left[2 \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial T} - T \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial T} \right)^2 + T \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial T^2} \right) \right]$$

Mas como $\beta = \frac{1}{kT}$, tem-se que

$$\frac{\partial Z}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{-1}{kT^2} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -k\beta^2 \frac{\partial Z}{\partial \beta}$$

E, analogamente

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial T^2} = \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right] = \frac{\partial^2 \beta}{\partial T^2} \frac{\partial Z}{\partial \beta} + \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial^2 Z}{\partial T \partial \beta} = 2k^2 \beta^3 \frac{\partial Z}{\partial \beta} + k^2 \beta^4 \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}$$

Substituindo os valores encontrados na equação do calor específico, chega-se em

$$C_H = k \beta^3 \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 \right]$$

Mas, usando (3.3), pode-se chegar em

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{i=1}^N e^{-\beta U_i} = \sum_{i=1}^N \frac{U_i e^{-\beta U_i}}{Z} = \sum_{i=1}^N P_i U_i = \langle U \rangle$$

E, analogamente

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} = \langle U^2 \rangle$$

Então, pode-se escrever o calor específico como

$$C_H = k_B \beta^2 [\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2] \quad (3.15)$$

Dado um processo parecido com o realizado anteriormente, pode-se demonstrar que a susceptibilidade magnética será dada por

$$\chi_T = \beta [\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2] \quad (3.16)$$

Portanto, se olharmos as equações (3.13), (3.14), (3.15) e (3.16) nota-se que todas as observáveis de interesse estão descritas em função de um valor esperado, e, como visto em (3.12), uma boa aproximação para o valor esperado é simplesmente a média aritmética de uma grandeza. Entender esse resultado é extremamente importante já que é ele que será utilizado no método de Monte Carlo para se obter os valores de interesse na simulação.

3.4 Temperatura Crítica

O fenômeno da transição de fase é frequentemente encontrado com certa diversidade em sistemas físicos e por isso recebe um destaque dentro da física da matéria condensada, isto é, há um grande interesse em descrever e entender esse comportamento crítico. O comportamento crítico em um sistema é descrito por fenômenos que ocorrem perto de uma transição de fase (onde há uma mudança de estado) e esse comportamento é caracterizado, principalmente, por descontinuidades ou singularidades em algumas funções

termodinâmicas que estão presentes no sistema. Como consequência desse comportamento crítico, mudanças repentinas nas suas propriedades físicas acontecem devido à uma variação contínua de um certo parâmetro externo, como a temperatura e campo magnético, por exemplo. Estudar esse fenômeno de uma forma mais completa [25, 26, 27, 28] envolve obter o diagrama de fases, o parâmetro de ordem e os expoentes críticos do sistema, mas isso não será desenvolvido nesse trabalho, entretanto, um ponto importante no estudo das transições de fase é estimar a temperatura crítica em que elas ocorrem.

Uma das formas de se estimar a temperatura crítica de um sistema é obter o quarto cumulante de Binder [24, 29], que, para sistemas com momento ímpar nulo, é definido como

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2} \quad (3.17)$$

O resultado importante que interessa em utilizar esse cumulante é que, em $T = T_c$, o cumulante tende para um ponto fixo U' (não importando o tamanho da rede). Portanto, em um gráfico de U_4 em função da temperatura, para diferentes tamanhos de rede, as curvas devem ter uma interseção ou se aproximar a U' em $T = T_c$. Utiliza-se dessa consequência se para estimar o valor da temperatura crítica do sistema.

Capítulo 4

Conceitos de Física dos Sólidos

Desde o século XVIII já havia indícios de que os cristais eram formados por um conjunto de partículas organizadas de forma periódica, entretanto, essa confirmação só se deu no século XX através de um experimento de difração de ondas com raios-X. Esta descoberta concedeu um prêmio nobel aos seus autores.

Dito isso, o primeiro passo para o entendimento sobre as estruturas cristalinas dos sólidos é entender de antemão três conceitos básicos: a estrutura cristalina, a rede cristalina e a célula unitária.

4.1 Rede Cristalina

As redes cristalinas [3] são definidas por vetores que a formam a partir de uma base, essas redes formadas por esses vetores primitivos são conhecidas como Redes de Bravais. Elas foram descritas, em meados do século XIX, por A. Bravais, que estudou as diferentes formas de se arranjar pontos geométricos periodicamente no espaço.

Há uma descrição qualitativa do que é uma rede cristalina, dada como uma rede que possui um conjunto infinito de pontos com arranjo e orientação que parecem exatamente os mesmos quando vistos de qualquer ponto da rede, isto é, qualquer ponto deve ser equivalente. E é claro, há a descrição matemática, descrita como

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

onde a_i são vetores não coplanares e n_i são números inteiros.

Em duas dimensões é possível, de forma não tão complexa, construir e enumerar essas redes cristalinas, que são cinco: oblíqua (1), retangular (3), retangular centrada (4),

hexagonal (5) e quadrada (2). Elas são descritas por três parâmetros de rede: a , b (que descrevem os tamanhos das arestas) e ϕ (que corresponde ao ângulo entre os eixos). A forma de construção dessas redes através dos parâmetros de rede pode ser vista na tabela [4.1].

Relação Axial	Ângulo	Rede Cristalina
$a \neq b$	$\phi \neq \pi/2$	Oblíqua
$a \neq b$	$\phi = \pi/2$	Retangular
$a \neq b$	$\phi \neq \pi/2$	Retangular Centrada
$a = b$	$\phi = 2\pi/3$	Hexagonal
$a = b$	$\phi = \pi/2$	Quadrada

Tabela 4.1: Parâmetros de rede das redes cristalinas em 2 dimensões

E elas estão simplificadamente demonstradas na figura [4.1].

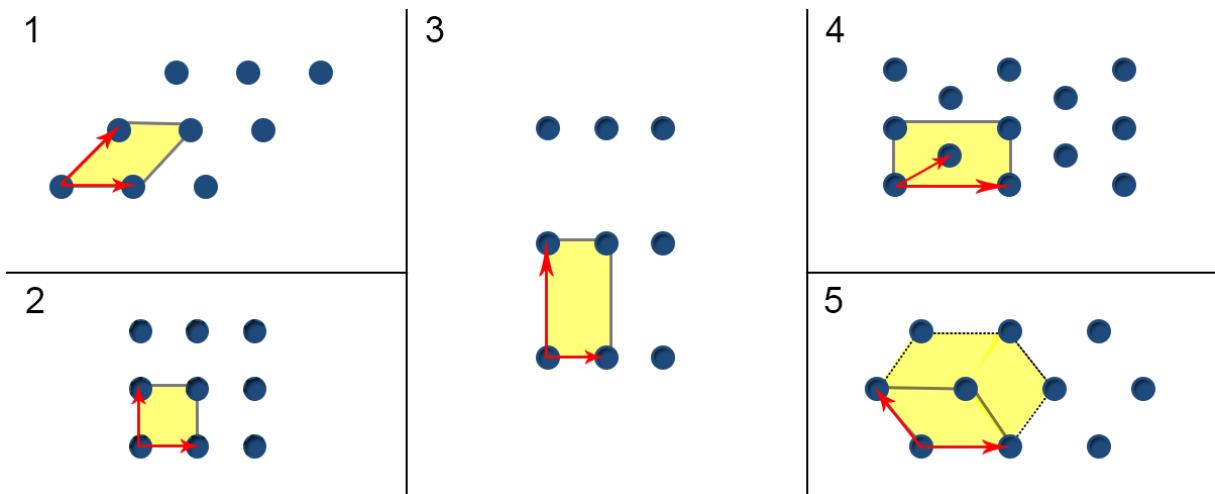


Figura 4.1: Representação das redes cristalinas em 2 dimensões

O número de redes em três dimensões aumenta razoavelmente (são quatorze no total) e cada uma é caracterizada por um conjunto de operações de simetria pontual e pertencem a um sistema cristalino. No total existem sete sistemas cristalinos: cúbico, tetragonal, ortorrômbico, monoclinico, triclinico, trigonal (ou romboédrico) e hexagonal. Esses sistemas são descritos por seis parâmetros de rede: a , b , c (que descrevem os tamanhos das arestas) e α, β, γ (que correspondem aos ângulos entre os eixos). A forma de construção desses sistemas através dos parâmetros de rede pode ser vista na tabela [4.2].

Relações Axais	Ângulos	Sistema Cristalino
$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \pi/2$	Triclínico
$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = \pi/2, \beta \neq \pi/2$	Monoclínico
$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	Ortorrômico
$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	Tetragonal
$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \pi/2, \gamma = 2\pi/3$	Hexagonal
$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq \pi/2$	Trigonal ou romboédrico
$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	Cúbico

Tabela 4.2: Parâmetros de rede dos sistemas cristalinos em 3 dimensões

E as redes cristalinas são divididas em triclínica (14), monoclínica simples (12), monoclínica de base centrada (13), ortorrômica simples (7), ortorrômica de face centrada (10), ortorrômica de corpo centrado (8), ortorrômica de base centrada (9), tetragonal simples (4), tetragonal de corpo centrado (5), hexagonal (6), trigonal ou romboédrica (11), cúbica simples (1), cúbica de face centrada (2), cúbica de corpo centrado (3). Elas estão simplificadamente demonstradas na figura 4.2.

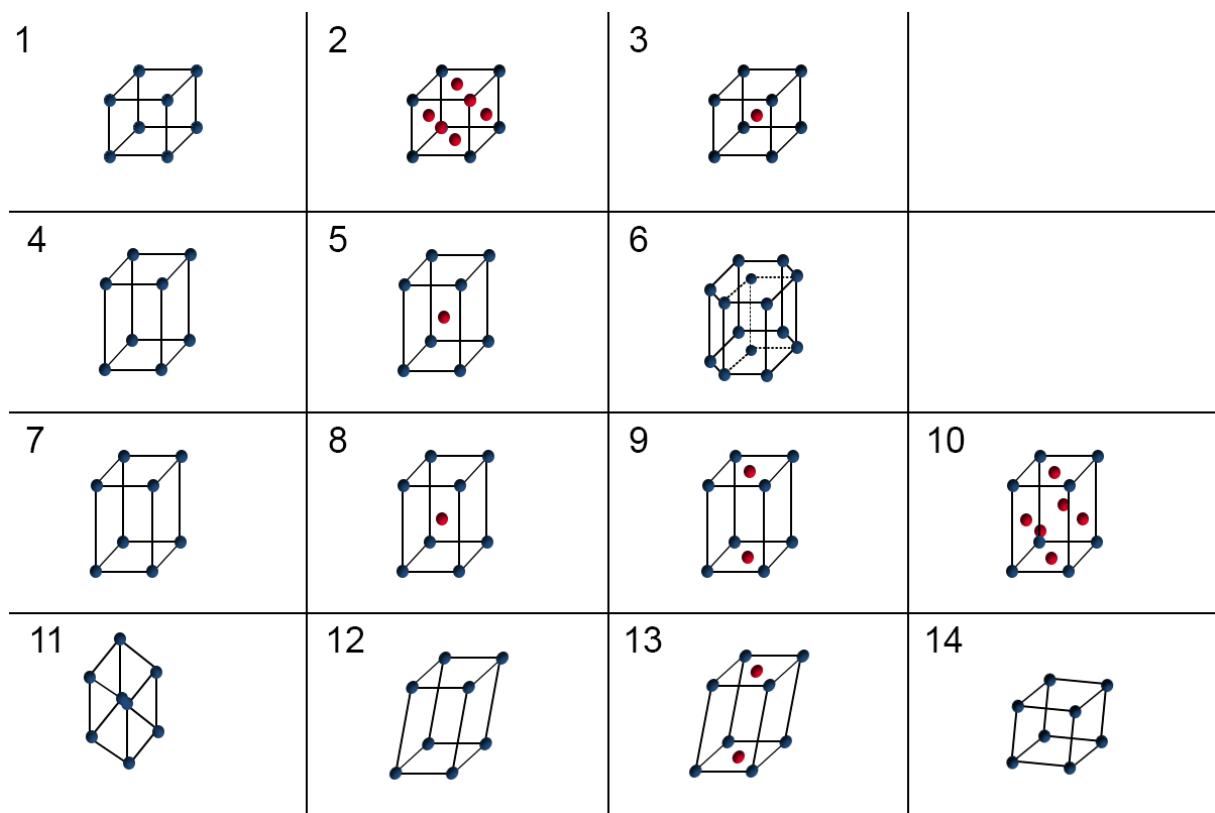


Figura 4.2: Representação das redes cristalinas em 3 dimensões

É importante ressaltar que as redes cristalinas são simplesmente abstrações matemáticas que são percebidas na natureza nas suas "correspondentes físicas": as estruturas cristalinas, as quais serão discutidas em breve.

4.2 Estrutura Cristalina

Sabe-se que os cristais são sólidos ordenados, nos quais as unidades de repetição estão arranjadas de forma periódica em uma rede cristalina. Isto significa que podemos definir uma estrutura cristalina como uma rede cristalina mais um conjunto de posições de um ou mais tipos de átomos, moléculas, íons, etc... Este conjunto recebe o nome de base. A estrutura cristalina contém informações sobre os átomos (ou moléculas, íons, etc...) que ocupam suas posições e descrevem a realidade física encontrada na natureza. A existência da estrutura cristalina resulta dos sólidos cristalinos serem construídos a partir da repetição de uma estrutura elementar conhecida célula unitária. Para demonstrar simplificadamente como seria uma estrutura cristalina que realmente existe na natureza, pode-se pegar um grande conhecido da humanidade: o cloreto de sódio (NaCl). Um esquema da sua forma cristalina pode ser visto na figura [4.3].

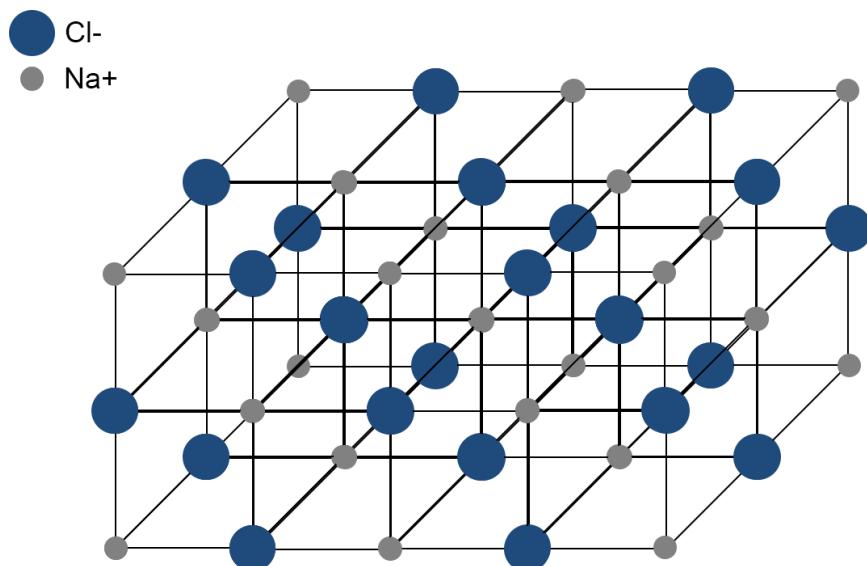


Figura 4.3: Representação da forma cristalina do NaCl

4.3 Célula Unitária

Uma célula unitária de uma rede cristalina é um volume do espaço que, quando sofre as operações de simetria pelos vetores da rede \vec{R} , preenche todo o espaço sem se superpor. Isto é, a célula unitária é uma célula de volume mínimo (não necessariamente existe somente uma célula unitária para cada rede cristalina). Entretanto, independentemente de qual a célula unitária escolhida, elas terão o mesmo volume. As células unitárias sempre irão mostrar a rede cristalina e a base que a estrutura cristalina possui. Usando o exemplo visto anteriormente do cloreto de sódio, pode-se representar sua célula unitária como demonstrado na figura 4.4.

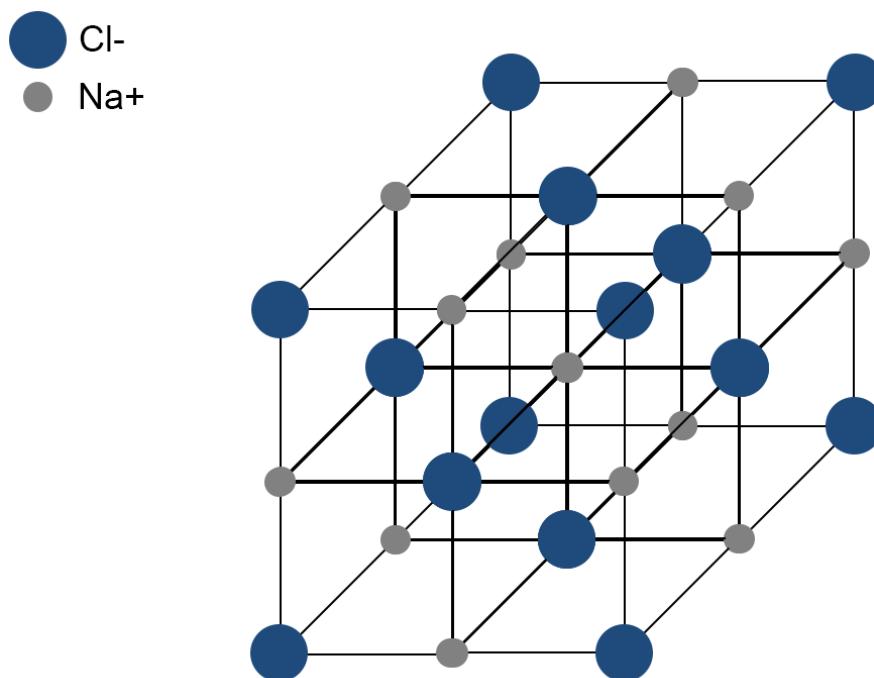


Figura 4.4: Representação da célula unitária do NaCl

4.4 Interações entre vizinhos

Apesar da descrição dos sistemas cristalinos e das redes cristalinas ter sido realizada no geral, o interesse principal deste trabalho é, em duas dimensões, na rede quadrada e

em três dimensões, na rede cúbica simples. Portanto, o foco aqui será nelas.

Dado as formas que a estrutura cristalina pode assumir, é de se imaginar que os átomos (ou moléculas, íons, etc...) irão interagir com seus vizinhos. Essa interação pode ser feita com os primeiros vizinhos, com os segundos vizinhos e assim por diante e é necessário entender como esses vizinhos são definidos.

Para um rede quadrada pode-se representar os vizinhos (primeiros, segundos e terceiros) como mostra a figura [4.5].

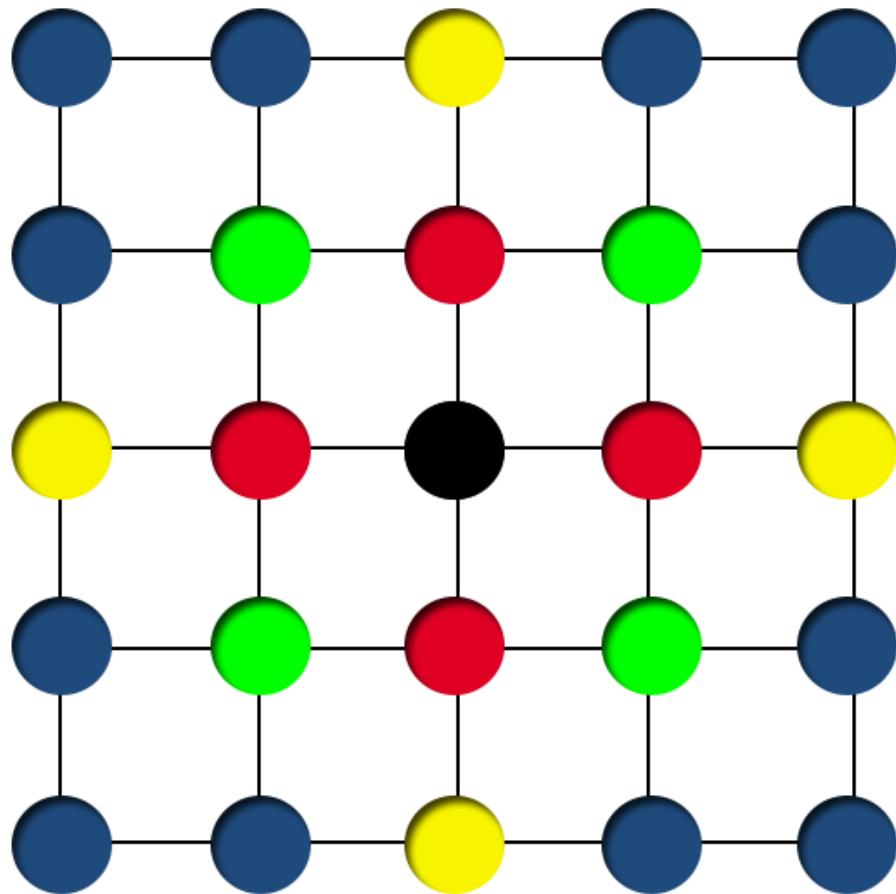


Figura 4.5: Interações entre vizinhos na rede quadrada

Nesse caso, na cor vermelha estão representados os primeiros vizinhos, na cor verde estão representados os segundos vizinhos e na cor amarela, os terceiros vizinhos.

Analogamente, mas de uma forma um pouco mais complexa, na rede cúbica simples essa representação pode ser vista na figura [4.6].

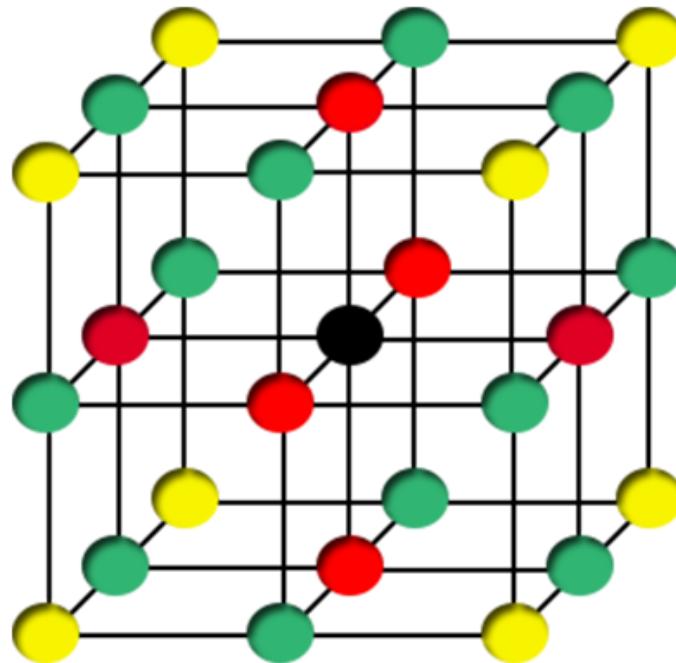


Figura 4.6: Interações entre vizinhos na rede cúbica simples

E, da mesma forma, na cor vermelha estão representados os primeiros vizinhos, na cor verde estão representados os segundos vizinhos e na cor amarela, os terceiros vizinhos.

Estes resultados serão importantes posteriormente para entender como a simulação foi realizada em alguns regimes.

Capítulo 5

Modelo de Heisenberg

As propriedades magnéticas de um material acontecem basicamente por dois fenômenos quânticos [30]: o *spin* e princípio de exclusão de Pauli. O *spin* de um elétron pode ser entendido como um momento magnético intrínseco do mesmo e o princípio da exclusão de Pauli afirma que dois férnioms (partículas de *spin* meio inteiro) que estão restritos a mesma região do espaço não podem ter o mesmo conjunto de números quânticos (orbital e *spin*) simultaneamente. Esses fenômenos resultam em interações que irão gerar determinados comportamentos magnéticos. Como interesse deste trabalho será discutido quatro destas interações [31, 21]: a interação de troca, a interação devida a anisotropia magnetocrystalina, a interação Dzyaloshinskii-Moriya e a interação devida ao efeito Zeeman.

5.0.1 Intereração de troca

A interação de troca ocorre somente entre partículas idênticas e acontece devido a função de onda dessas partículas estarem submetidas a simetria de troca (simétricas ou anti-simétricas). Devido ao princípio da exclusão de Pauli e pela função de onda dos elétrons ser anti-simétrica, isso nos diz que, ao trocarmos dois elétrons (em relação a coordenadas e *spin*) o valor da função de onda é invertido. Como consequência dessa interação, os *spins* irão se polarizar espontaneamente. Pode-se descrever a contribuição dessa interação na Hamiltoniana de Heisenberg através da Hamiltoniana efetiva \mathcal{H}_e definida por

$$\mathcal{H}_e = - \sum_{i,j=1}^N J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (5.1)$$

onde J_{ij} é a constante de interação de troca e \vec{S}_α representa os *spins* ($\vec{S}_\alpha = (S_\alpha^x, S_\alpha^y, S_\alpha^z)$).

Em princípio, a constante de interação deveria ser considerada diferente a cada par de spins do sistema, no entanto, como a sobreposição das funções de onda decai exponencialmente com a distância, apenas os pares próximos são relevantes, isto é, a análise é feita somente com vizinhos próximos. Sendo assim, pode-se reorganizar a equação (5.1) e definir a Hamiltoniana efetiva como

$$\mathcal{H}_e = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (5.2)$$

onde o termo $\langle i,j \rangle$ representa a soma nos pares de elétrons vizinhos.

Se a constante $J > 0$ o estado fundamental do sistema é aquele onde os *spins* do sistema estão alinhados paralelamente, isto é, um ferromagneto. Para $J < 0$, o estado fundamental do sistema é aquele onde os *spins* do sistema estão alinhados antiparalelamente, isto é, um antiferromagneto. A figura 5.1 exemplifica o comportamento dos *spins* devido a essa interação para o caso de um ferromagneto.

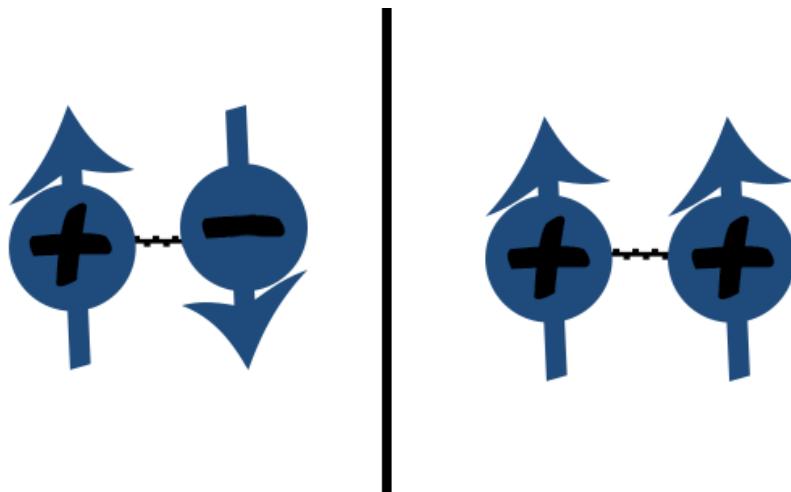


Figura 5.1: Representação do comportamento dos *spins* devido a interação de troca ($J > 0$)

5.0.2 Anisotropia magnetocrystalina

Como consequência da forma e estrutura cristalina de um material, seus *spins* irão possuir uma direção favorecida, conhecida como *easy axis*, isto é, irão existir estados energicamente preferíveis nesse sistema. De maneira geral, o que ocorre é uma interação

entre o *spin* do elétron e o momento angular dos orbitais atômicos e isso ocasiona uma pequena perturbação que depende da direção do *spin*.

Em uma simulação clássica, pode-se descrever o termo de perturbação de primeira ordem da anisotropia magnetocristalina como

$$\mathcal{H}_{ani,i} = -A(\vec{n} \cdot \vec{S}_i)^2 \quad (5.3)$$

Onde \vec{n} é um vetor normal que aponta na direção do *easy axis* e A é a constante de anisotropia, que geralmente é menor que J . Se A é positivo, os *spins* tendem a se alinhar na direção de \vec{n} , caso contrário, os *spins* tendem a alinhar perpendicularmente a \vec{n} .

Fazendo a soma para os N *spins* envolvidos, temos a contribuição dessa interação na Hamiltoniana definida como

$$\mathcal{H}_{ani} = -A \sum_i^N (\vec{n} \cdot \vec{S}_i)^2 \quad (5.4)$$

A figura 5.2 exemplifica o comportamento dos *spins* devido a essa interação para A positivo.

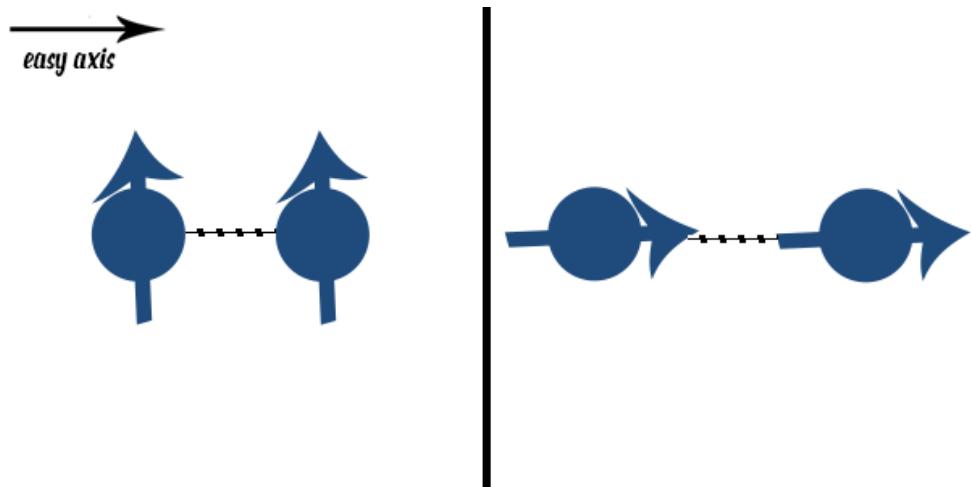


Figura 5.2: Representação do comportamento dos *spins* devido a anisotropia magnetocristalina ($A > 0$)

5.0.3 Efeito Zeeman

O efeito Zeeman acontece devido a exposição de um material a um campo magnético externo \vec{H} . Como consequência desse campo externo aplicado será gerado um torque

no dipolo magnético do material e isso fará com os seus *spins* se rotacionem para se alinhar no sentido do campo externo aplicado. Devido a esse efeito uma contribuição na Hamiltoniana do sistema será gerada sendo definida por

$$\mathcal{H}_z = -\vec{\mu} \cdot \vec{H} \quad (5.5)$$

Mas, o momento magnético de um *spin* $\vec{\mu}_{spin,i}$ é dado por

$$\vec{\mu}_{spin,i} = \pm g\mu_B \vec{S}_i \quad (5.6)$$

onde g é o fator de Landé e $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ o magneton de Bohr.

Desta forma, pode-se reescrever a contribuição na Hamiltoniana para um *spin* como

$$\mathcal{H}_{z,i} = -g\mu_B \vec{S}_i \cdot \vec{H} \quad (5.7)$$

Fazendo a soma para os N *spins* envolvidos e usando a comutatividade do produto interno, chegamos a

$$\mathcal{H}_z = -g\mu_B \sum_i^N \vec{H} \cdot \vec{S}_i \quad (5.8)$$

A figura 5.3 exemplifica o comportamento dos *spins* devido a esse efeito.

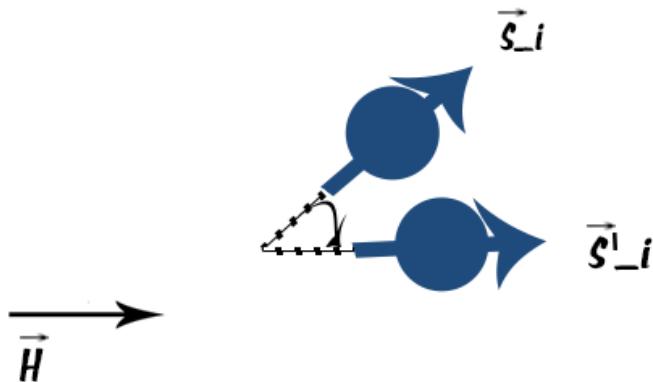


Figura 5.3: Representação do comportamento dos *spins* devido ao efeito Zeeman

5.0.4 Interação Dzyaloshinskii-Moriya

A interação de Dzyaloshinskii-Moriya [32, 33] acontece devido a falta de simetria de inversão de um sistema (compostos quirais). Essa interação descreve uma parte da contribuição total da interação de troca em *spins* vizinhos, e que como consequência causa uma

inclinação de *spin* em momentos magnéticos paralelos ou antiparalelos, sendo responsável por uma parte do comportamento ferromagnético fraco em um material, pela formação de skyrmions magnéticos e etc... Essa interação é responsável por uma contribuição na Hamiltoniana do sistema, dada por

$$\mathcal{H}_{DM} = - \sum_{\langle i,j \rangle}^N \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) \quad (5.9)$$

onde \vec{D}_{ij} é o vetor resultante dessa interação cuja direção dependerá da simetria do composto. Definindo o vetor \vec{R}_{ij} como o vetor que conecta os *spins* \vec{S}_i e \vec{S}_j temos que a energia será minimizada se $\vec{R}_{ij} \parallel \vec{D}_{ij}$ ou $\vec{R}_{ij} \perp \vec{D}_{ij}$. A figura [5.4] mostra uma representação dessa interação.

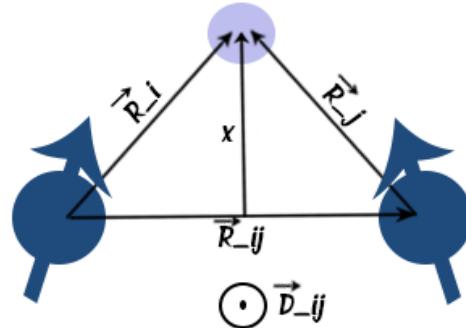


Figura 5.4: Representação da DMI no caso de íons vizinhos e um íon ligante (um caso de *superexchange*)

Nessa situação a direção do vetor \vec{D}_{ij} é proporcional ao produto vetorial entre \vec{R}_{ij} e o vetor \vec{x} . O papel da DMI é inclinar S_i em torno do vetor \vec{D}_{ij} com relação a S_j , o que contribui com a formação dos skyrmions magnéticos.

5.1 O modelo

Estudar materiais magnéticos significa trabalhar com um número muito grande de partículas e isso geralmente implica um problema em encontrar resultados analíticos. Portanto, aproximações numéricas são extremamente importantes e é justamente nesse ponto que entram os modelos computacionais, como o Modelo de Ising e o Modelo de Heisenberg.

O Modelo de Heisenberg foi proposto quase simultaneamente por Heisenberg e Dirac no início do século XX para descrever o comportamento ferromagnético dos materiais. A Hamiltoniana desse modelo pode ser escrita de várias maneiras dependendo de quais termos são levados em consideração. Por exemplo, a forma clássica da Hamiltoniana de Heisenberg isotrópico é descrita somente pela interação de troca (5.2).

Para uma dada configuração de spins $\{\mathbf{S}_i\}$ a Hamiltoniana de Heisenberg nos dá a energia do sistema e, neste trabalho, foi levado em conta quatro termos: termo de troca, termo de anisotropia magnetocristalina, termo de Dzyaloshinskii-Moriya e termo de Zeeman, os quais já foram brevemente discutidos anteriormente. Desta forma, a Hamiltoniana de Heisenberg considerando estes termos será definida como

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ani} + \mathcal{H}_{DM} + \mathcal{H}_z \quad (5.10)$$

Que, usando as equações (5.2), (5.4), (5.9) e (5.8) se torna

$$\mathcal{H} = -J \sum_{<i,j>}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - A \sum_i^N (\vec{n} \cdot \vec{S}_i)^2 - \sum_{<i,j>}^N \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) - g\mu_B \sum_i^N \vec{H} \cdot \vec{S}_i \quad (5.11)$$

É evidente que é necessário um tratamento estatístico nesse modelo e é por isso necessária a utilização das simulações de Monte Carlo.

Capítulo 6

Monte Carlo

6.1 O método

O Método de Monte Carlo [34, 23, 24] recebe esse nome aproximadamente no meio do século XX, durante o projeto Manhattan (em referência ao Cassino Monte Carlo), devido a natureza secreta do trabalho feito no projeto. No projeto, o método de Monte Carlo foi usado para se obter soluções numéricas de integrais, isto é, o método não surgiu para resolver problemas físicos mas foi melhorado posteriormente e se tornou uma poderosa ferramenta para resolver problemas de mecânica estatística.

Esse método define uma classe de algoritmos baseados em amostragem estocástica massiva [35] para obter aproximações numéricas e são uma forma de resolver quaisquer problemas que possuem natureza probabilística. Em problemas físicos geralmente esses métodos seguem uma determinada receita:

- Define-se um sistema. No nosso caso a especificação de uma configuração inicial de *spins* $\{\mathbf{S}_i\}$;
- Um dos *spins* é escolhido e seu valor modificado, e a aceitação ou não desta mudança irá depender do chamado algoritmo de Metropolis;
- Após N tentativas, com N sendo o número de *spins*, temos um passo de Monte Carlo, e o processo então é repetido. Após vários passos de MC, o valor esperado de uma quantidade X é estimado.

Dessa forma, as simulações de Monte Carlo geram consecutivas configurações de *spin* que não guardam encadeamento temporal entre si, formando uma chamada Cadeia

de Markov. No equilíbrio termodinâmico, os valores das grandezas físicas para cada configuração (microestado) irão oscilar em torno dos correspondentes valores médios, com a amplitude de oscilação proporcional à temperatura.

A vantagem desses métodos estocásticos é que a convergência só depende do número de passos utilizados, diferentemente do método de diferenças finitas que dependem da dimensão espacial, por exemplo. Como consequência disso, o método de Monte Carlo é extremamente útil em sistemas com várias partículas e por isso é vantajoso se utilizar desse método em sistemas magnéticos.

6.2 Algoritmo de Metropolis

Um dos algoritmos utilizados nas simulações de Monte Carlo é o algoritmo de Metropolis [36]. Esse algoritmo gera configurações utilizando uma distribuição de Boltzmann, fazendo uma série de transições aleatórias entre os estados, desta forma, há a garantia de que a configuração final do sistema seja a de equilíbrio. Pode-se representar o funcionamento desse algoritmo da seguinte forma:

- Uma nova configuração é gerada. No nosso caso uma nova configuração de *spins* $\{S_j\}$;
- Calcula-se a variação de energia entre a configuração inicial $\{S_i\}$ e a nova configuração $\{S_j\}$;
- Se essa variação for negativa, a nova configuração $\{S_j\}$ é mantida;
- Caso a variação seja positiva, um número aleatório r no intervalo de $[0, 1]$ é gerado;
- Se esse número r for menor que a probabilidade p gerada pela distribuição de Boltzmann, a nova configuração $\{S_j\}$ é mantida;
- Caso contrário, a nova configuração $\{S_j\}$ é descartada;
- Esse processo é repetido N vezes, onde N é o número de spins do sistema.

Capítulo 7

Simulação

Para exemplificar o funcionamento da simulação, um fluxograma foi criado e pode ser visto em [\[7.1\]](#)

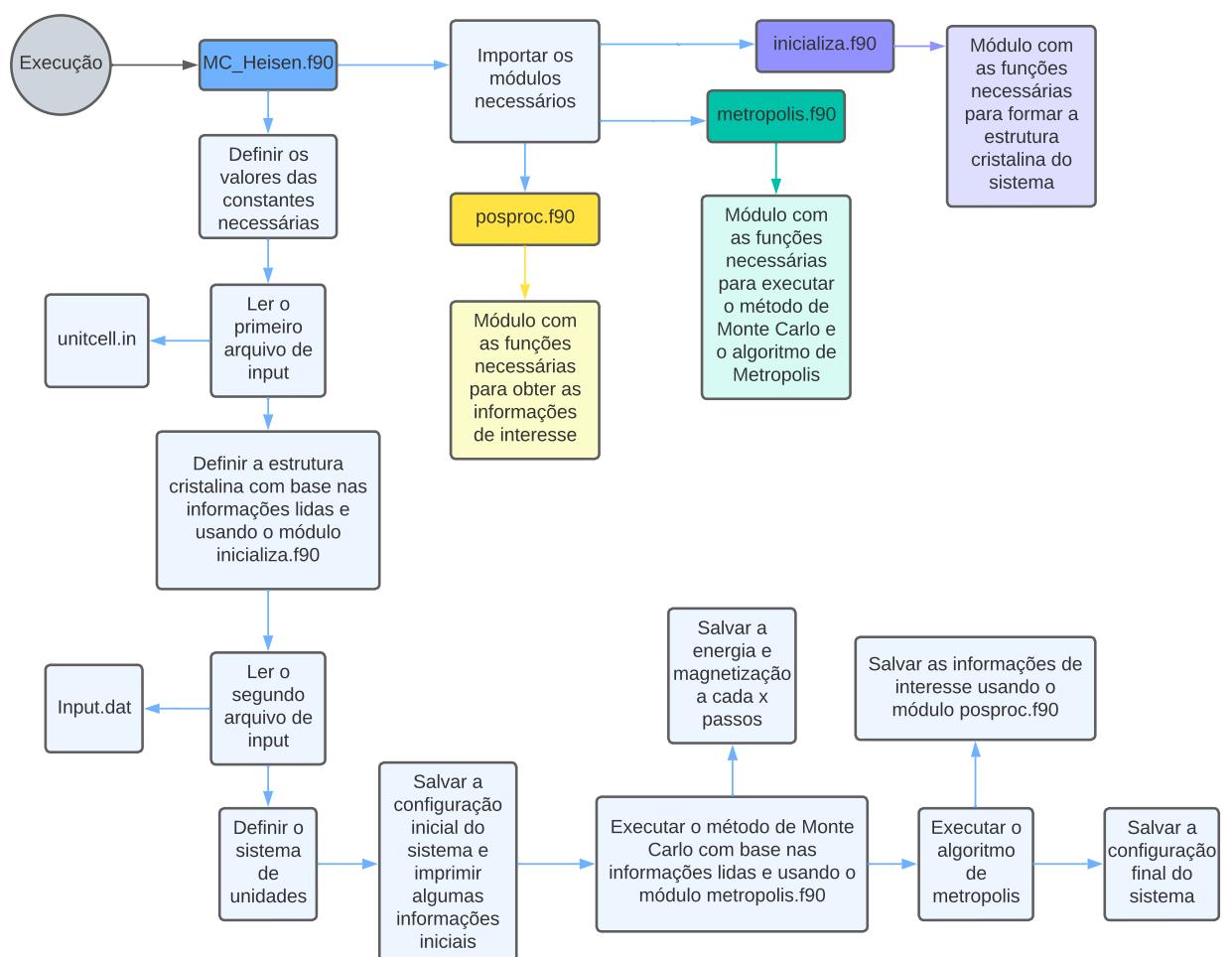


Figura 7.1: Fluxograma do funcionamento do algoritmo utilizado na simulação

O programa utilizado para a obtenção dos resultados desse trabalho foi escrito na linguagem fortran (Fortran 90) e é composto por 4 arquivos: **MC_Heisen.f90**, **inicializa.f90**, **metropolis.f90** e **posproc.f90**, onde os últimos três são módulos e o primeiro é o programa que faz o controle da simulação. De forma geral, o módulo **inicializa.f90** gera, a partir das informações lidas dos arquivos de entrada, a estrutura cristalina (posição de cada átomo, número de vizinhos, a lista de vizinhos de cada átomo e valor inicial dos *spins*, etc). Neste módulo também temos uma subrotina destinada a geração de números pseudo-aleatórios (*numerical recipes*). O módulo **metropolis.f90** realiza, após a inicialização, a dinâmica de Monte Carlo a partir do algoritmo de Metropolis, que já foram discutidos anteriormente em [6]. O módulo **posproc.f90** calcula, a partir das configurações de *spins* geradas ao longo da simulação de Monte Carlo, as grandezas observáveis de interesse¹ (energia, magnetização, calor específico, susceptibilidade magnética, o cumulante de Binder, dentre outras coisas).

No programa principal, **MC_Heisen.f90**, é onde as constantes são definidas e os arquivos de entrada de dados são lidos. A partir disso, o programa principal chama consecutivamente as subrotinas de inicialização, imprime algumas informações e então chama a subrotina de Monte Carlo². Sobre os arquivos de entrada, são dois utilizados: (i) **unitcell.in**, que guarda as informações sobre o tipo de estrutura cristalina, tamanho da rede e o número de vizinhos a serem considerados; e (ii) **input.dat**, onde são definidas as informações gerais como a temperatura, número de passos que serão utilizados (MC e equilíbrio), valores das constantes de interação, a direção do campo/anisotropia, dentre outras coisas.

Para a execução correta da simulação, o programa emprega condições de contorno periódicas, que é aplicada durante o cálculo dos vizinhos e pode ser exemplificada visualmente em [7.2]. Isto é, caso o *spin* pertença a alguma borda, o *spin* da outra extremidade será considerado seu vizinho.

¹São obtidas por uma média dos valores salvos a cada 20 passos de Monte Carlo.

²Que funciona sorteando um *spin* aleatoriamente e modificando sua direção através do ângulo (onde há um “cone” limite para a variação desse ângulo).

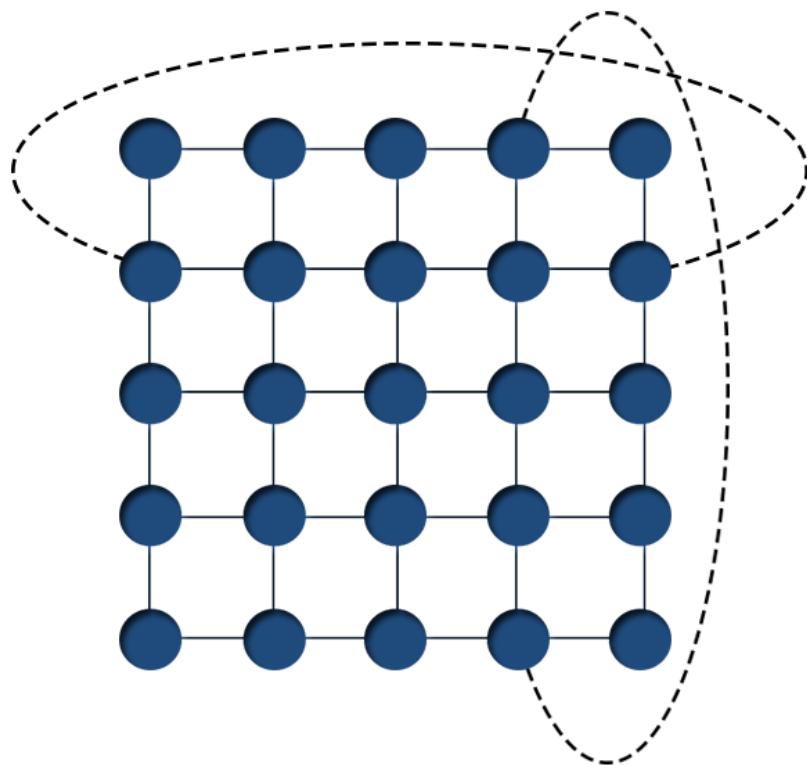


Figura 7.2: Representação da condição periódica de contorno aplicada no algoritmo

A rede utilizada para as simulações em 3D ($L \times L \times L$) foi a rede cúbica simples e em 2D ($L \times L$), a rede quadrada, ambas já discutidas em [4]. Os tamanhos de rede utilizados variam para cada regime e são explicitados durante a análise. O número de passos de Monte Carlo utilizado foi de $1,5 \times 10^5$ e o número de passos para o equilíbrio³ foi de 10^5 (com exceção do caso para se obter o cumulante de Binder, nesse caso, os valores foram de $5 \cdot 10^5$ passos de Monte Carlo e $2,5 \cdot 10^5$ para o equilíbrio). Para exemplificar o porquê do descarte dos passos ser necessário, pode-se pegar a rede de tamanho $L = 10$ na temperatura de $200K$ como exemplo para demonstrar o comportamento da energia e da magnetização pelo número de passos de Monte Carlo, que pode ser visto em [7.3] e [7.4].

³Deve-se descartar um número ξ de passos iniciais de Monte Carlo para que o sistema se equilibre. Esse valor geralmente é definido no momento em que as quantidades termodinâmicas de interesse começam a flutuar em torno de um valor médio.

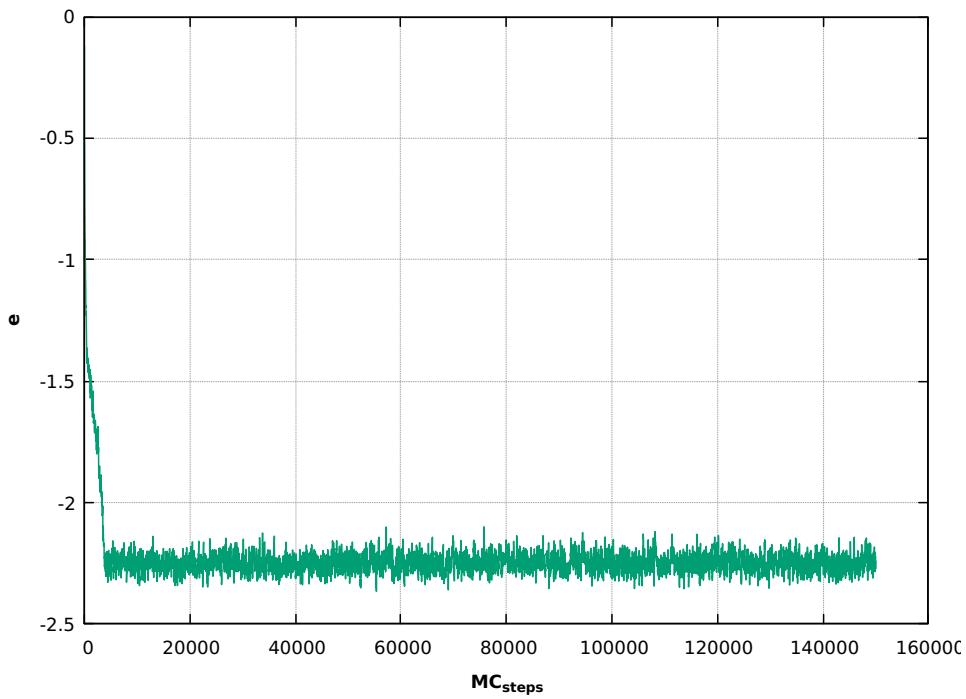


Figura 7.3: Energia média por *spin* pelo número de passos de Monte Carlo

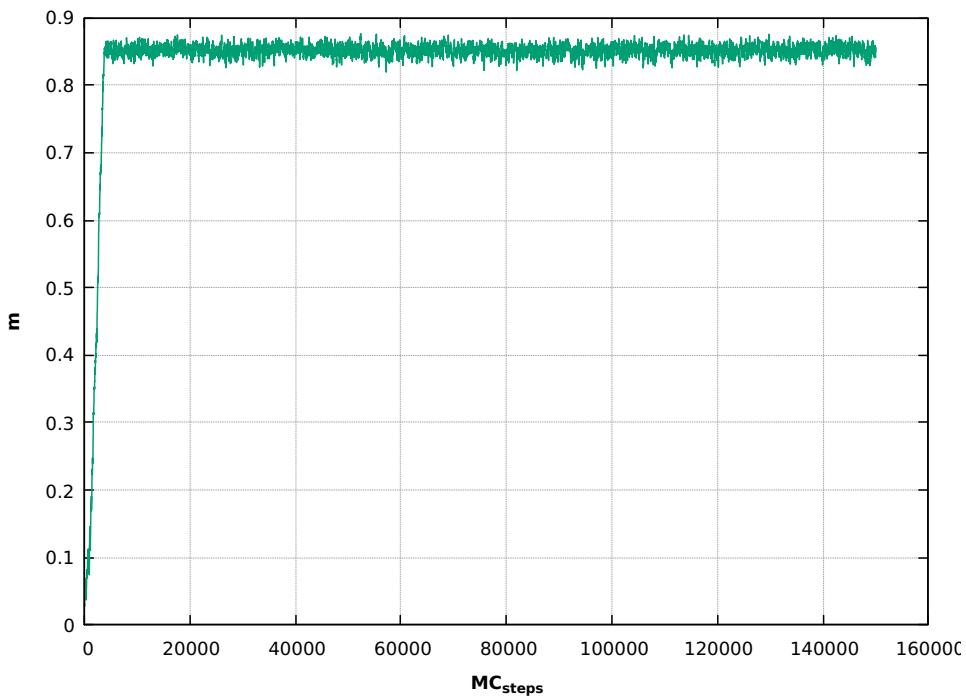


Figura 7.4: Módulo do vetor magnetização média pelo número de passos de Monte Carlo

É evidente que para os passos iniciais ($MC_{steps} < \approx 10000$) o sistema ainda não oscila em torno de um valor médio e isso pode prejudicar na obtenção do final das quan-

tidades termodinâmicas e por isso o descarte é realizado. Como a simulação foi realizada com diversas variações dos parâmetros, o número de passos até que o sistema oscile em torno de um valor médio varia muito e por isso o número de passos descartados foi definido como 100000 de forma padrão, de forma a abranger quase todas as variações (com exceção do caso para o cálculo do cumulante de Binder, onde esses passos foram aumentados).

Capítulo 8

Resultados e Discussões

Como discutido nos capítulos anteriores, as grandezas físicas de interesse deste trabalho são a energia, a magnetização, o calor específico e a susceptibilidade magnética e, além disso, como forma de se estimar a temperatura crítica do sistema, também se fez necessário encontrar o quarto cumulante de Binder. A forma de obtenção dessas quantidades termodinâmicas já foram discutidas em [3]. Portanto, neste capítulo será demonstrado e discutido os efeitos da influência dos parâmetros externos e internos nas grandezas de interesse. Além disso, será demonstrado o comportamento das configurações de *spin* (textura) do sistema em função das variações nestes parâmetros.

8.1 Comportamento do sistema para diferentes tamanhos de rede

No primeiro momento queremos entender como grandezas como a energia e a magnetização variam conforme o tamanho da rede é modificado, e isto será demonstrado e discutido a seguir. Os resultados aqui foram reportados foram obtidos utilizando a rede cúbica simples, considerando apenas os primeiros vizinhos e utilizando somente a interação de troca ($J = 13.6$ meV), ou seja, os demais termos de interação são nulos.

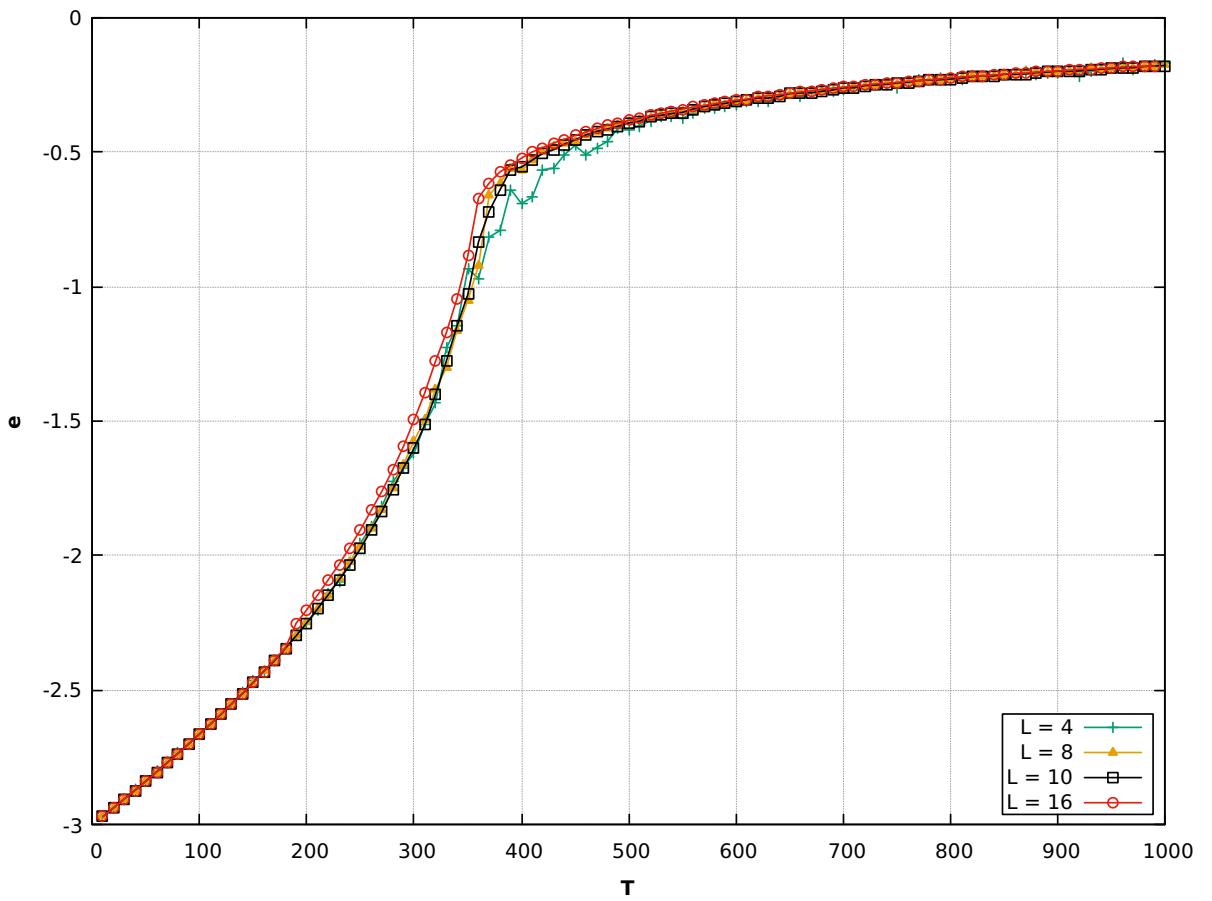


Figura 8.1: Energia média por *spin* (em unidades de J) pela temperatura (em K) com tamanhos de rede diferentes

Como $J > 0$, o efeito da interação de troca será alinhar o sistema paralelamente, ou seja, os *spins* se alinharam com os seus vizinhos em uma mesma direção (definida aleatoriamente) e o sistema se caracteriza como um ferromagneto. Na medida que o termo de troca da Hamiltoniana do sistema depende do produto escalar entre *spins* que são vizinhos, se estes estão alinhados paralelamente o produto escalar tem seu valor máximo. Isto é, como J é positivo e o produto escalar tem seu valor máximo, é evidente que o valor mínimo da energia ocorre na menor temperatura, como todos os *spins* apontando paralelamente numa mesma direção. Entretanto, conforme a temperatura aumenta, esta orientação começa a ser desalinhado até atingir o sistema atingir uma temperatura crítica T_c onde o sistema se transforma em um paramagneto, ou seja, ocorre uma transição de fase e o sistema está totalmente desalinhado. Simplificando: o que acontece é uma disputa entre a interação de troca (que quer manter o sistema ordenado) e a temperatura (que desalinha cada vez mais o sistema conforme ela aumenta). Este comportamento claramente

pode ser observado na figura [8.1].

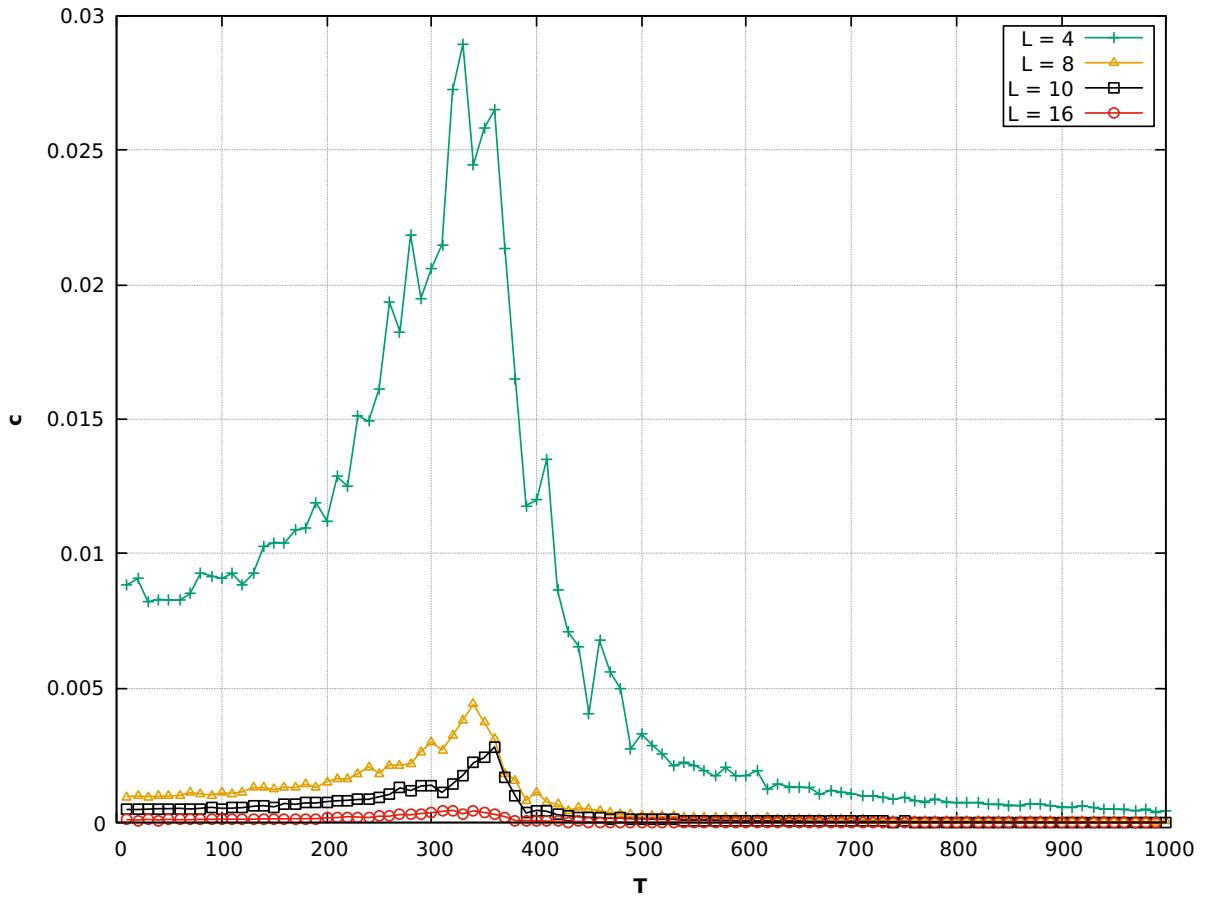


Figura 8.2: Calor específico (em eV/K) pela temperatura (em K) com tamanhos de rede diferentes

Numa transição de fase, grandezas intensivas como o calor específico apresentam um pico na temperatura crítica, sendo uma boa grandeza para caracterizar uma transição. Sabe-se da termodinâmica que uma das formas de descrever o calor específico é através da derivada da energia do sistema, isto é

$$c_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V$$

Isso nos diz que o comportamento de c está diretamente ligado com o comportamento da energia do sistema. Isto é, podemos entender o comportamento de c a partir do gráfico da energia pela temperatura em conjunto com o resultado matemático de que a derivada de uma função em um dado ponto é igual a reta tangente no mesmo. Isso está exemplificado em [8.3].

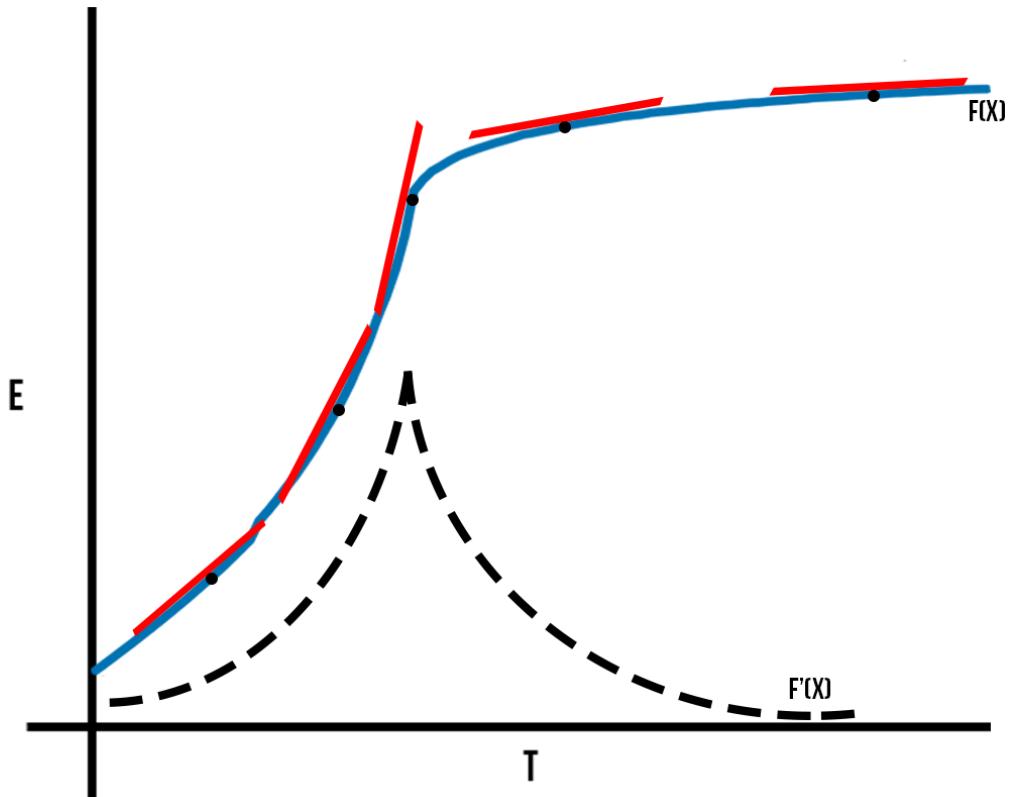


Figura 8.3: Análise da derivada da energia

Onde pode-se notar um esquema de representação da curva da energia do sistema, representada pela curva $F(x)$ com alguns pontos marcados (com suas respectivas retas tangentes demonstradas) e a forma de sua derivada, representada por $F'(x)$. Os pontos estão marcados para entendermos o comportamento do calor específico do sistema com base na energia obtida anteriormente.

Analizando as retas tangentes aos pontos marcados percebe-se que em todos os pontos da curva a derivada é positiva (retas crescentes), ou seja, o calor específico é sempre positivo. Além disso pode-se perceber que, do ponto 1 até o ponto 3, a inclinação da reta tangente aumenta e isso nos diz que a sua derivada cresce. Entretanto, essa inclinação é máxima no ponto 3 e a partir dele começa a cair (como pode-se notar nos dois pontos seguintes). Essa mudança na derivada (isto é, a derivada parar de crescer e começar a diminuir) é uma assinatura da mudança de fase do sistema, uma vez que quando um determinado material sofre uma transição de fase, o calor específico naquela temperatura é tecnicamente infinito (isso equivale a alcançar seu valor máximo nesse caso).

Isso nos diz que o calor específico deve crescer até a atingir seu valor máximo na temperatura crítica T_c e a partir dela começar a decrescer. Além disso, como o sistema

fica mais preciso conforme a rede aumenta, isto é, a diferença $\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2$ é menor, espera-se que o calor específico diminua conforme esse aumento ocorre, já que ele depende explicitamente de $\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2$, como visto em (3.15). Este comportamento foi obtido conforme pode ser observado em [8.2].

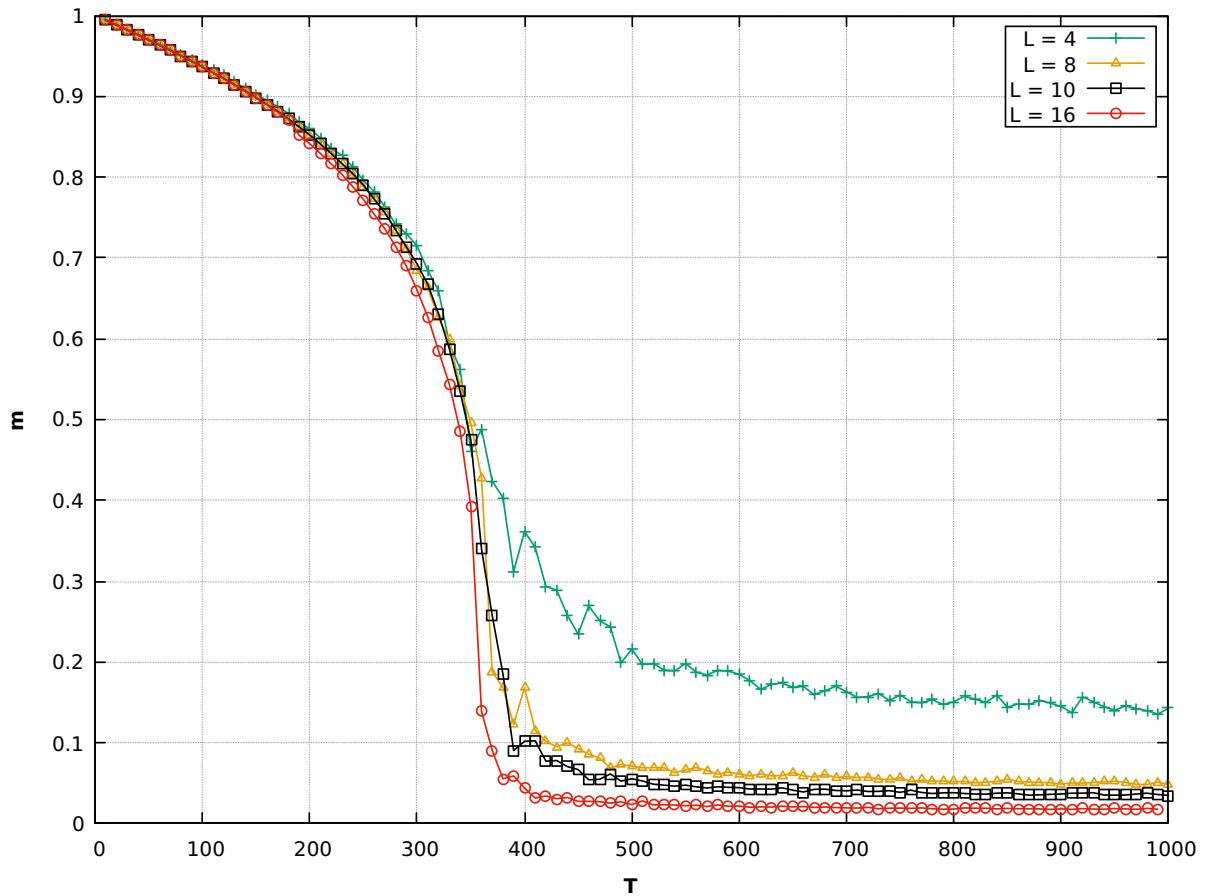


Figura 8.4: Módulo do vetor magnetização média pela temperatura (em K) com tamanhos de rede diferentes

Como o sistema está alinhado em um primeiro momento, espera-se que o módulo do vetor magnetização (isto é, o módulo do vetor que descreve para onde os *spins* do sistema apontam em média) seja máximo inicialmente (baixas temperaturas) e diminua conforme a temperatura aumenta (já que o sistema começa a se desalinear até se transformar em um paramagneto a partir da T_c). Este comportamento pode ser observado em [8.4].

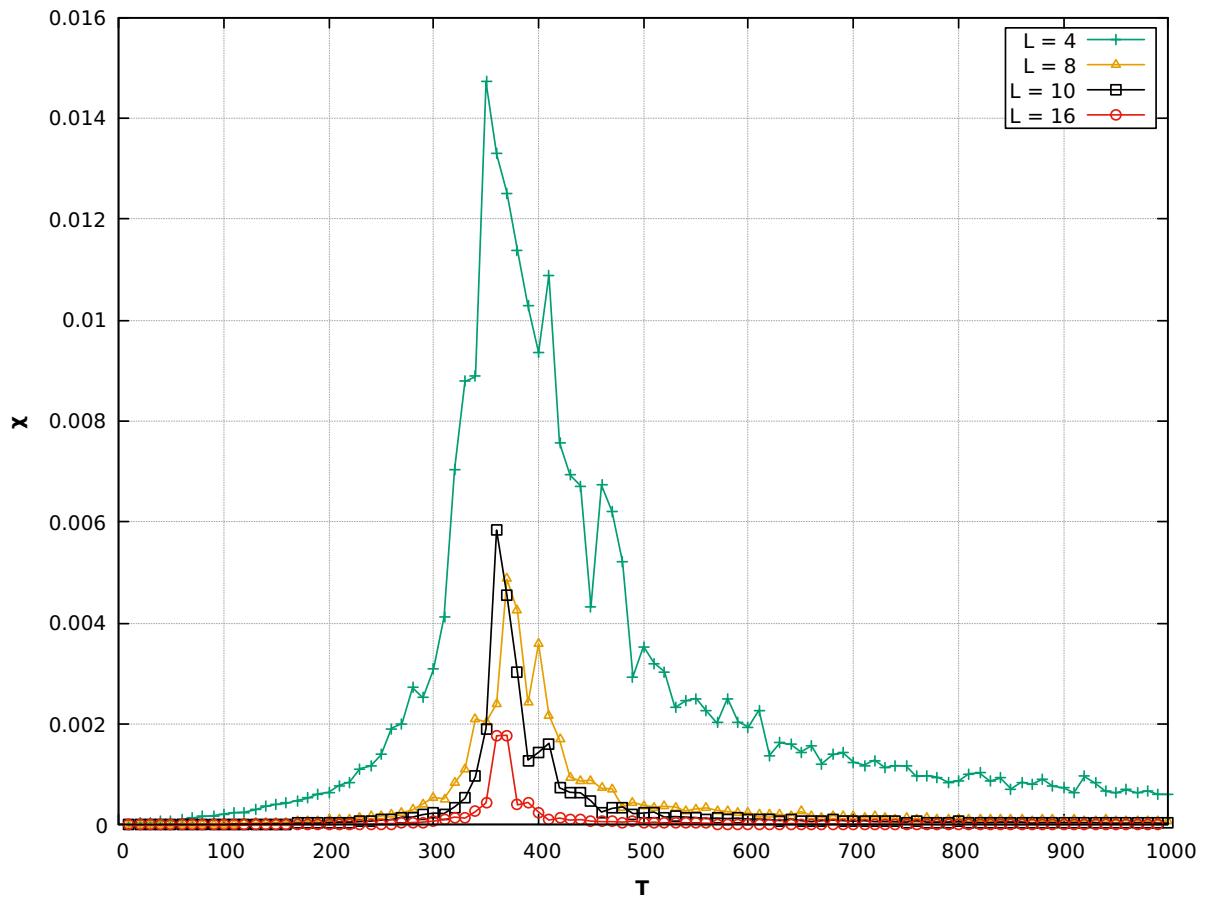


Figura 8.5: Susceptibilidade magnética pela temperatura (em K) com tamanhos de rede diferentes

Tratando-se da susceptibilidade magnética, sabe-se que há uma dependência com a derivada da magnetização e, portanto, também espera-se um pico na T_c , analogamente ao calor específico. Isso acontece já que a susceptibilidade magnética é um marcador do quanto um material se tornará magnetizado conforme um campo externo é aplicado, e, como discutido anteriormente em [2], ferromagnetos se magnetizam mais que paramagnéticos. Entretanto, como o material está totalmente alinhado em um primeiro momento, não há como ele se magnetizar mais e por isso a susceptibilidade magnética deve ser zero. Conforme ele se desorganiza (com o aumento da temperatura), a susceptibilidade magnética deve crescer até a temperatura crítica e começar a cair a partir dai. Além disso, evidentemente que conforme o tamanho do sistema aumenta, a diferença $\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$ também diminui e isso fará com que a susceptibilidade magnética também diminua, pela dependência vista em [3.16]. Esse comportamento pode ser observado em [8.5].

Por fim, como uma maneira de estimar de maneira mais precisa a temperatura

crítica do sistema, utilizou-se o quarto cumulante de Binder, que foi brevemente discutido em [3]. O resultado pode ser visto em [8.6].

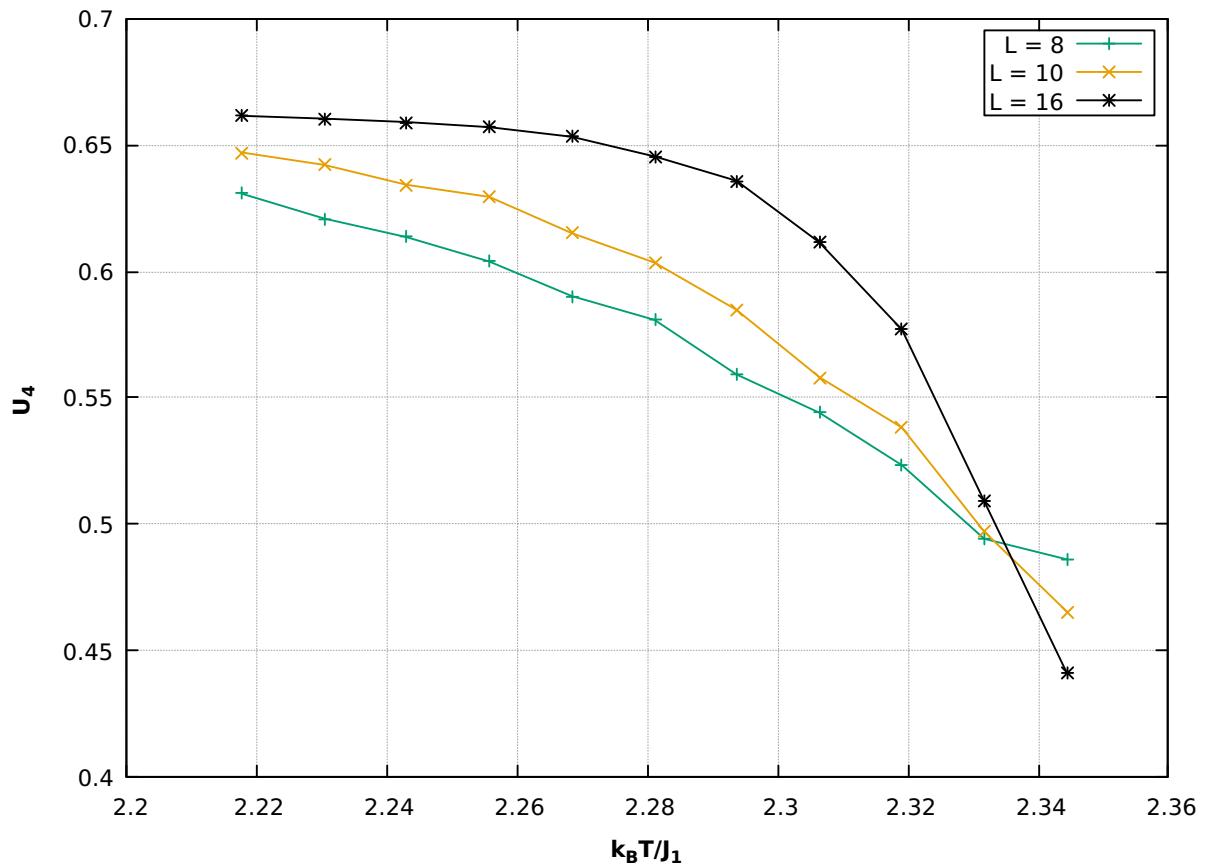


Figura 8.6: Quarto cumulante de Binder vs $k_B T / J$ para diferentes tamanhos de rede

E, de acordo com esse método, a transição de fase ocorre em $T_c \approx 368K$. O que parece de acordo com o comportamento da energia, magnetização, calor específico e a susceptibilidade magnética vistos anteriormente.

Uma forma interessante de demonstrar como o sistema se comporta, além das análises das grandezas de interesse, é visualizar o comportamento das configurações de *spin* conforme essas variações ocorrem. Para isso, a rede com $L = 10$ será utilizada como exemplo e as configurações de *spin* para algumas temperaturas (10K, 190K, 340K e 500K) serão demonstradas a seguir. As imagens foram obtidas com o auxílio do programa ParaView e o resultado pode ser observado em [8.7].

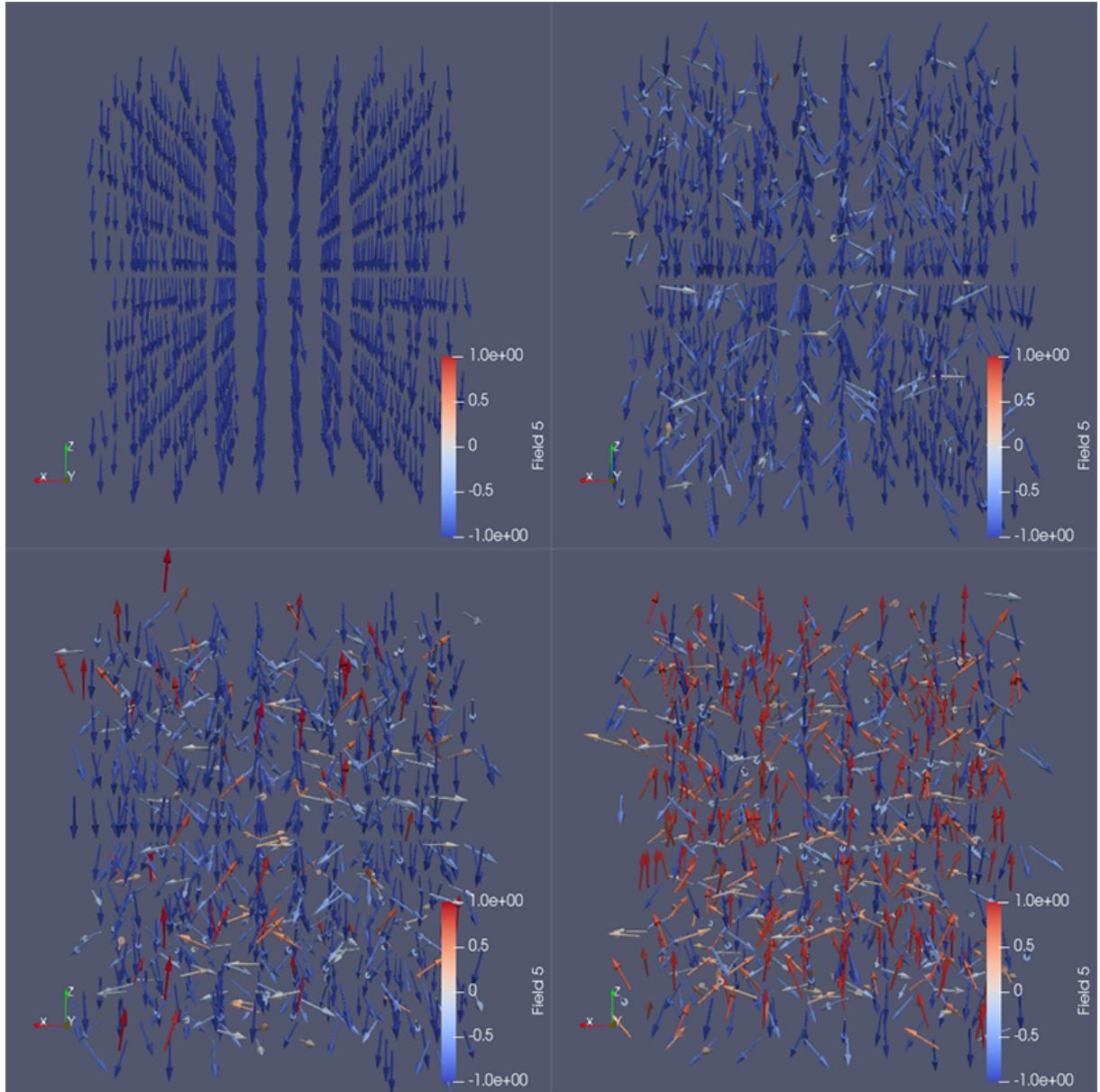


Figura 8.7: Configurações de *spin* para as temperaturas de 10K, 190K, 340K e 500K

8.2 Efeito dos segundos vizinhos

Com a análise do comportamento obtido usando a interação de troca somente entre os primeiros vizinhos feita, um outro fator interessante a se analisar é a mudança no comportamento gerado se considerarmos também os segundos vizinhos no processo. Para isso, o valor de J_2 (constante de troca dos segundos vizinhos) foi considerado como uma fração do valor de $J = J_1$ (constante de troca dos primeiros vizinhos). A discussão acerca do número de vizinhos e quais são eles foi realizada em [4]. Essa etapa foi dividida em dois

regimes: considerando J_1 e J_2 positivos (os primeiros vizinhos e os segundos vizinhos tem interação ferromagnética) e J_1 positivo mas com J_2 negativo (os primeiros vizinhos tem interação ferromagnética e os segundos vizinhos tem interação antiferromagnética). Para todos os casos, o tamanho da rede utilizado foi de $L = 10$.

8.2.1 $J_2 > 0$

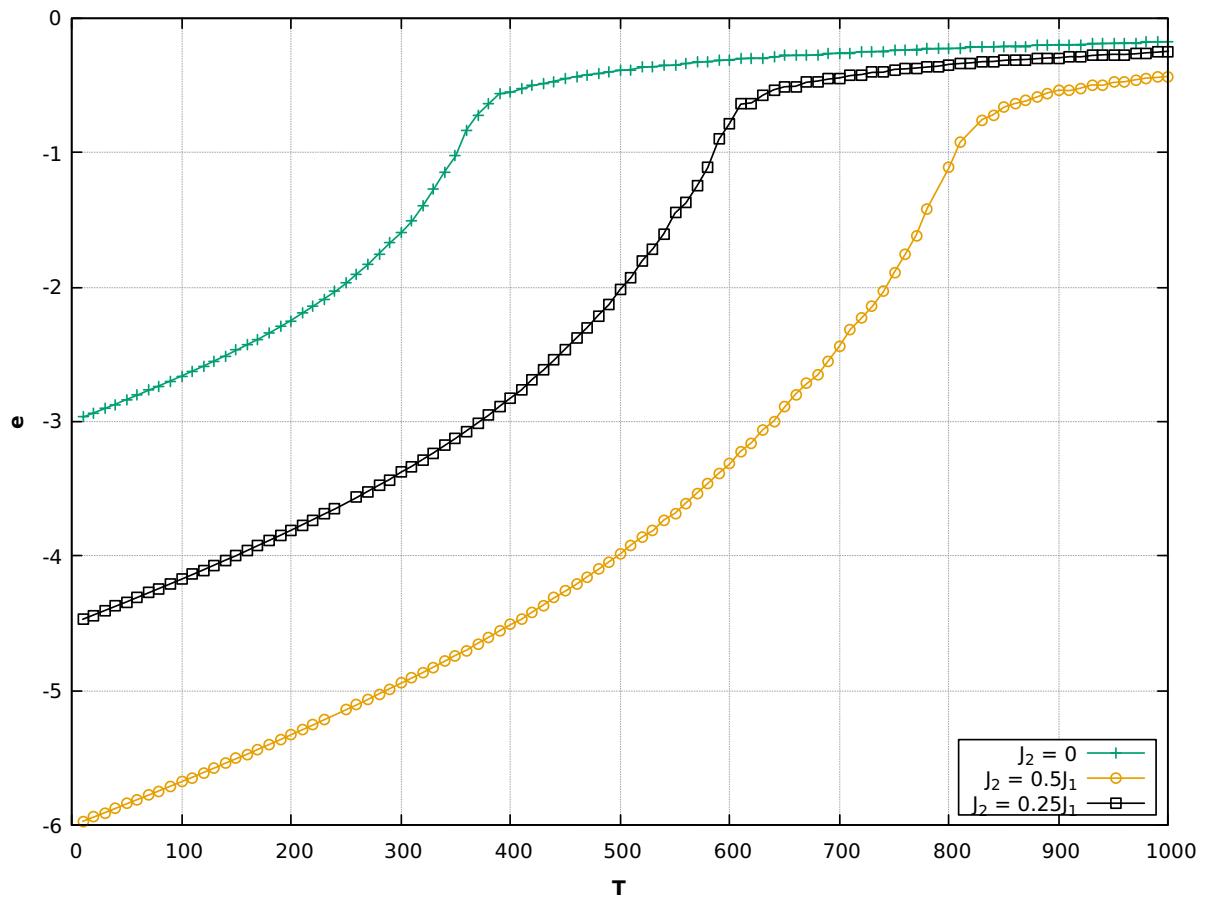


Figura 8.8: Energia média por *spin* (em unidades de J_1) pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 > 0$)

Como comentado anteriormente, o efeito da interação de troca no sistema é alinhar os *spins* paralelamente com os seus vizinhos, portanto, é de se esperar que, se considerarmos também os segundos vizinhos no processo, o sistema ficará mais alinhado e terá um comportamento "mais ferromagnético". Como consequências desse maior alinhamento, é claro que a temperatura T_c (que assume o papel de desordenar o sistema) necessária para o sistema sofrer a transição de um material ferromagnético para um paramagnético aumenta e a energia também fica mais negativa, conforme pode-se notar em [8.8].

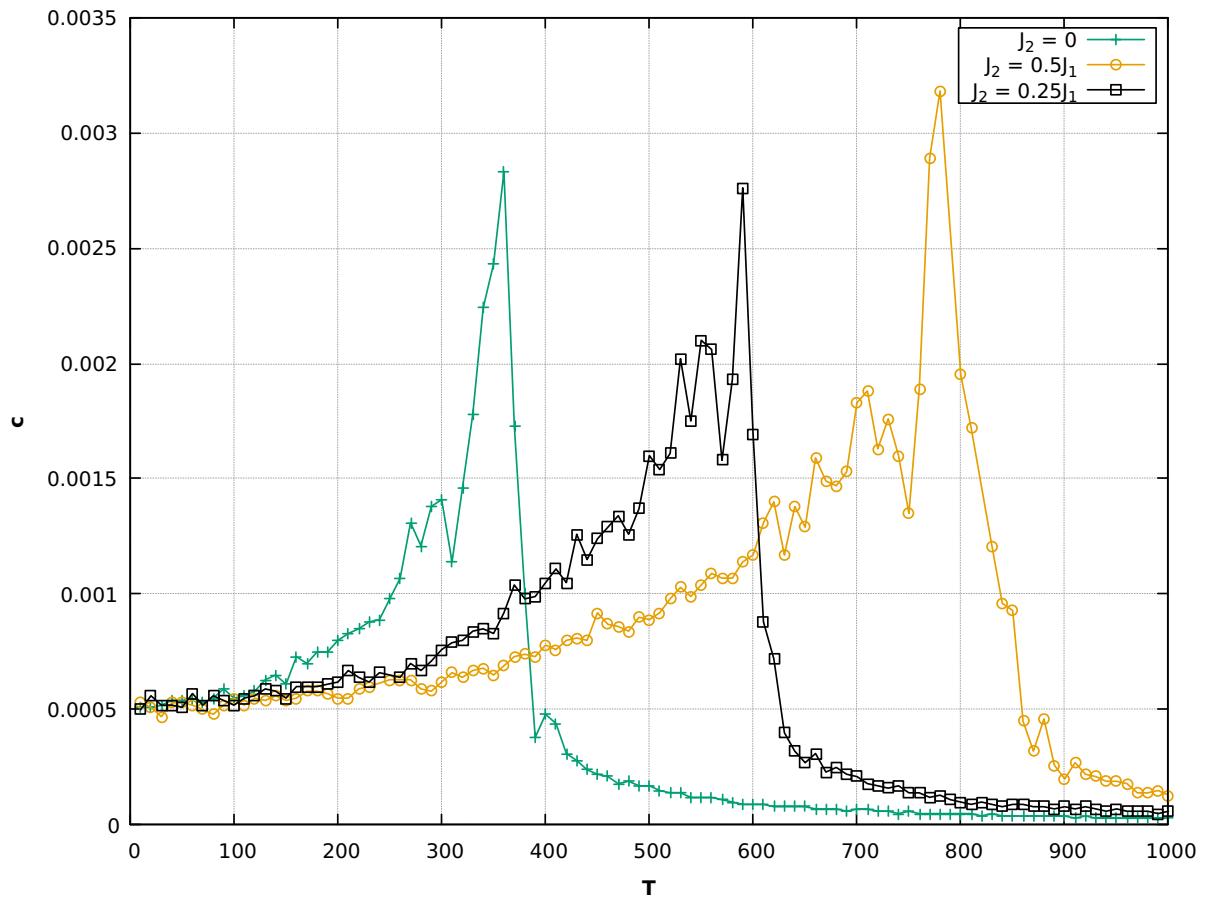


Figura 8.9: Calor específico (em eV/K) pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 > 0$)

Pela natureza do calor específico já discutida anteriormente, as únicas mudanças notáveis com a utilização dos segundos vizinhos são o deslocamento do pico e uma pequena variação no seu valor máximo atingido (devido a variação da energia do sistema), como pode ser observado em [8.9].

Naturalmente o comportamento observado no módulo do vetor magnetização média é o mesmo: a transição de fase é deslocada para maiores temperaturas. Isso significa que o sistema se mantém ferromagnético até que seja exposto a temperaturas mais altas do que no caso considerando apenas os primeiros vizinhos, como pode ser observado em [8.10].

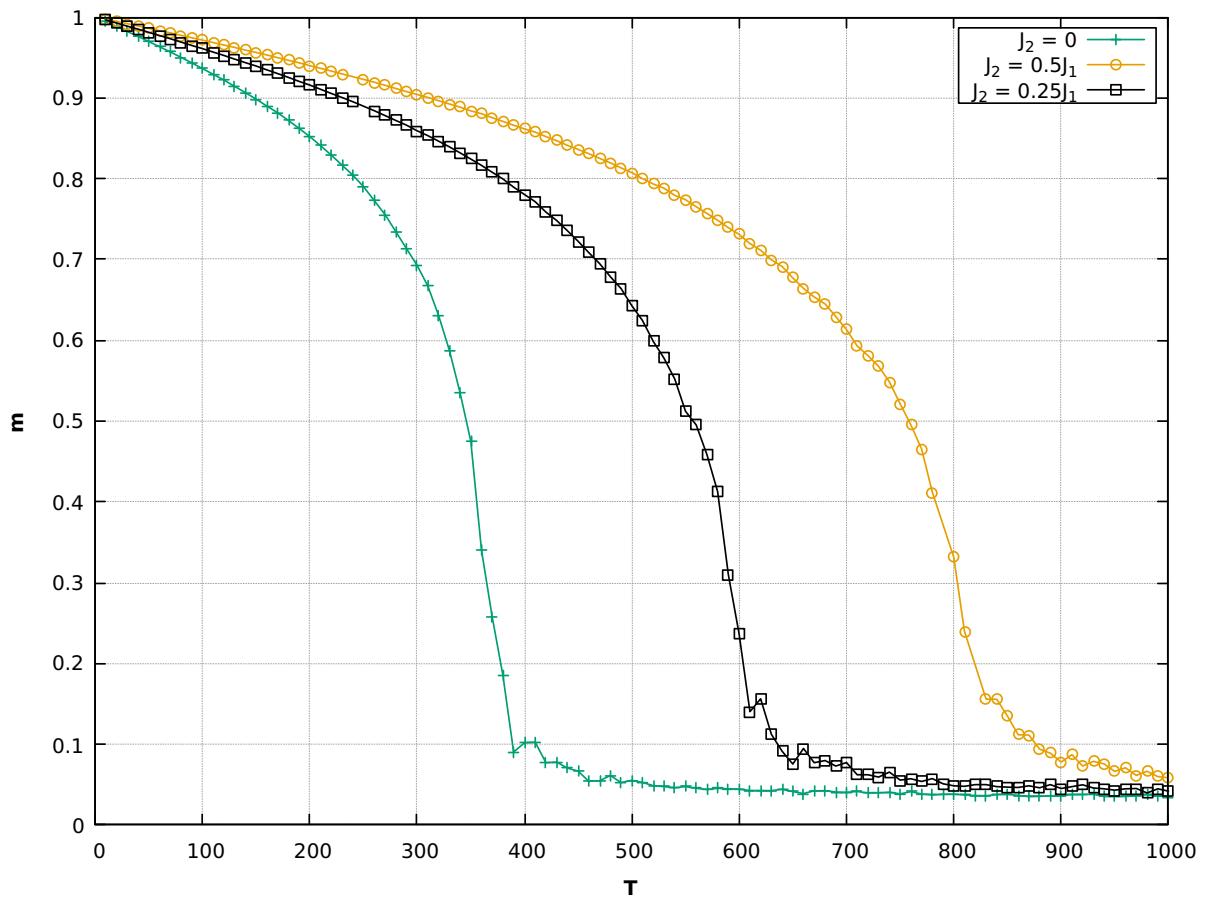


Figura 8.10: Módulo do vetor magnetização média pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 > 0$)

No caso da susceptibilidade magnética o processo é análogo ao do calor específico: o efeito dos segundos vizinhos aqui é variar o valor máximo atingido pelo pico e deslocar o mesmo para temperaturas maiores, conforme pode ser observado em [8.11].

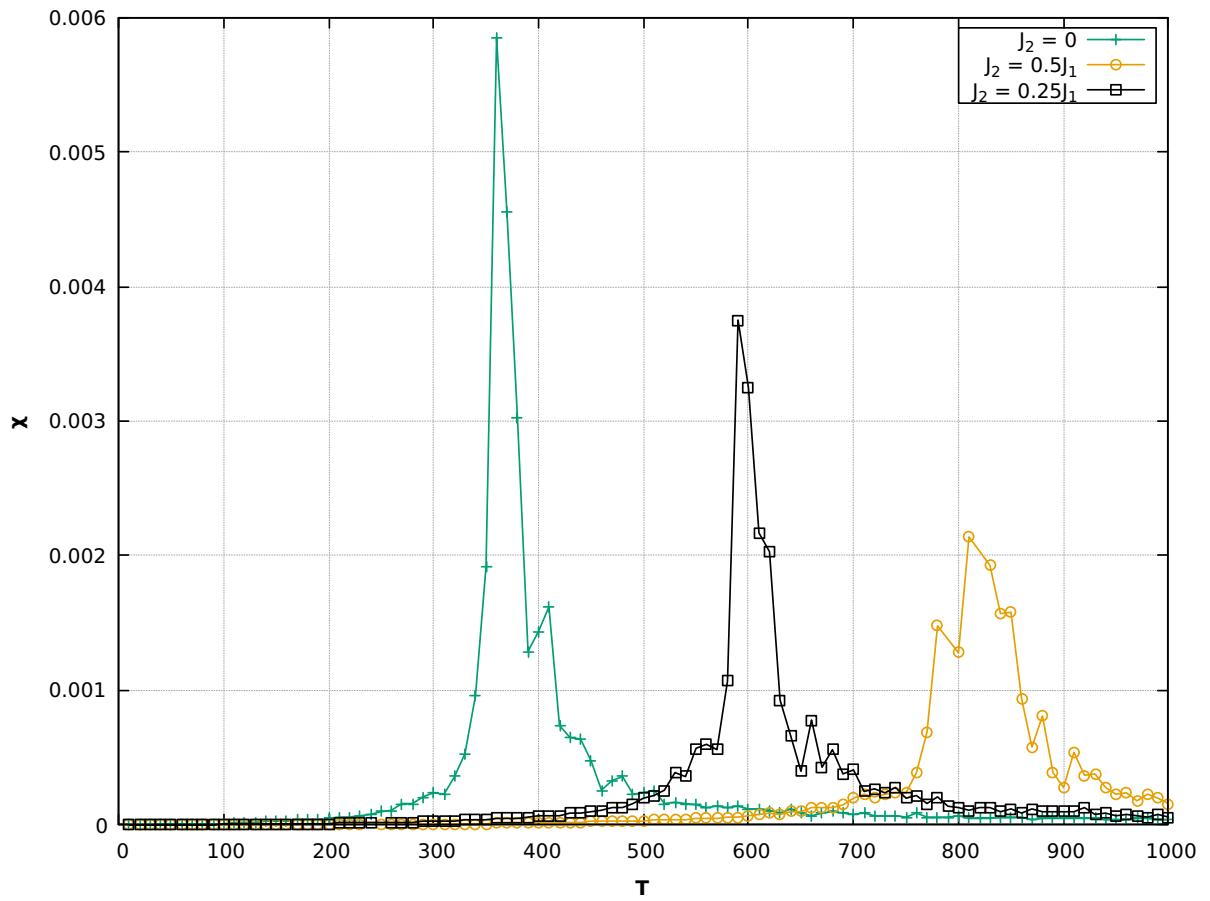


Figura 8.11: Susceptibilidade magnética pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 > 0$)

Como uma forma de analisar o quanto a temperatura de transição do sistema T_c foi alterada com a utilização dos segundos vizinhos no processo, o quarto cumulante de Binder também foi calculado para os dois casos: $J_2 = J_1/2$ e $J_2 = J_1/4$. O resultado pode ser observado, respectivamente, em [8.12] e [8.13].

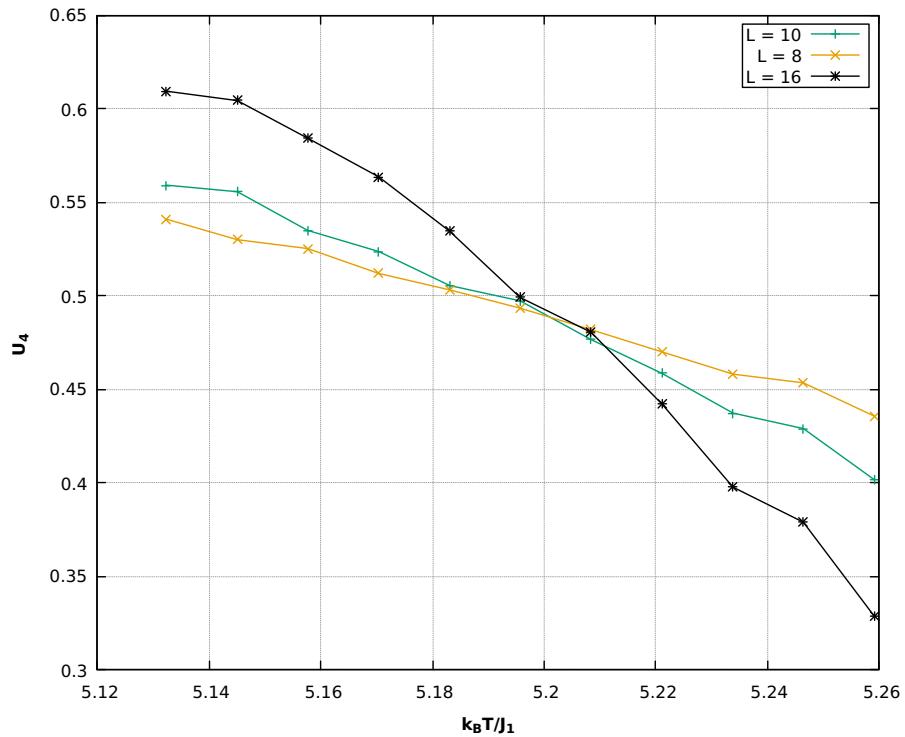


Figura 8.12: Quarto cumulante de Binder vs $k_B T / J_1$ para diferentes tamanhos de rede ($J_2 = J_1/2$)

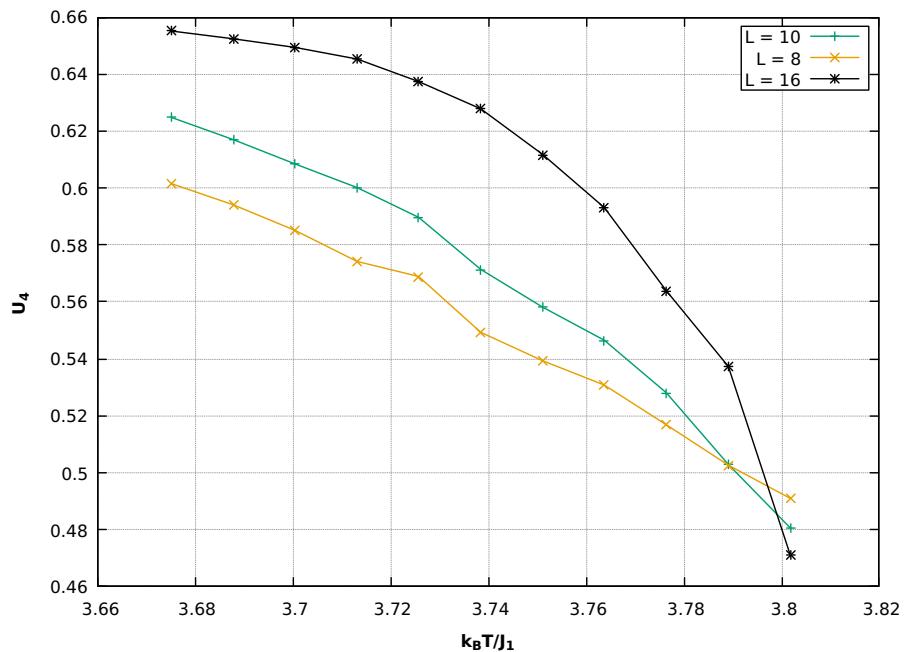


Figura 8.13: Quarto cumulante de Binder vs $k_B T / J_1$ para diferentes tamanhos de rede ($J_2 = J_1/4$)

Das figuras [8.12] e [8.13], vemos que a inclusão da interação de segundos vizinhos resulta em valores de $T_c \approx 821K$ para o caso com $J_2 = J_1/2$ e $T_c \approx 599K$ para o caso com $J_2 = J_1/4$. Um resultado interessante a ser notado é que o crescimento da temperatura crítica devido a inclusão da interação dos segundos vizinhos no foi linear, conforme pode ser visto em [8.14]. A saber, α é o fator da razão J_2/J_1 .

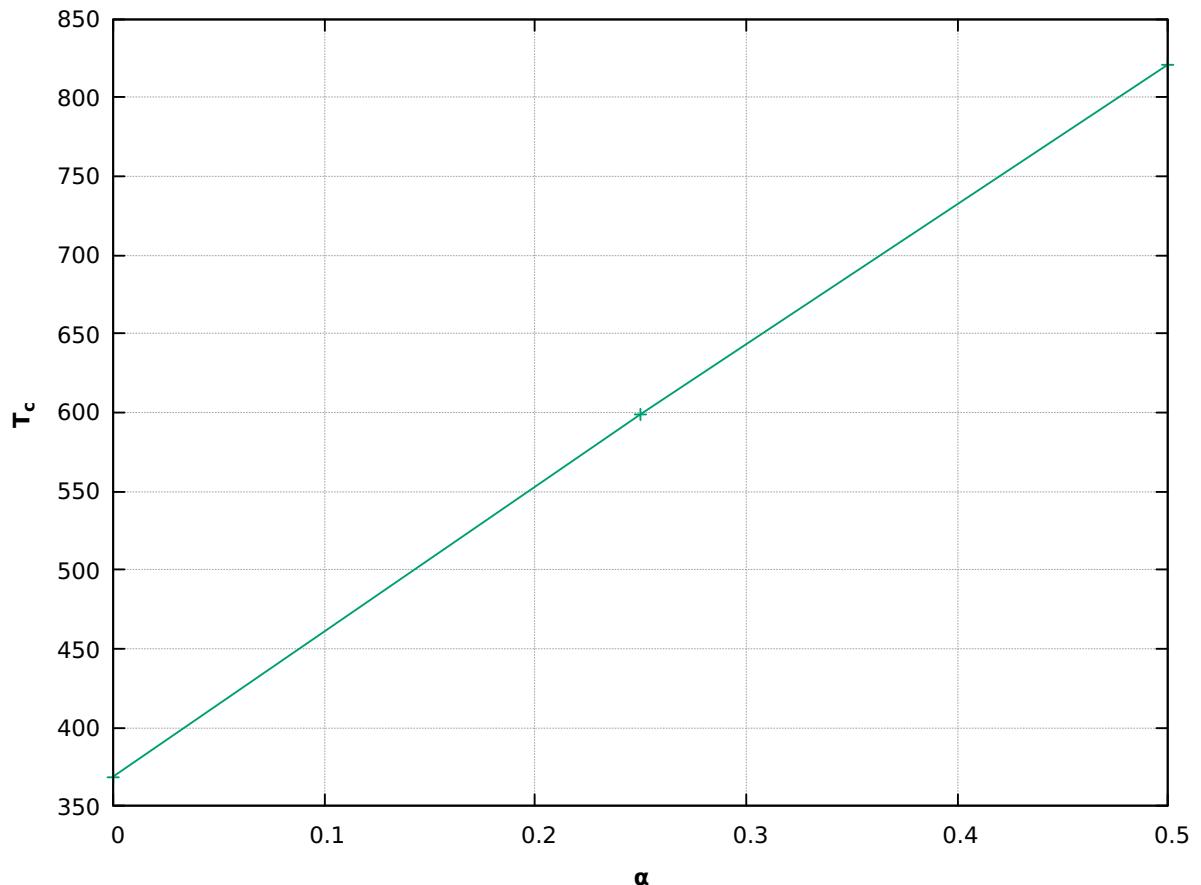


Figura 8.14: Temperatura crítica (em K) por α

Assim como realizado anteriormente para o regime usando apenas os primeiros vizinhos, também é possível demonstrar o efeito nas configurações de *spin* da inclusão da interação entre *spins* segundos vizinhos. Como exemplo visual, pode-se utilizar o caso com $J_2 = J_1/2$ usando as temperaturas de 10K, 340K, 500K e 900K (as temperaturas utilizadas foram diferentes das anteriores para pegar a configuração após a transição de fase que foi deslocada para temperaturas mais altas). Isso está demonstrado em [8.15].

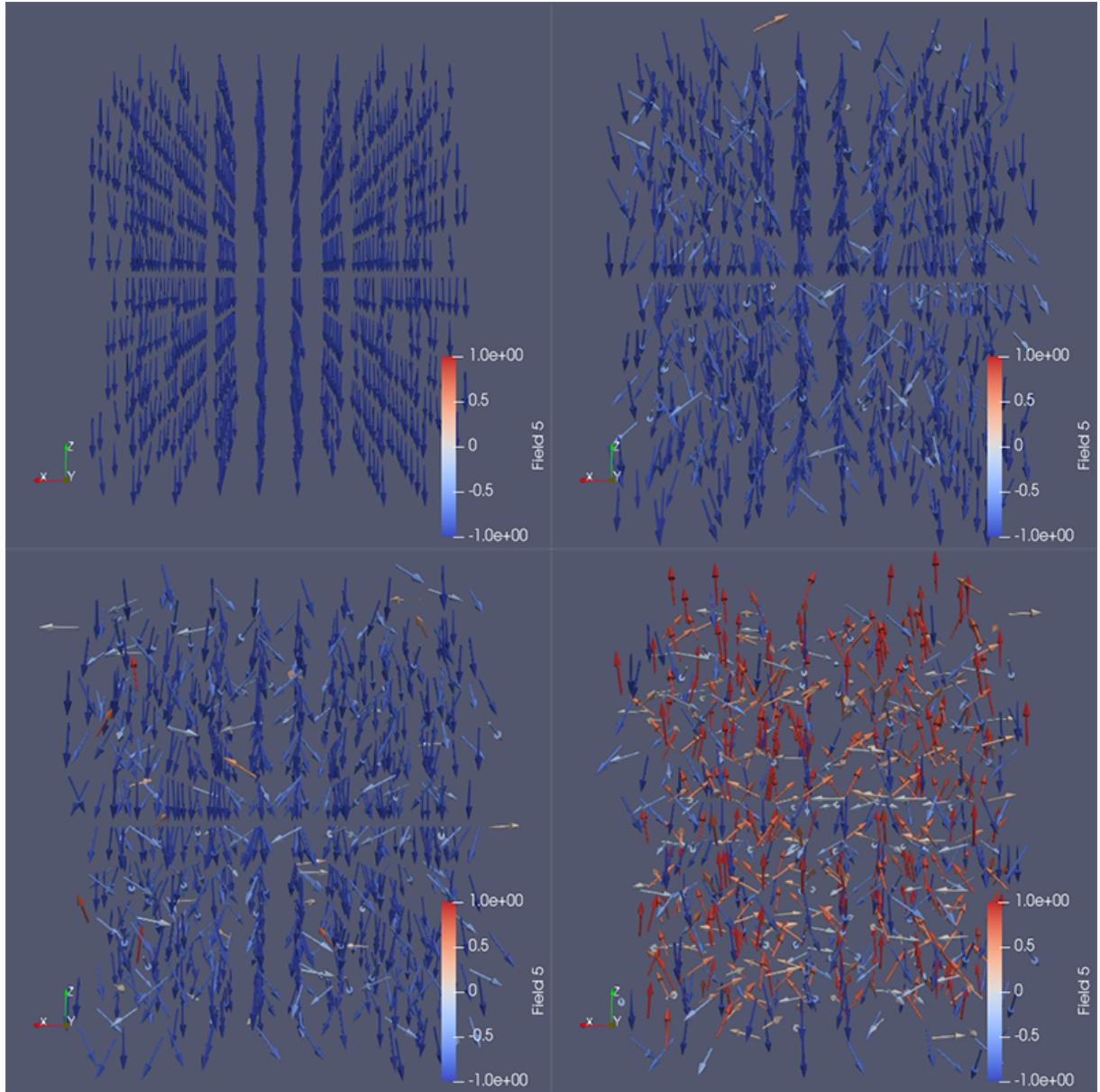


Figura 8.15: Configurações de *spin* com segundos vizinhos ($J_2 > 0$) para as temperaturas de 10K, 340K, 500K e 900K

8.2.2 $J_2 < 0$

Nesse regime o que acontece é uma disputa entre os vizinhos do sistema, onde os primeiros vizinhos querem alinhar o *spin* paralelo a eles e os segundos vizinhos querem alinhar o *spin* antiparalelo a eles. Isso faz com que o sistema seja menos ferromagnético naturalmente e portanto, esteja menos alinhado no geral. Isso evidentemente faz com que a temperatura de transição T_c seja diminuída e a energia fique mais positiva, como é possível notar em [8.16].

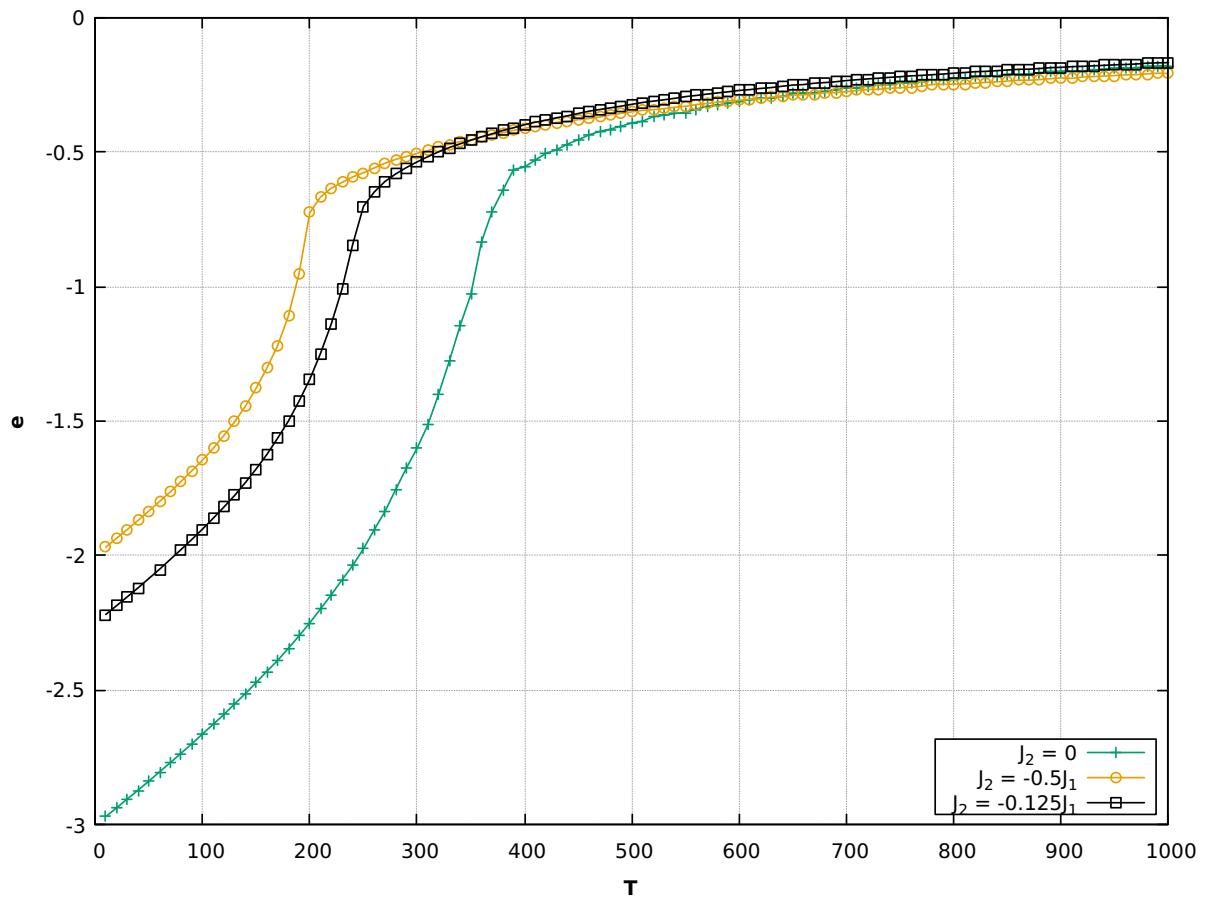


Figura 8.16: Energia média por *spin* (em unidades de J_1) pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 < 0$)

O efeito gerado no calor específico, analogamente ao visto com $J_2 > 0$ é simplesmente uma variação no valor e um deslocamento do seu pico, que nesse caso vai para temperaturas menores. Isso pode ser observado em [\[8.17\]](#).

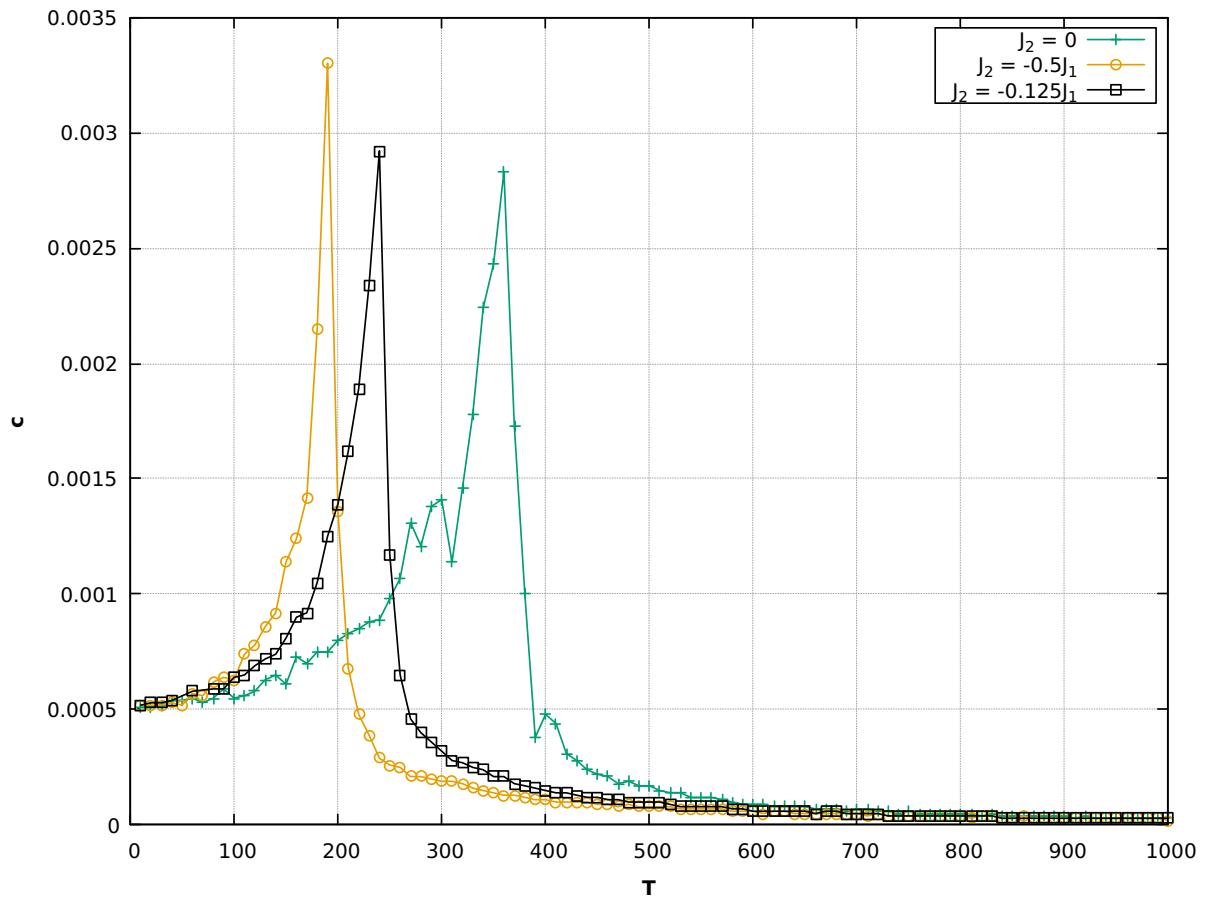


Figura 8.17: Calor específico (em eV/K) pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 < 0$)

No caso do módulo do vetor magnetização média é observado um comportamento interessante para o caso com $J_2 = -J_1/2$, já que, como visto anteriormente em [4], o número de segundos vizinhos na rede cúbica simples é 12 e o número de primeiros vizinhos é 6. Isso significa que se J_2 equivale a metade de J_1 o comportamento ferromagnético dos primeiros vizinhos é anulado devido ao comportamento antiferromagnético dos segundos vizinhos e consequentemente o sistema não é mais um ferromagneto, o que é notável devido a magnetização nula e a falta de transição de fase do sistema. O que acontece nesse regime é que o sistema tem a mesma quantidade de *spins* apontando em sentidos opostos, que faz com que a magnetização resultante seja nula. Entretanto, após uma dada temperatura, o sistema se desalinha e se torna um paramagneto, possuindo uma baixa magnetização (esse é o motivo da magnetização começar nula e depois aumentar um pouco). Para o outro caso de J_2 o efeito é simplesmente a transição em uma temperatura mais baixa do que antes devido ao menor alinhamento que o sistema possui (que surge em decorrência

da competição entre os primeiros e segundos vizinhos). Isso pode ser observado em [8.18].

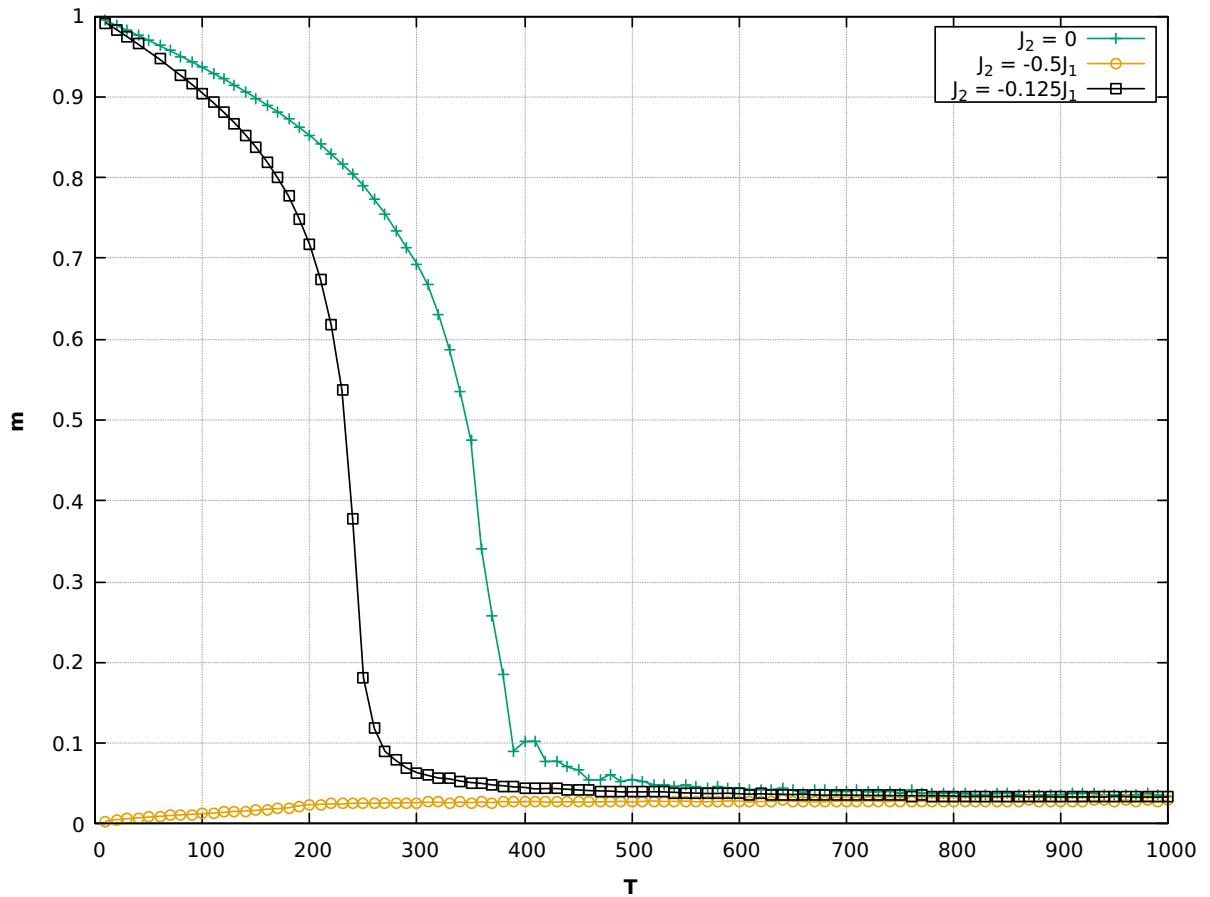


Figura 8.18: Módulo do vetor magnetização média pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 < 0$)

Devido ao comportamento não magnético do caso $J_2 = -J_1/2$ é de esperar que não exista um pico na susceptibilidade magnética, já que a transição de fase não acontece. Para o outro caso, o pico varia de valor e é deslocado para uma temperatura menor. Isso pode ser observado em [8.19].

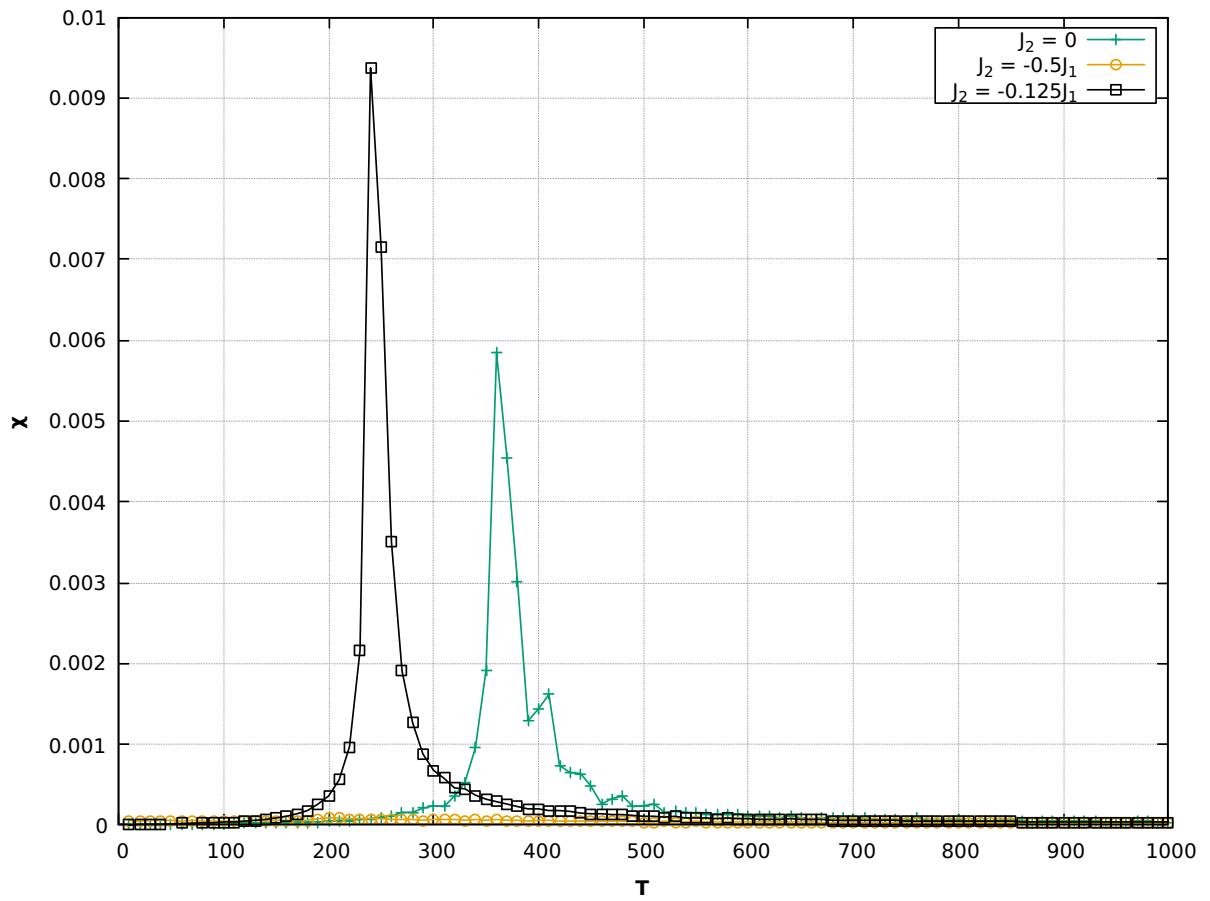


Figura 8.19: Susceptibilidade magnética pela temperatura (em K) com segundos vizinhos ($J_2 < 0$)

Para os regimes com $J_2 < 0$ é interessante visualizar as configurações de *spins* de ambos os casos, isto é, tanto com $J_2 = -J_1/2$ quanto com $J_2 = -J_1/8$, já que os comportamentos são distintos. Para os dois casos as temperaturas utilizadas foram de 10K, 190K, 340K e 500K (já que a transição do caso com $J_2 = -J_1/8$ ocorre bem cedo e para $J_2 = -J_1/2$ será possível ver o efeito da interação ferromagnética e antiferromagnética quando são iguais nas configurações de *spin*). Portanto, os resultados para $J_2 = -J_1/2$ e $J_2 = -J_1/8$ podem ser observados, respectivamente, em [8.20] e [8.21].

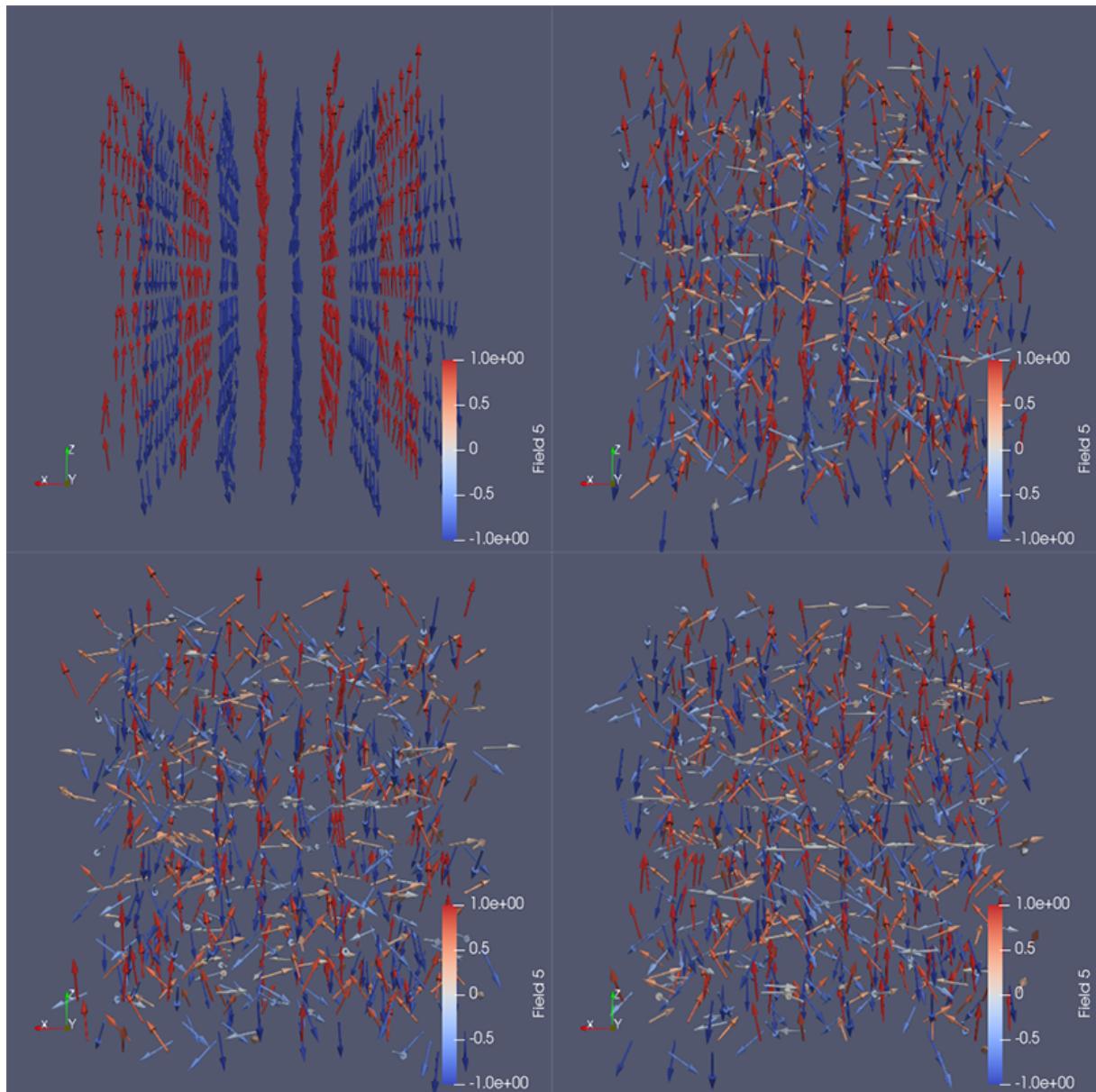


Figura 8.20: Configurações de *spin* com segundos vizinhos ($J_2 < 0$) para as temperaturas de 10K, 190K, 340K e 500K

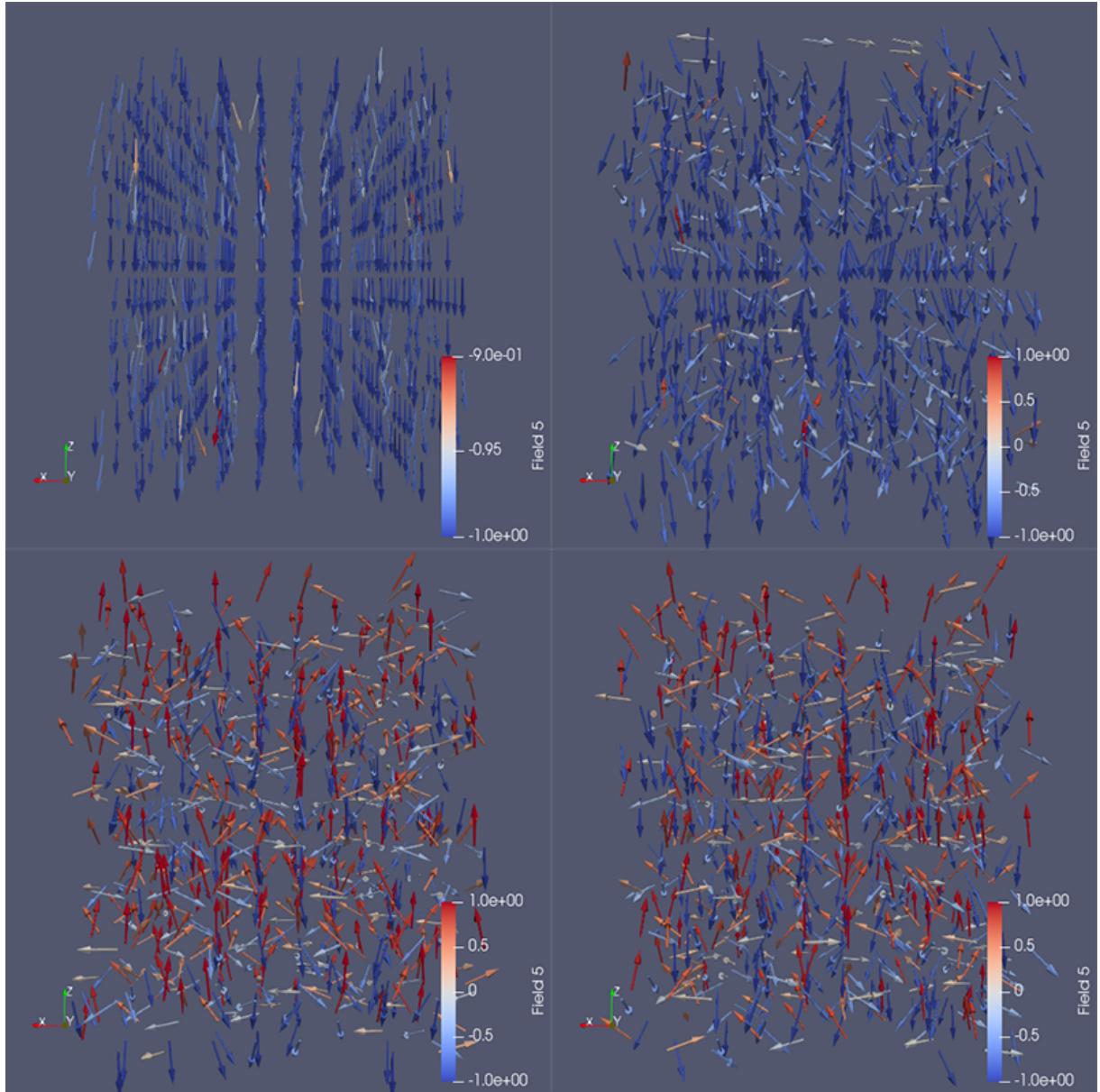


Figura 8.21: Configurações de *spin* com segundos vizinhos ($J_2 < 0$) para as temperaturas de 10K, 190K, 340K e 500K

8.3 Efeito da anisotropia magnetocristalina

Após entender o comportamento do sistema somente com o termo de troca, é interessante analisar o que acontece quando consideramos outro termo no processo (além do termo de troca), por exemplo, o termo da anisotropia magnetocristalina. Essa interação foi realizada considerando diferentes valores para a constante de anisotropia A e considerando a direção \hat{z} (sentido positivo) como a direção da anisotropia. Além disso, a rede foi

utilizada com tamanho de $L = 10$.

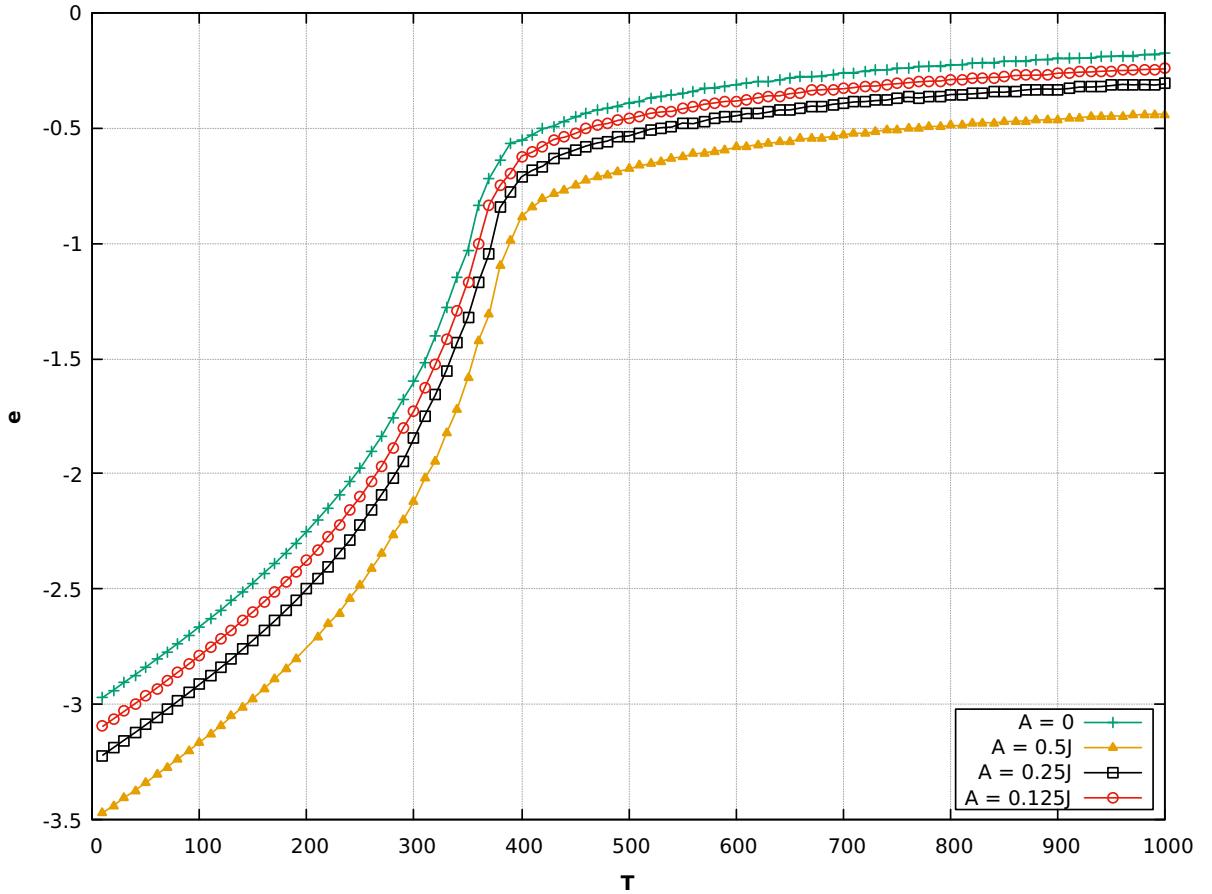


Figura 8.22: Energia média por *spin* (em unidades de J) pela temperatura (em K) com termo da anisotropia magnetocristalina

Como visto anteriormente em [5], o efeito de se considerar o termo da anisotropia magnetocristalina é os *spins* do sistema se orientarem na direção do *easyaxis*, isto é, existirá uma direção preferencial (não importando o sentido, devido ao termo quadrático na expressão da Hamiltoniana da interação) para os spins se alinharem. Além disso, sabe-se que o efeito da interação de troca é os *spins* se alinharem paralelamente uns aos outros em uma direção aleatória. Quando esses dois termos são considerados simultaneamente, o que ocorre é esse alinhamento devido a interação de troca acontecer na direção do *easyaxis*, e, como consequência, o sistema ficará mais alinhado (do que se estivesse somente com a interação de troca) e o alinhamento tem uma direção não mais aleatória (é realizado na direção da anisotropia). O resultado dessa interação é uma diminuição na energia do sistema conforme consideramos a constante de anisotropia A maior e um deslocamento da temperatura de transição T_c para uma temperatura maior, já que o sistema está mais

alinhado devido a anisotropia. Isso pode ser observado em [8.22].

O efeito dessa interação no calor específico do sistema, conforme pode ser visto em [8.23], é uma pequena variação no valor e um deslocamento do pico para uma temperatura maior.

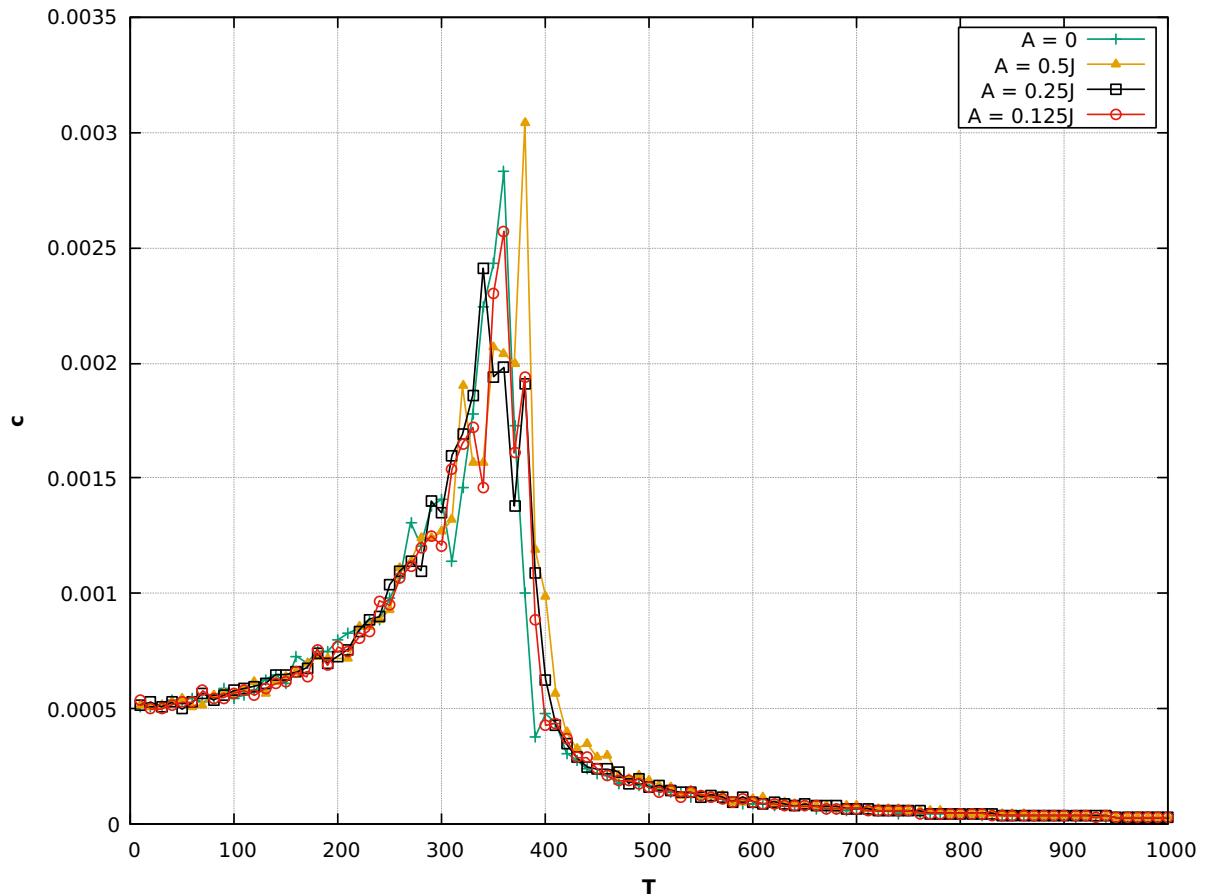


Figura 8.23: Calor específico (em eV/K) pela temperatura (em K) com termo da anisotropia magnetocrystalina

Devido ao efeito de se considerar a anisotropia, a tendência, como dito anteriormente, é que os *spins* se alinhem na direção da anisotropia e portanto é de se esperar que o módulo do vetor magnetização média também aumente, conforme pode ser visto em [8.24]. Isso significa que o sistema é mais ferromagnético conforme o termo de anisotropia aumenta e a temperatura de transição é deslocada para uma temperatura maior.

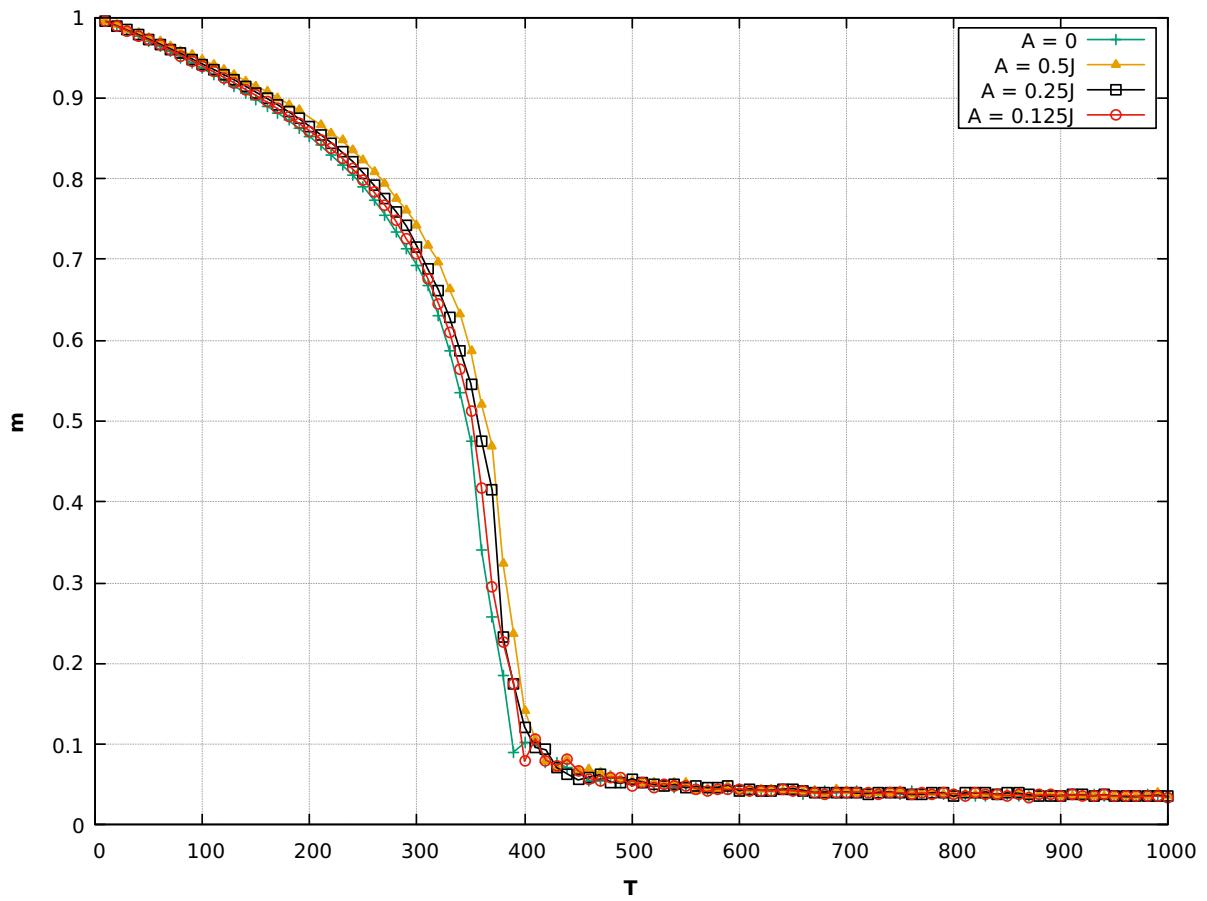


Figura 8.24: Módulo do vetor magnetização média pela temperatura (em K) com termo da anisotropia magnetocrystalina

Analogamente ao visto no calor específico, a mudança na susceptibilidade magnética devido a anisotropia é uma pequena variação no valor e um deslocamento do pico para uma temperatura maior, conforme pode ser visto em [8.25].

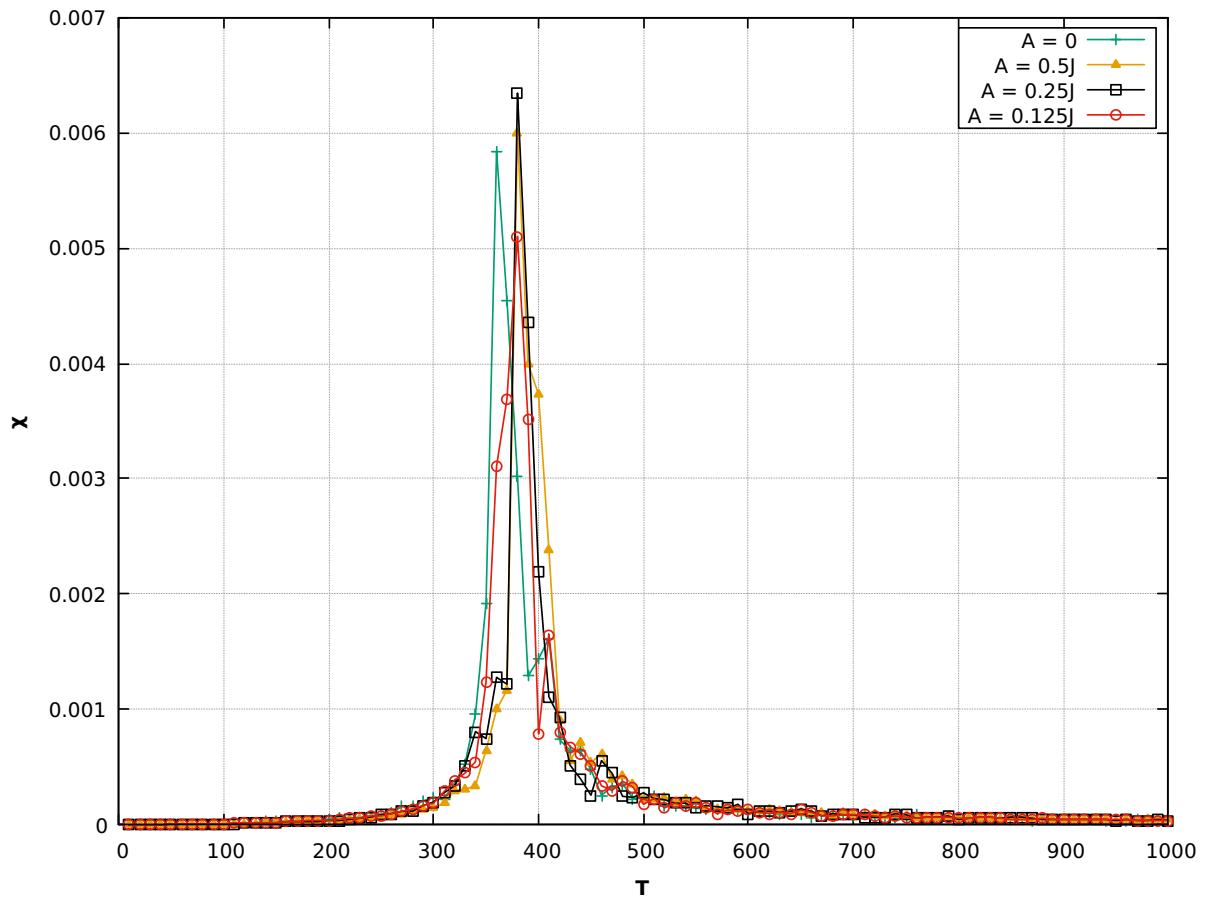


Figura 8.25: Susceptibilidade magnética pela temperatura (em K) com termo da anisotropia magnetocristalina

Por fim, como visto nos regimes anteriores, é interessante se visualizar o comportamento das configurações de *spin* no sistema quando consideramos, além do termo de troca, o termo da anisotropia magnetocristalina. Portanto, pegando o caso com $A = J/2$, pode-se exemplificar esse comportamento para diferentes temperaturas (10K, 190K, 340K e 500K). O resultado pode ser visto em [8.26].

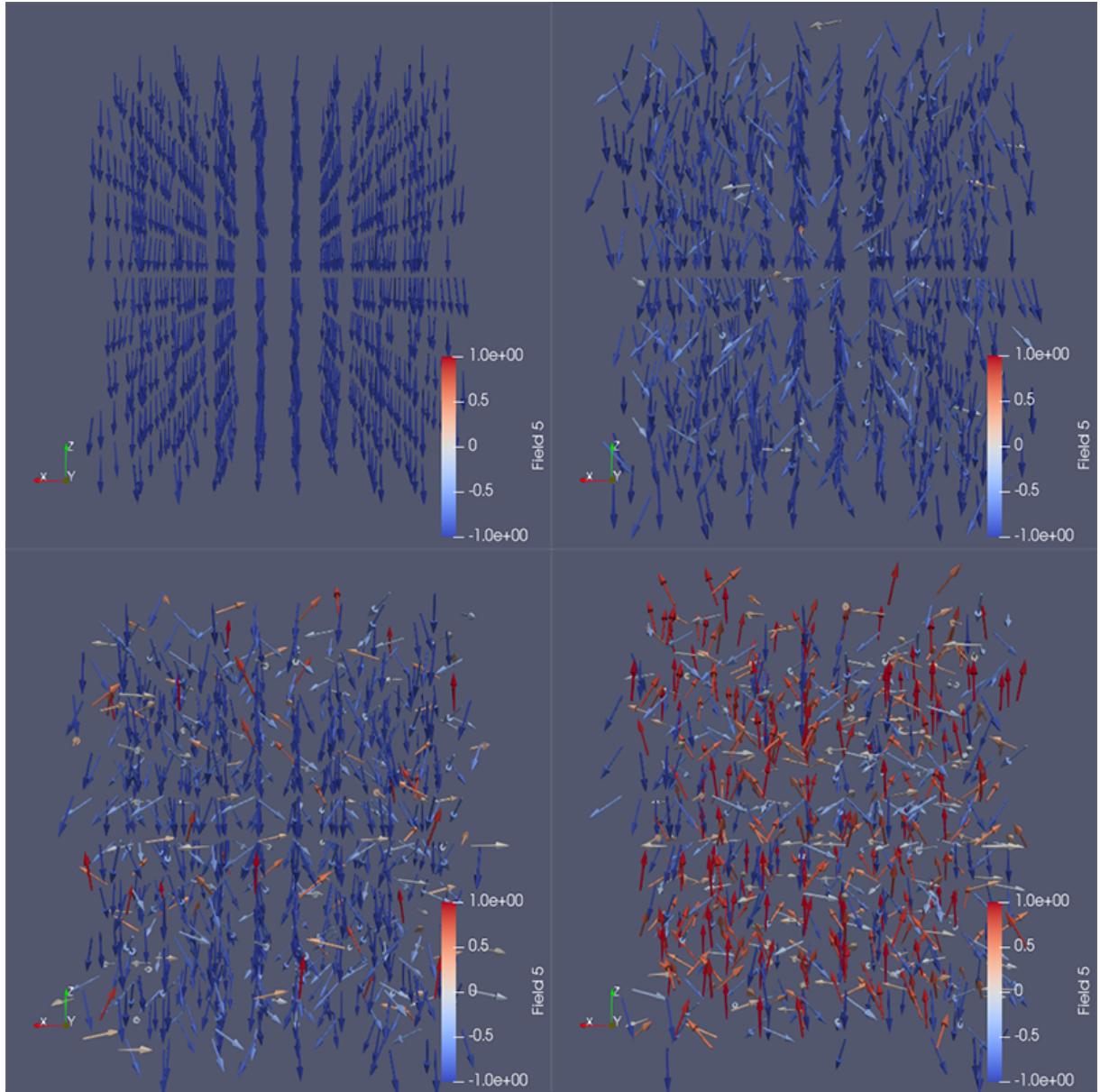


Figura 8.26: Configurações de *spin* com termo de anisotropia para as temperaturas de 10K, 190K, 340K e 500K

8.4 Efeito do campo externo

Outro termo que pode ser considerado, em conjunto com o termo de troca, é o termo do efeito Zeeman, o qual será discutido agora. Para avaliar esse regime foi utilizado diferentes valores para o módulo do campo externo \vec{H} , que é dado em Tesla, sendo a direção do campo aplicado a direção \hat{z} (sentido positivo). A rede foi utilizada com tamanho $L = 10$.

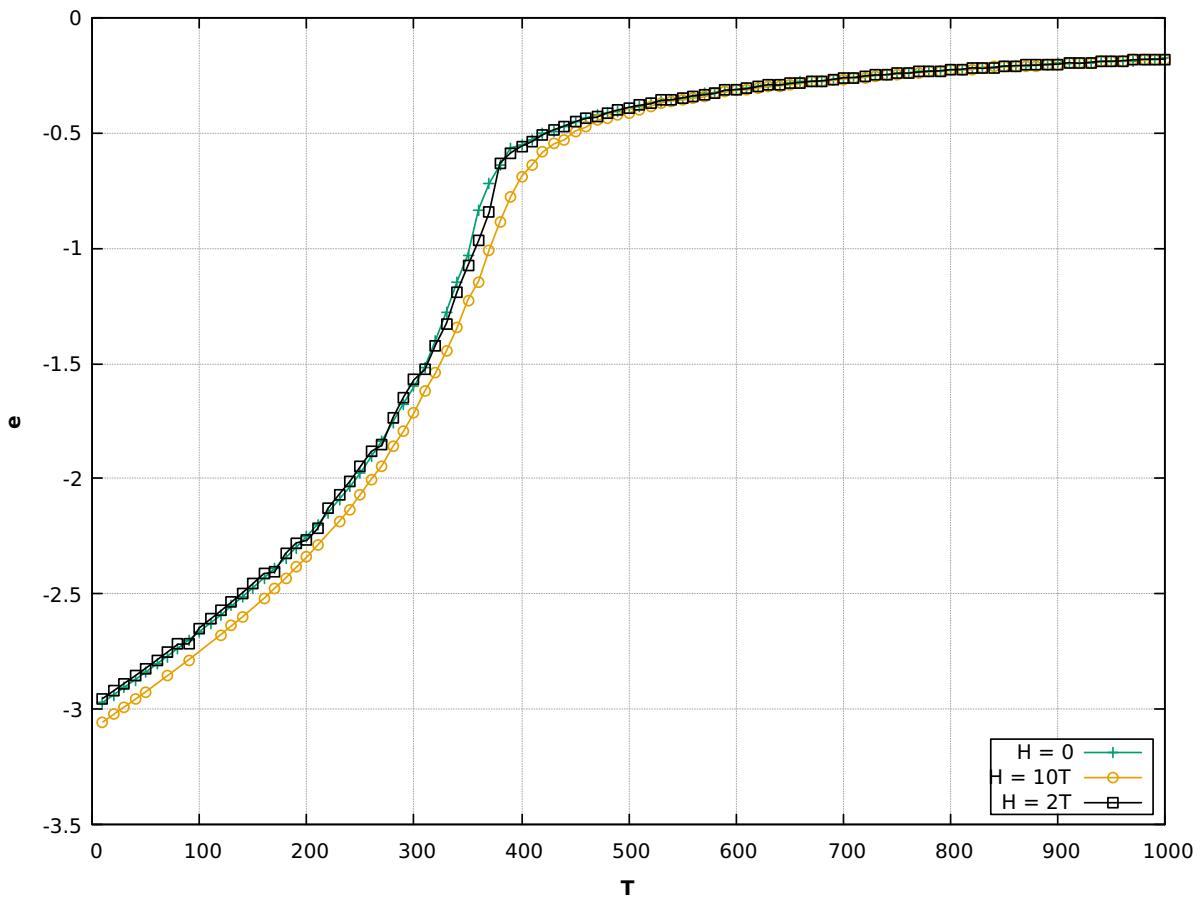


Figura 8.27: Energia média por *spin* (em unidades de J) pela temperatura (em K) com termo do efeito Zeeman

Como também foi visto anteriormente em [5], a consequência de se considerar o termo do efeito Zeeman é os *spins* do sistema se orientarem no sentido do campo externo aplicado, isto é, existirá um sentido preferencial de alinhamento, que nesse caso é o sentido do campo. Isso irá fazer com que o alinhamento causado pela interação de troca também não ocorra mais em uma direção aleatória mas sim no sentido do campo externo. Como consequência o sistema ficará mais alinhado e o resultado dessa interação é uma diminuição na energia do sistema (durante a fase ferromagnética) conforme o valor do módulo do campo externo \vec{H} é maior e um deslocamento da temperatura de transição T_c para uma temperatura maior, já que o sistema está mais alinhado devido ao efeito gerado pelo campo externo. Isso pode ser observado em [8.27].

A grande diferença entre o comportamento do sistema ao se considerar o efeito Zeeman e ao se considerar a anisotropia magnetocrystalina é na etapa em que o material é um paramagneto, isto é, após a transição de fase acontecer. Se notarmos a variação

da energia do sistema devido a anisotropia [8.22], a diminuição da energia acontece em todo o processo (fase ferromagnética + fase paramagnética) já que a diminuição surge devido a uma característica da estrutura cristalina do material. Entretanto, ao se analisar a variação da energia considerando o efeito Zeeman [8.27], a diminuição da energia é perceptível somente na fase ferromagnética, já que um paramagneto se magnetiza muito menos do que um ferromagneto na presença de um campo externo, conforme visto em [2].

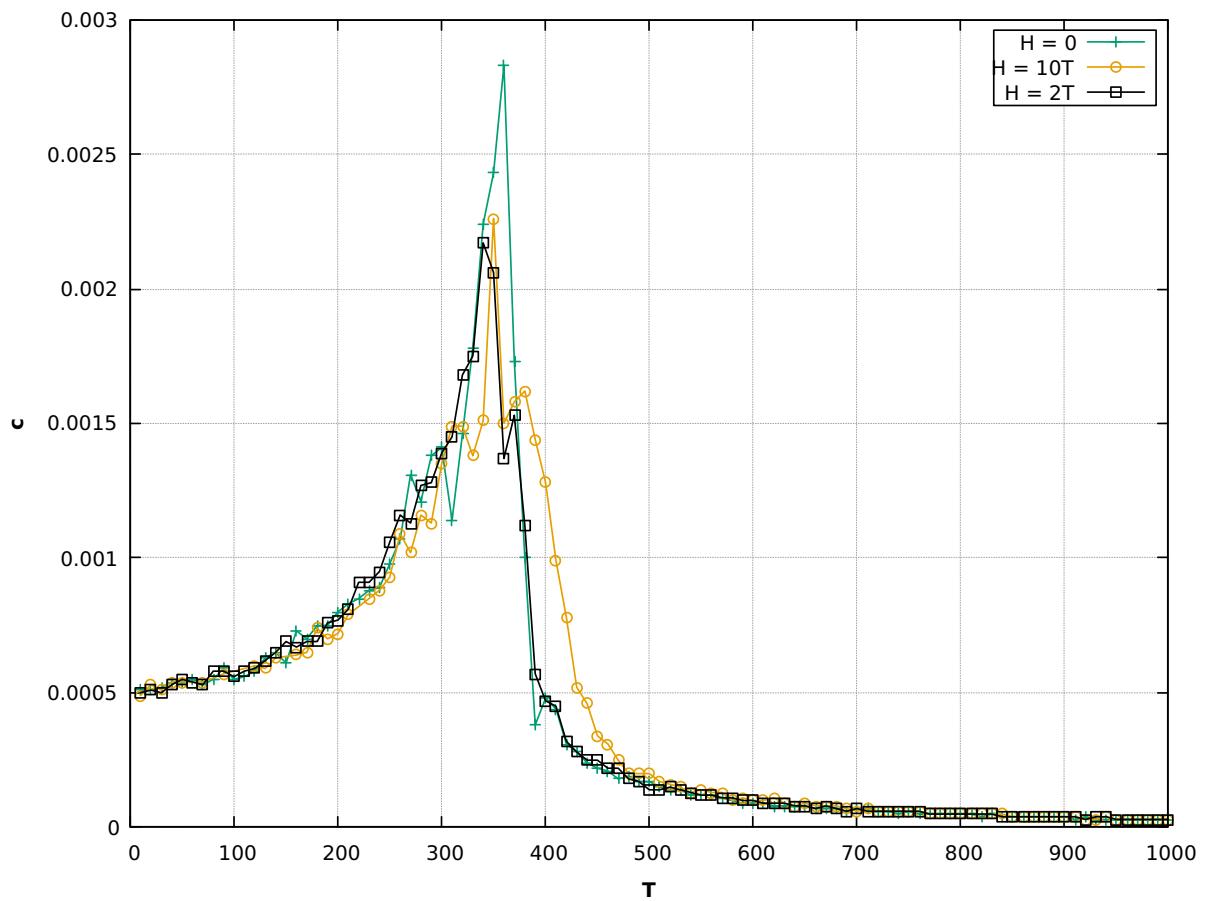


Figura 8.28: Calor específico (em eV/K) pela temperatura (em K) com termo do efeito Zeeman

A consequência de se considerar esse termo no calor específico do sistema, conforme pode ser visto em [8.28], é também uma pequena variação no valor e um deslocamento do pico para uma temperatura diferente.

Devido ao efeito ao se considerar esse termo, a tendência é que os *spins* se alinhem no sentido do campo externo e é de se esperar que o módulo do vetor magnetização média também aumente, conforme pode ser visto em [8.29]. Isso significa que o sistema é mais magnetizado conforme o valor do campo externo aumenta e a temperatura de transição é

deslocada para uma temperatura maior.

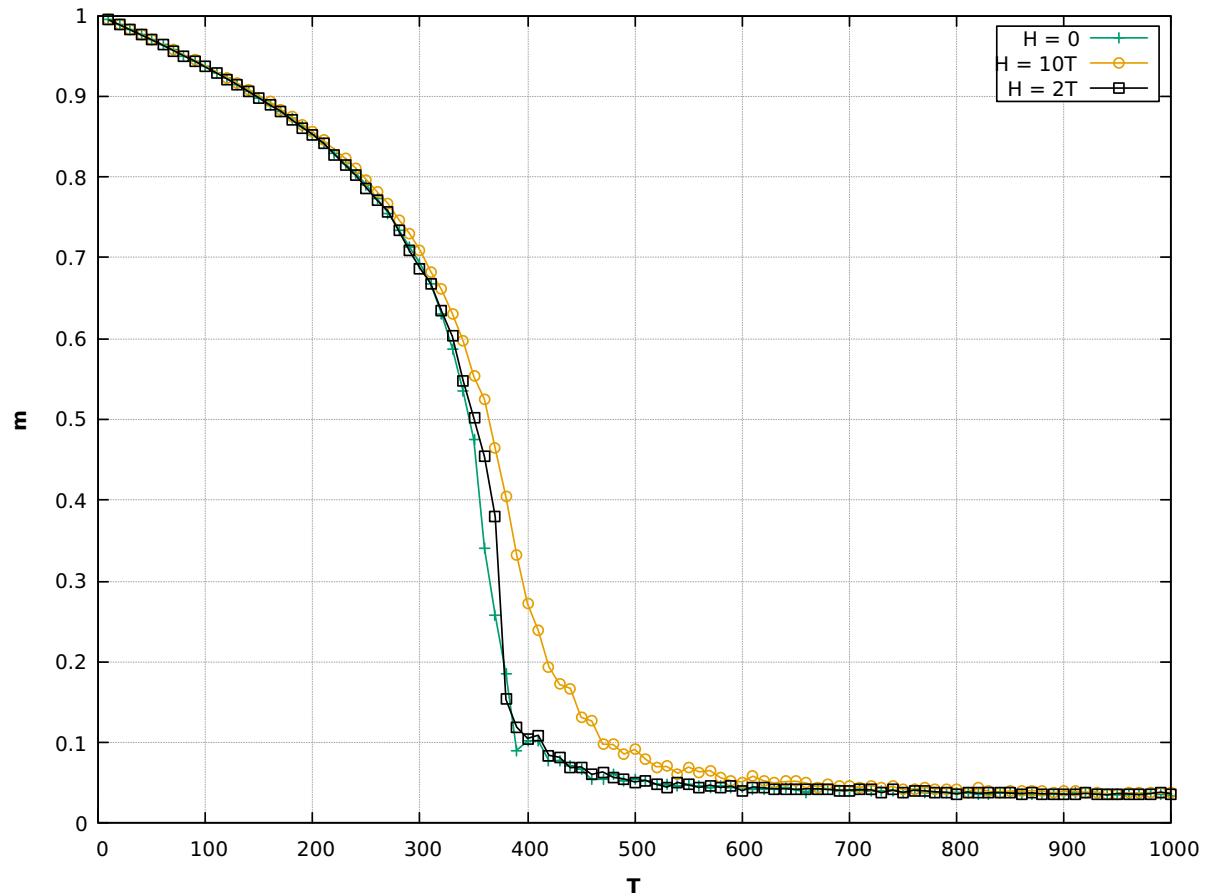


Figura 8.29: Módulo do vetor magnetização média pela temperatura (em K) com termo do efeito Zeeman

Analogamente ao visto no calor específico, a mudança na susceptibilidade magnética devido a esse termo é uma pequena variação no valor e um deslocamento do pico para uma temperatura maior, conforme pode ser visto em [8.30].

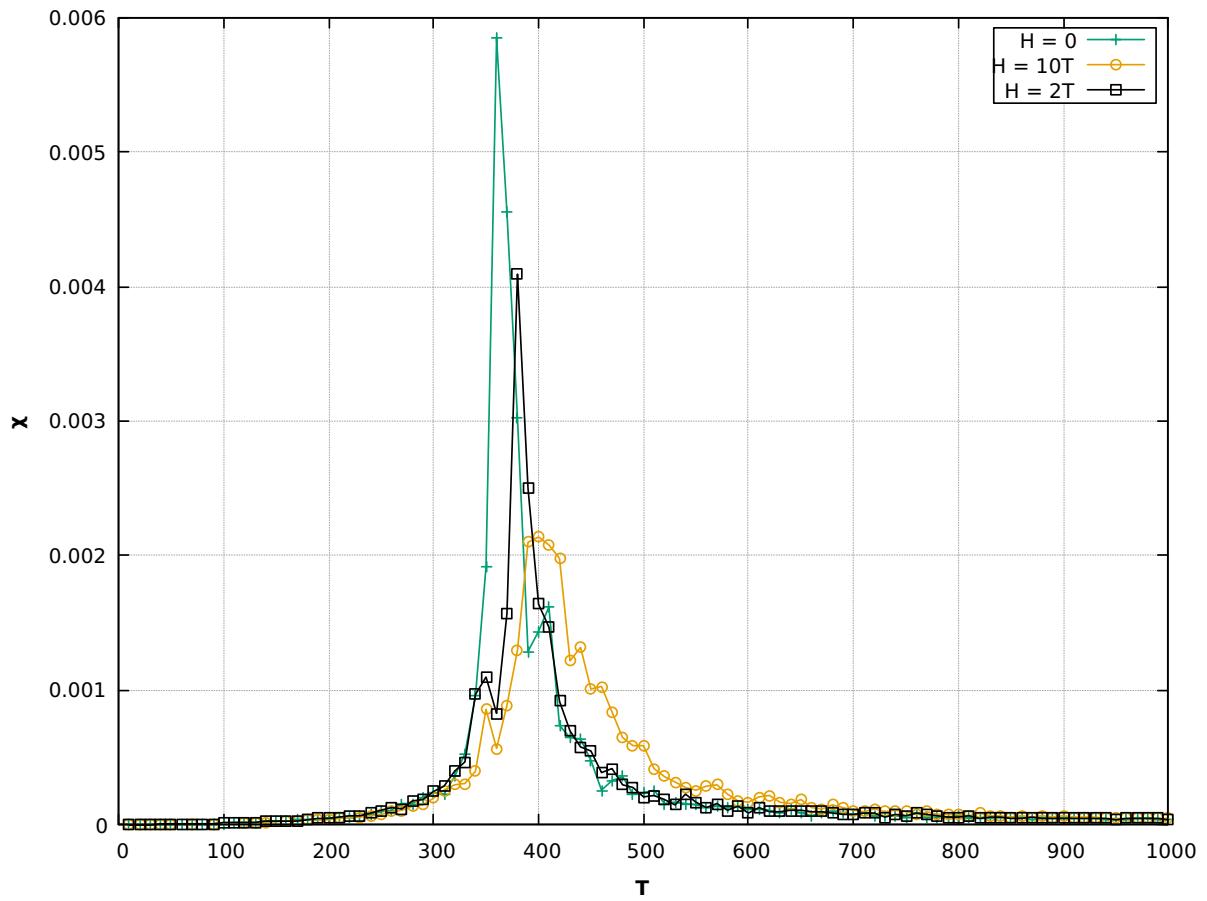


Figura 8.30: Susceptibilidade magnética pela temperatura (em K) com termo do efeito Zeeman

Também é possível visualizar o resultado de se considerar o termo do efeito Zeeman nas configurações de *spin* do sistema. Para isso, pode-se usar o caso com $H = 10\text{ T}$ como exemplo. O resultado pode se observado em [8.31].

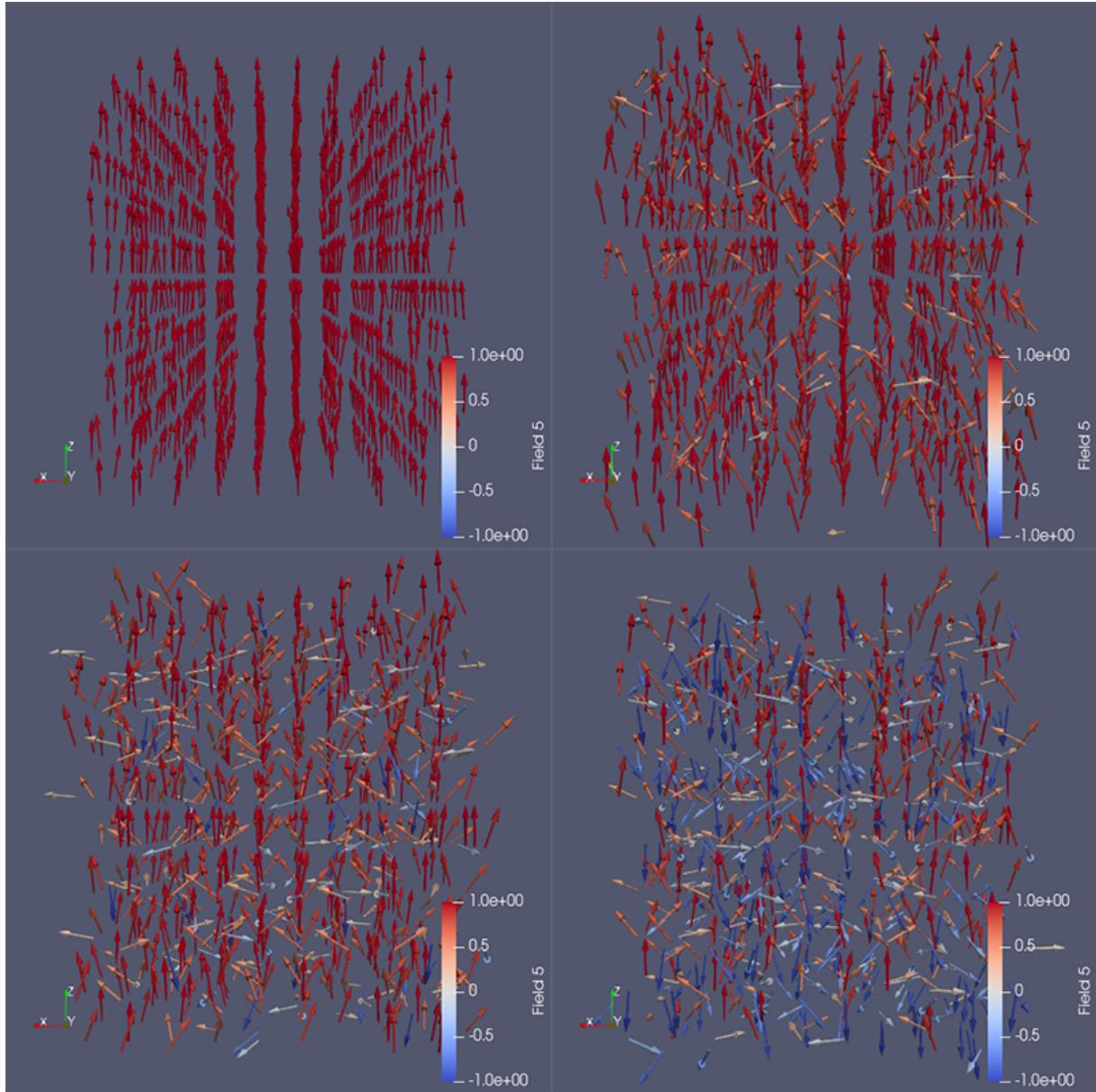


Figura 8.31: Configurações de *spin* com termo do efeito Zeeman para as temperaturas de 10K, 190K, 340K e 500K

8.5 Efeito da interação de Dzyaloshinskii-Moriya

Diferentemente das outras interações já discutidas anteriormente, a interação de Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) [37, 38] não favorece um alinhamento do sistema em uma certa direção. Por esse motivo, não é tão interessante analisar os efeitos dessa interação nas quantidades de interesse (energia, magnetização, calor específico e susceptibilidade magnética) mas sim nas configurações de *spin* (devido a formação dos skyrmions).

O objetivo ao se utilizar essa interação era de demonstrar a formação dos skyrmions magnéticos, que foram apresentados brevemente em [2], na rede quadrada. Portanto, para alcançar esse resultado utilizou-se a rede quadrada (2D), com tamanho de $L = 40$ (redes pequenas não formam os skyrmions pelo número de *spins* não serem suficientes). Em relação aos termos utilizados, foi considerado o termo da DMI e também o termo do efeito Zeeman, além do termo de troca. Para se descrever a direção do vetor da DMI foi usado como base o trabalho [8]. Além disso, os valores utilizados nesse regime foram de $J = 200\text{meV}$, $H = 0.5\text{T}$ e $D = 200\text{meV}$.

Portanto, o resultado desse regime nas configurações de *spin* do sistema pode ser observado em [8.32]. Como uma forma de comparação, as configurações de *spin* para uma rede de tamanho $L = 40$ (considerando o mesmo valor de J e somente com o termo de troca) também foram geradas¹ nas mesmas temperaturas e o resultado pode ser observado em [8.33].

¹Um fato interessante a ser notado é que o sistema é ferromagnético em todas temperaturas utilizadas devido ao alto valor da constante de troca. Isso faz com que a transição de fase deve ocorrer em temperaturas bem mais altas.

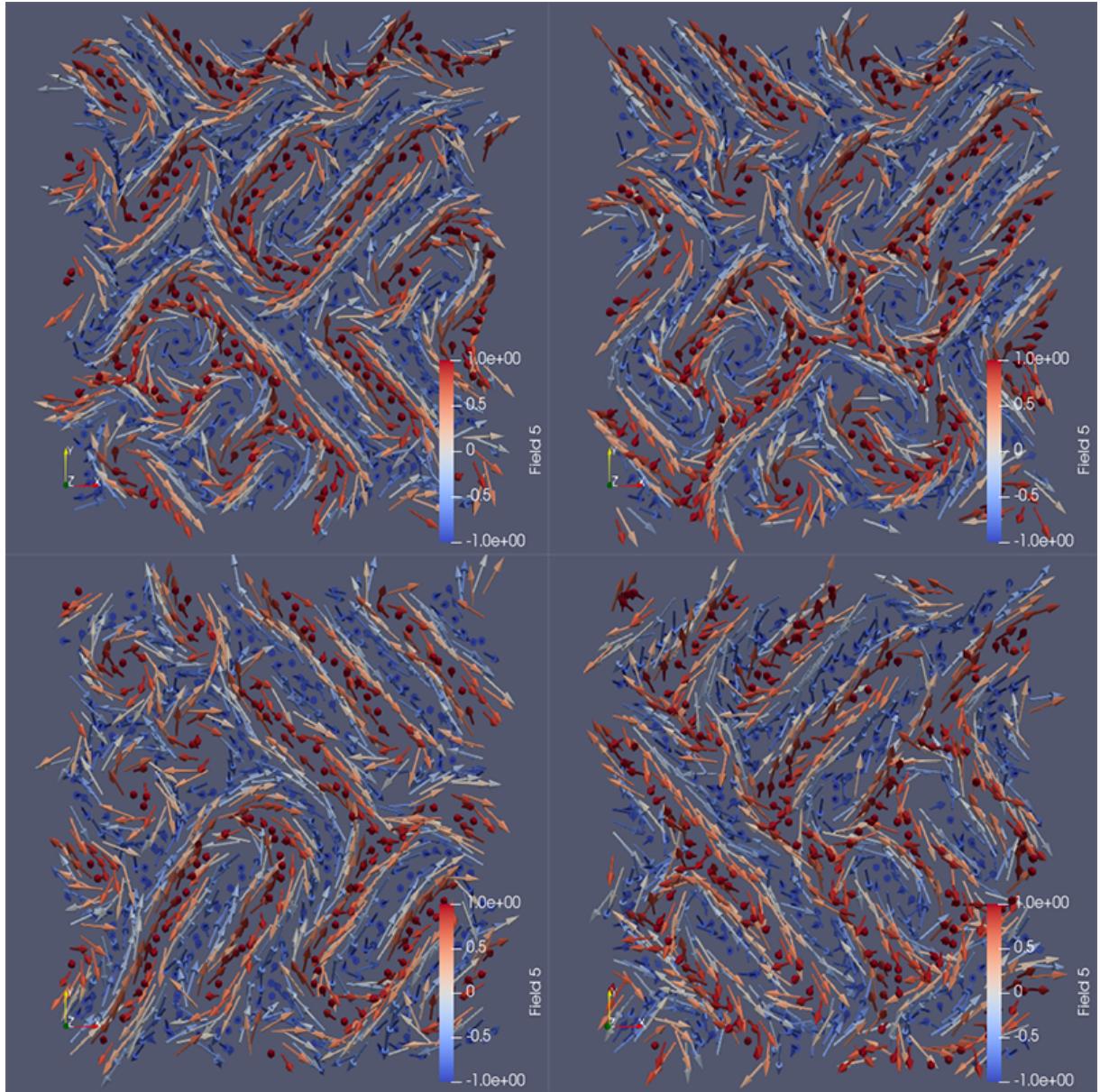


Figura 8.32: Configurações de *spin* com termo da DMI e efeito Zeeman em uma rede quadrada para as temperaturas de 10K, 60K, 190K e 340K

Aqui é possível se demonstrar a formação dos skyrmions magnéticos em uma rede quadrada. Pode-se notar que essas quasipartículas são formadas em maior quantidades para temperaturas bem baixas (o melhor resultado em 60K), apesar disso em todas temperaturas é possível notar a tendência das configurações de *spin* para a formação dos skyrmions.

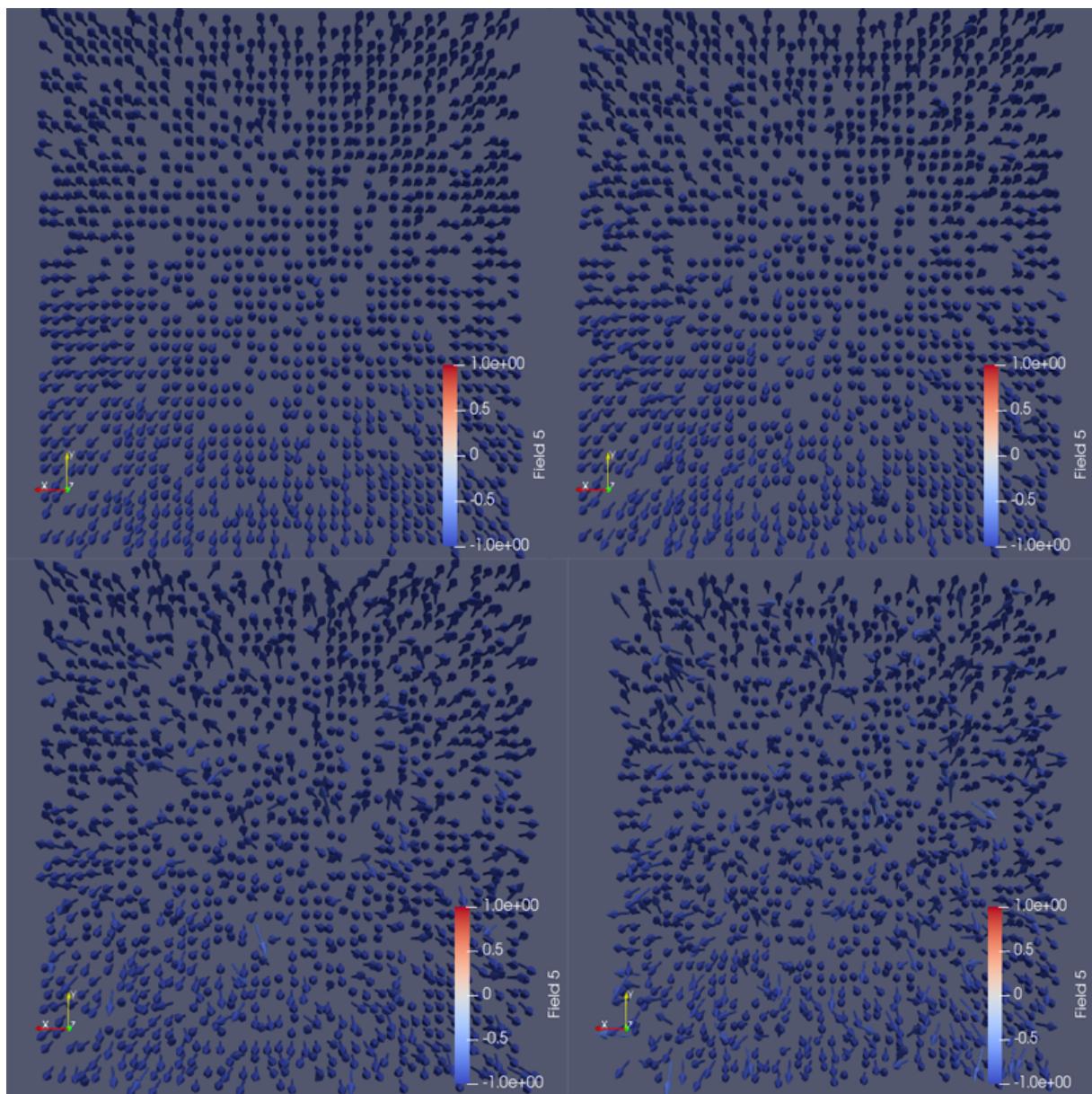


Figura 8.33: Configurações de *spin* em uma rede quadrada para as temperaturas de 10K, 60K, 190K e 340K

Capítulo 9

Conclusão

Neste trabalho foi realizado um estudo sobre as propriedades magnéticas e termodinâmicas de redes de *spins* cujas interações são dadas pela hamiltoniana de Heisenberg. O método de Monte Carlo e o algoritmo de Metropolis foram empregados para a obtenção das configurações de equilíbrio tanto na rede cúbica simples quanto na rede quadrada, onde os *spins* foram inicializados aleatoriamente. Através disso, pode-se estudar (*i*) a transição de fase que materiais ferromagnéticos sofrem (se tornando paramagnetos) conforme a temperatura externa é alterada; (*ii*) os efeitos da modificação de parâmetros internos como o alcance das interações (variando o número de vizinhos) na transição; (*iii*) os efeitos de se aplicar um campo magnético externo no material e de se considerar a anisotropia magnetocristalina devido a estrutura e forma do mesmo. Além disso, pode-se observar e entender as mudanças causadas nas configurações de *spin* do sistema e nas quantidades físicas de interesse (energia, magnetização, calor específico e susceptibilidade magnética) conforme esses regimes eram adotados. Por fim, foi possível demonstrar e confirmar a formação de skyrmions magnéticos em uma rede quadrada ao se considerar a interação de Dzyaloshinskii-Moriya em conjunto com a interação de troca e a interação do efeito Zeeman.

Referências Bibliográficas

- [1] K. H. Jürgen Buschow and Frank R. de Boer. Physics of magnetism and magnetic materials. 2003.
- [2] Stephen J Blundell. Magnetism in condensed matter. 2001.
- [3] Neil W. Ashcroft. *Solid State Physics*. Harcourt College Publishers, 1 edition, 1976.
- [4] Samuel D. Bader. Colloquium: Opportunities in nanomagnetism. *Reviews of Modern Physics*, 78:1–15, 2006.
- [5] Mandar V. Tabib, Ole Martin Løvvik, Kjetil Johannessen, Adil Rasheed, Espen Sagvolden, and Anne Marthine Rustad. Discovering thermoelectric materials using machine learning: Insights and challenges. In *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, volume 11139 LNCS, pages 392–401. Springer Verlag, 2018.
- [6] Yuma Iwasaki, Ichiro Takeuchi, Valentin Stanev, Aaron Gilad Kusne, Masahiko Ishida, Akihiro Kirihara, Kazuki Ihara, Ryohto Sawada, Koichi Terashima, Hiroko Someya, Ken ichi Uchida, Eiji Saitoh, and Shinichi Yorozu. Machine-learning guided discovery of a new thermoelectric material. *Scientific Reports*, 9(1), dec 2019.
- [7] Gorai Prashun, Stevanovic Vladan, and S. Toberer Eric. Computationally guided discovery of thermoelectric materials, aug 2017.
- [8] Vitalii Kapitan, Egor Vasiliev, and Alexander Perzhu. Computer simulation of magnetic skyrmions. *Multidisciplinary Digital Publishing Institute Proceedings*, 46(1):6, 2019.
- [9] H. A. Kramers and Gregory H. Wannier. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. part ii. *Physical Review*, 60:252–262, 1941.

- [10] Harvey Gould and Jan Toboschnik. An introduction to computer simulation methods. 1988.
- [11] Feliciano Giustino. Materials Modelling using Density Functional Theory. Properties and Predictions. page 303, 2014.
- [12] Gabriel R Schleider, Antonio C M Padilha, Carlos Mera Acosta, Marcio Costa, and Adalberto Fazzio. From DFT to machine learning: recent approaches to materials science—a review. *Journal of Physics: Materials*, 2(3):032001, may 2019.
- [13] Ralph Skomski. Simple models of magnetism. 2008.
- [14] Giovanni Finocchio, Felix Büttner, Riccardo Tomasello, Mario Carpentieri, and Mathias Kläui. Magnetic skyrmions: from fundamental to applications. *Journal of Physics D*, 49:423001, 2016.
- [15] Niklas Romming, Christian Hanneken, Matthias Menzel, Jessica E Bickel, Boris Wolter, Kirsten von Bergmann, André Kubetzka, and Roland Wiesendanger. Writing and deleting single magnetic skyrmions. *Science*, 341:636 – 639, 2013.
- [16] Albert Fert, Nicolas Reyren, and Vincent Cros. Magnetic skyrmions: advances in physics and potential applications. *Nature Reviews Materials*, 2:17031, 2017.
- [17] Louis Néel. Antiferromagnetism and ferrimagnetism. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 65(11):869, 1952.
- [18] I Ya Korenblit and EF Shender. Spin glasses and nonergodicity. *Soviet Physics Uspekhi*, 32(2):139, 1989.
- [19] Michel JP Gingras. Spin ice. *Introduction to frustrated magnetism*, pages 293–329, 2011.
- [20] David J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. Pearson, 4 edition, 2013.
- [21] Bram van Dijk. Skyrmions and the dzyaloshinskii-moriya interaction, 2014.
- [22] T. H. R. Skyrme. A unified field theory of mesons and baryons. *Nuclear Physics*, 31:556–569, 1962.

- [23] Daniel V. Schroeder. *An Introduction to Thermal Physics*. Addison Wesley Longman, 1 edition, 1999.
- [24] David P. Landau Kurt Binder. *A Guide to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 3 edition, 2009.
- [25] Harry Eugene Stanley. Introduction to phase transitions and critical phenomena. *American Journal of Physics*, 40:927–928, 1971.
- [26] David P. Landau. Phase transitions and critical phenomena. *Computing in Science & Engineering*, 1:10–11, 1999.
- [27] Julia M. Yeomans and Joseph Rudnick. Statistical mechanics of phase transitions. 1992.
- [28] Igor F. Herbut. A modern approach to critical phenomena. 2007.
- [29] AK Murtazaev, MK Ramazanov, DR Kurbanova, and MK Badiev. Phase transitions in the antiferromagnetic heisenberg model on a body-centered cubic lattice with allowance for the next-nearest-neighbor interactions. *Physics of the Solid State*, 60(6):1173–1176, 2018.
- [30] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson, 2 edition, 2005.
- [31] David Bauer. Atomistic spin-dynamics in confined magnetic nano-structures, 2008.
- [32] Tôru Moriya. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. *Physical Review*, 120:91–98, 1960.
- [33] I. E. Dzyaloshinskii. On the magneto-electrical effects in antiferromagnets. *Soviet physics, JETP*, 10:628–629, 1960.
- [34] Hisao Nakanishi Nicholas J. Giordano. *Computational Physics*. Pearson, 2 edition, 2006.
- [35] Tânia Tomé and Mário J. de Oliveira. Stochastic dynamics and irreversibility. 2014.
- [36] N. Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, A. H. Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *Journal of Chemical Physics*, 21:1087–1092, 1953.

- [37] Ramon Cardias, Attila Szilva, MM Bezerra-Neto, MS Ribeiro, Anders Bergman, Yaroslav O Kvashnin, Jonas Fransson, AB Klautau, Olle Eriksson, and Lars Nordström. First-principles dzyaloshinskii–moriya interaction in a non-collinear framework. *Scientific Reports*, 10(1):1–13, 2020.
- [38] Ramon Cardias, Anders Bergman, Attila Szilva, Yaroslav O Kvashnin, Jonas Fransson, Angela B Klautau, Olle Eriksson, and Lars Nordström. Dzyaloshinskii-moriya interaction in absence of spin-orbit coupling. *arXiv preprint arXiv:2003.04680*, 2020.