

Universidade Federal de Juiz de Fora
Pós-Graduação em Física
Mestrado em Física

ANANIAS ALVES BARBOSA

**Estudo do Comportamento da Magnetização de
Nanoilhas Magnéticas via Simulação
Computacional**

Juiz de Fora
Agosto de 2019

ANANIAS ALVES BARBOSA

Estudo do Comportamento da Magnetização de Nanoilhas Magnéticas via Simulação Computacional

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel

Co-orientador: Dr. Danilo Toscano

Juiz de Fora
Agosto de 2019

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE
TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO,
PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Agradecimentos

- Agradeço a Deus por ter me dado forças para persistir perante os grandes desafios.
- Agradeço a minha família por sempre estar ao meu lado me apoiando e motivando, por entender algumas das minhas ausências em encontros familiares e também nos momentos festivos. Em especial, sou muito grato a minha mãe Maria de Fátima (minha fonte de inspiração), por todas as palavras de apoio e incentivo quando foi necessário.
- Agradeço ao Professor Sidiney, pela proposta do trabalho, por sua orientação ao longo desses mais de dois anos. Agradeço também pelos conselhos e por toda a ajuda na execução do presente trabalho. Todas as suas dicas foram de extrema importância para finalizar este trabalho.
- Gostaria de agradecer ao Danilo Toscano por toda a ajuda ao longo do trabalho, pelas discussões a cerca do tema. Tudo isso foi muito importante e contribuiu bastante para a conclusão do presente trabalho.
- Agradeço aos meus amigos da pós graduação da UFJF e também os novos amigos que fiz em Juiz de Fora, por todo o apoio e pelos momentos de descontração que me proporcionaram. Sem dúvidas, isso foi muito importante nos momentos de Dificuldades.
- Agradeço aos meus amigos Tiago e Santunu da República “Tudo é tudo e nada é nada”, pelo incentivo que me deram durante todo o mestrado.
- Gostaria de agradecer a todos os meus amigos do IFNMG, em especial aos professores e também aos amigos que se formaram comigo.
- À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela concessão da bolsa de estudo.

- À Pós-graduação da UFJF e ao grupo de pesquisa pelo apoio financeiro, que tornou possível a minha participação em eventos.
- Agradeço ao secretário da pós-graduação Domingos pela sua competência e agilidade.
- Agradeço a todos os membros do grupo de Simulação Computacional da UFJF pelo apoio.
- A todos que porventura, eu tenha me esquecido de mencionar, mas que direta ou indiretamente contribuíram para a elaboração desta tese.

*“Que os nossos esforços desafiem as impossibilidades.
Lembrai-vos de que as grandes proezas da história
foram conquistas daquilo que parecia impossível. ”*

— CHARLES CHAPLIN

Resumo

É importante investigar as propriedades básicas de sistemas magnéticos, uma vez que estes possuem muitas aplicações em dispositivos de lógica, sensores, mídias de armazenamento de dados de alta densidade e dispositivos MRAM (Magnetic Random Access Memory). Esses fatores contribuíram para que nos últimos anos, muitos cientistas se dedicassem a estudar sistemas magnéticos nanoestruturados. Do ponto de vista científico e tecnológico, ter o controle estático e dinâmico de nanoestruturas é fundamental para possíveis aplicações tecnológicas. Neste contexto, no presente trabalho realizamos um estudo com nanopartículas planares, alongadas na forma elíptica, feitas de Permalloy-79, um material ferromagnético macio que possui baixa anisotropia magnetocristalina. Nestes materiais, a configuração magnética depende da geometria da amostra, devido ao fenômeno conhecido como anisotropia de forma. As nanoelipses estudadas neste trabalho, apresentam no estado fundamental monodomínios magnéticos, o que as tornam interessantes para serem utilizadas em sistemas conhecidos como gelo de spin. Este trabalho buscou estudar nanoelipses com duas razões de aspecto, ambas apresentando monodomínios magnéticos, as suas espessuras variaram de 5 a 20 nm. Inicialmente com as nanopartículas individuais em equilíbrio, foram determinados campos magnéticos externos que são suficientes para provocar uma inversão da magnetização de forma coerente. Em seguida, consideramos sistemas magnéticos contendo sete nanoelipses, cujo arranjo favorece que a regra do gelo de spin seja satisfeita. Portanto, foram analisadas as energias das configurações ao atingirem o estado menos energético. Verificamos que a configuração de gelo de spin é menos energética diante das outras quatro configurações. Na sequência, foi encontrada a distância de separação borda a borda entre as nanoelipses do sistema, em que os efeitos da interação dipolar não interferem no estado da magnetização inicial na nanoelipse. Após determinar essa distância de separação, foi aplicado o campo magnético externo correspondente a cada nanomagnet, e então, analisou-se o processo de inversão da magnetização. Todos os processos de inversão da magnetização acontecem com um alto índice de coerência.

Palavras-chave: Nanomagnetismo. Gelo de Spin. Nanoelipses Magnéticas. Monodomínios Magnéticos. Inversão da Magnetização.

Abstract

It is important to investigate the basic properties of magnetic systems since it has many applications in logic devices, sensors, media storage high-density data and magnetic random access memory (MRAM) devices. These factors have drawn attention to many scientists in recent years devoting themselves for studying nanostructured magnetic systems. From a scientific and technological point of view, having static and dynamic control of nanostructures is fundamental for possible technological applications. In this context, in the present work, we performed a study with elongated and planar nanoparticles made of Permalloy-79, a soft ferromagnetic material that has low magnetocrystalline anisotropy. In these materials, the magnetic configuration depends on the sample geometry, due to the phenomenon known as shape anisotropy. The nanoellipses studied in this work present magnetic monodomains in the ground state, which makes them interesting for use in systems known as spin ice. This work aimed to study nanoellipses with two aspect ratios, both presenting magnetic monodomains, their thickness ranged from 5 to 20 nm. Next, we consider magnetic systems containing seven nanoellipses, whose arrangement favors the spin ice rule to be satisfied. Therefore, the energies of the configurations were analyzed upon reaching the less energetic state. We found that the spin ice setting is less energetic than the other four settings. In the sequence, it was found that the separation distances from edge to edge between the system nanoellipses, in which the effects of the dipole interaction does not interfere in the initial state of the magnetization in the nanoellipse. After determining this separation distance, the external magnetic field corresponding to each nanomagnet was applied, and then the magnetization inversion process was analyzed. All Magnetization inversion processes happen with high coherence index.

Keywords: Nanomagnetism. Spin ice. Magnetic nanoellipses. Single-domain. Inversion of Magnetization.

Lista de Figuras

Figura 1.1 - Aplicações do magnetismo [1].	18
Figura 1.2 - Matriz composta por nanoelipses feitas do material Permalloy, a imagem foi feita através de microscopia eletrônica de varredura (MEV) [14].	20
Figura 1.3 - Configurações possíveis para estado remanescente da magnetização, dependendo da geometria e dimensão do nanomagnet.	21
Figura 1.4 - (a) Arranjo local de prótons no gelo de água, onde os grandes círculos representam íons de óxido e os círculos pequenos e pretos os prótons(íons de hidrogênio). (b) Esquema do gelo da água parecido com (a), onde a posição dos prótons é representada por vetores de deslocamento. As regras do gelo em (a) é mostrada através da configuração de dois vetores apontando para o íon O^{-2} do centro e dois vetores apontando em direção oposta [33].	22
Figura 1.5 - (a) Rede dos momentos magnéticos das nanoilhas no gelo de spin artificial feito por Wang, 2006. (b) Alinhamentos de dipolos energéticos com alinhamentos favoráveis (acima) e desfavoráveis (abaixo) entre pares de momentos magnéticos. (c) Dezesesseis configurações possíveis para cada encontro de quatro nanoilhas, em que estas se encontram separadas por topologias distintas, ordenadas de maneira crescente no que diz respeito a sua energia magnetostática. A porcentagem indica a quantidade esperada para cada arranjo de configuração em um arranjo totalmente aleatório. Fonte: Figura adaptada de Wang [29].	24

Figura 1.6 - (a) Rede tipo pirocloro em que cada célula tetraédrica obedece a regra do gelo.(b) O momento magnético compartilhado pelas células tetraédricas é invertido, um par de monopólos magnéticos são criados devido ao excesso de carga magnética em cada célula. As figuras (c) e (d) são análogos com (a) e (b), a diferença está na troca na representação em momentos pela representação por cargas magnéticas. (e) Representam um par de momentos magnéticos que se encontram separados na rede pela inversão consecutiva de momentos magnéticos adjacentes (corda de Dirac) onde se tem as linhas de campo magnético esboçado [40].	26
Figura 1.7 - Rede quadrada de gelo de spin bidimensional. (a) Não existe excitação topológica, a rede se encontra no estado fundamental, as regras do gelo são obedecidas. (b) Cria-se um par de monopólos magnéticos ao inverter a magnetização em uma das nanoilhas. (c) É possível manipular um monopólo individual fazendo a inversão da magnetização em mais uma ilha [41].	27
Figura 1.8 - Visão esquemática de uma nanoelipse monodomínio, em que um campo magnético externo \vec{H} é aplicado em um ângulo de θ em relação ao eixo fácil de magnetização [6].	28
Figura 1.9 - Estado magnético de equilíbrio de um sistema magnético em que se observa uma forte interação entre elipses [27]. Nota-se que a magnetização individual da nanoelipses podem não estar alinhados ao longo do eixo fácil.	29
Figura 1.10 - Sistema artificial de gelo de spin (spin-ice.)	31
Figura 3.1 - (a) ($\alpha = 0$) para o caso em que não se tem amortecimento, nessa situação não se tem dissipação de energia, o momento magnético precessa indefinidamente em torno do campo \vec{H}_{eff} . (b) ($\alpha > 0$) passa a existir um torque de amortecimento, que, nesse caso, alinha paralelamente o momento magnético com o campo efetivo local \vec{H}_{eff} . (c) ($\alpha > 0$) o momento magnético precessiona em torno no campo efetivo local, amortecendo, por que se tem uma dissipação de energia [56].	45

Figura 3.2 - Representação esquemática particionamento de um sistema magnético em célula, no qual, esta célula possui muitos momentos magnéticos. Fonte: Wysocki, 2017.	49
Figura 4.1 - Imagem ilustrativa das nanoelipses com espessuras que variam de 5 a 20 nm.	58
Figura 4.2 - Matriz contendo sete nanoelipses, em que as elipses possuem um espaçamento S borda a borda.	59
Figura 4.3 - Vista esquemática da direção do campo magnético aplicado.	60
Figura 4.4 - Energia Zeeman para única Nanoelipse.	61
Figura 4.5 - Valores mínimos do campo magnético externo, responsáveis por provocar a inversão da magnetização nas nanoelipses com razão de aspecto de $q = 1.4$ e 1.83	62
Figura 4.6 - Reversão da magnetização para uma única nanoelipse com dimensão de $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$ e espessura variando de 5 a 20 nm, após a aplicação do menor campo magnético externo possível.	63
Figura 4.7 - Reversão da magnetização para uma única nanoelipse com dimensão de $110 \times 60 \times e \text{ nm}^3$ e espessura variando de 5 a 20 nm, após a aplicação do menor campo magnético externo possível.	64
Figura 4.8 - Componentes da magnetização referentes ao eixo x, y e z.	66
Figura 4.9 - A evolução temporal da magnitude reduzida do vetor de magnetização durante uma inversão de magnetização. Um exemplo da medição do índice de coerência.	67

Figura 4.10 - Processos de inversão da magnetização dos momentos magnéticos da elipse. A Figura 4.10a representa um processo em que se tem uma inversão da magnetização de maneira coerente. A Figura 4.10b mostra um processo de inversão da magnetização de maneira não coerente, apresentando um estado de vórtice.	68
Figura 4.11 - Valores do índice de Coerência para nanoelipses com razão de aspecto de $q = 1,4$ e $q = 1,83$. Seus valores variam para cada espessura analisada.	69
Figura 4.12 - Matrizes composta por nanomagnetos com formato elíptico, a figura a apresenta a configuração de spin ice. A Figura b , apresenta uma configuração que não satisfaz a regra do gelo de spin.	70
Figura 4.13 - Matrizes composta por nanomagnetos com formato elíptico, as Figuras c e d apresentam configurações que não satisfazem a regra do gelo de spin.	71
Figura 4.14 - Matriz composta por nanomagnetos com formato elíptico, a Figura e apresenta uma configuração que não satisfaz a regra do gelo de spin.	72
Figura 4.15 - Gráficos de energia para as 5 configurações de razão de aspecto $q = 1,4$, para as espessuras de 5, 10, 15 e 20 nm. A distância S entre as nanoelipses é de 130 nm. Em média as configurações demoram cerca de 3 ns para atingir o equilíbrio.	73
Figura 4.16 - Gráficos de energia para as 5 configurações de razão de aspecto $q = 1,83$, para as espessuras de 5, 10, 15 e 20 nm. A distância S entre as nanoelipses é de 190 nm. Em média as configurações demoram cerca de 3 ns para atingir o equilíbrio.	74
Figura 4.17 - Distância de separação entre as nanoelipses da matriz, borda a borda.	75
Figura 4.18 - Energia total do sistema de nanoelipses aumentando o espaçamento S entre as nanoelipses com razão de aspecto $q = 1,4$	79
Figura 4.19 - Energia total do sistema de nanoelipses aumentando o espaçamento S entre as nanoelipses com razão de aspecto $q = 1,83$	80

Figura 4.20 - Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $70 \times 50 \times 5 \text{ nm}^3$. Foram utilizados as distância de separação S da Tabela 4.2.	83
Figura 4.21 - Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $70 \times 50 \times 10 \text{ nm}^3$. Foram utilizados as distância de separação S da Tabela 4.2.	84
Figura 4.22 - Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $70 \times 50 \times 15 \text{ nm}^3$. Foram utilizados as distância de separação S da Tabela 4.3.	85
Figura 4.23 - Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $70 \times 50 \times 20 \text{ nm}^3$. Foram utilizados as distância de separação S da Tabela 4.3.	86
Figura 4.24 - Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $110 \times 60 \times 5 \text{ nm}^3$. Foram utilizados as distância de separação S da Tabela 4.4.	87
Figura 4.25 - Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $110 \times 60 \times 10 \text{ nm}^3$. Foram utilizados as distância de separação S da Tabela 4.4.	88
Figura 4.26 - Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $110 \times 60 \times 15 \text{ nm}^3$. Foram utilizados as distância de separação S da Tabela 4.5.	89
Figura 4.27 - Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $110 \times 60 \times 20 \text{ nm}^3$. Foram utilizados as distância de separação S da Tabela 4.5.	90
Figura 4.28 - Comportamento do índice de coerência em função da distância S entre os nanomagnetos Quando o campo magnético externo é aplicado.	92
Figura 4.29 - Comportamento do índice de coerência em função da distância S entre os nanomagnetos quando o campo magnético externo é aplicado.	93

Lista de Tabelas

Tabela 3.1 - Valores das constantes fundamentais do material Permalloy-79 utilizado na fabricação das nanoilhas.	50
Tabela 4.1 - Campo Magnético Mínimo de Revers[Pleaseinsertintopreamble]o para uma única nanoelipse isolada. Os valores dos campos magnéticos externos H_{min}^{ext} são da ordem de mT	61
Tabela 4.2 - Distância referente ao espaçamento entre as elipses da matriz, essas distâncias são respectivamente para as configurações de $(70 \times 50 \times 5) nm^3$ e $(70 \times 50 \times 10) nm^3$. Essas distância são medidas em relação as extremidades das elipses, onde, elas vão de uma extremidade até a outra.	76
Tabela 4.3 - Distância referente ao espaçamento S entre as elipses da matriz, essas distâncias são respectivamente para as configurações de $(70 \times 50 \times 15) nm^3$ e $(70 \times 50 \times 20) nm^3$. Essas distância são medidas em relação as extremidades das elipses, onde, elas vão de uma extremidade até a outra.	76
Tabela 4.4 - Distância referente ao espaçamento S entre as elipses da matriz, essas distâncias são respectivamente para as configurações de $(110 \times 60 \times 5) nm^3$ e $(70 \times 50 \times 10) nm^3$. Essas distância são medidas em relação as extremidades das elipses, onde, elas vão de uma extremidade até a outra.	77
Tabela 4.5 - Distância referente ao espaçamento S entre as elipses da matriz, essas distâncias são respectivamente para as configurações de $(110 \times 60 \times 15) nm^3$ e $(70 \times 50 \times 20) nm^3$. Essas distância são medidas em relação as extremidades das elipses, onde, elas vão de uma extremidade até a outra.	77

Sumário

1	INTRODUÇÃO E MOTIVAÇÃO	17
1.1	NANOMAGNETISMO	19
1.2	GELOS DE SPIN	22
1.3	GELOS DE SPIN ARTIFICIAIS	23
1.4	MONOPÓLOS MAGNÉTICOS PRESENTES EM GELO DE SPIN	25
1.5	PROPOSTA DO TRABALHO	27
2	CONCEITOS FUNDAMENTAIS EM NANOMAGNETISMO	32
2.1	MOMENTO MAGNÉTICO E MAGNETIZAÇÃO	33
2.2	INTERAÇÃO DE TROCA	34
2.3	INTERAÇÃO DIPOLAR	38
2.4	INTERAÇÃO ZEEMAN	40
3	SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA	42
3.1	O HAMILTONIANO DO MODELO	42
3.2	DINÂMICA DE MAGNETIZAÇÃO	43
3.3	APROXIMAÇÃO MICROMAGNÉTICA	48
3.3.1	INTERAÇÃO ENTRE AS CÉLULAS	51

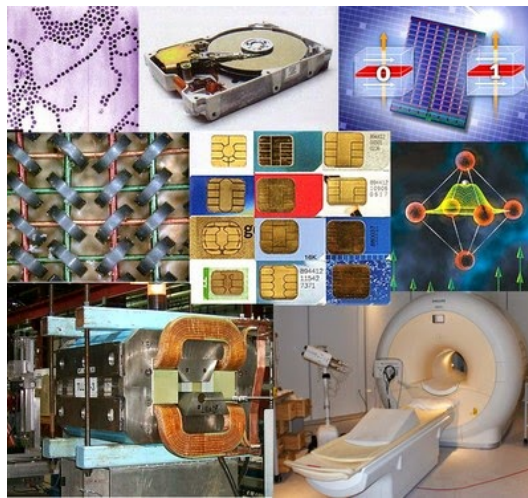
4 RESULTADOS	57
4.1 ESTUDO DE UMA NANOELIPSE ISOLADA	61
4.2 ANÁLISE DAS CONFIGURAÇÕES DE GELO DE SPIN	69
4.3 ESTUDO DA REVERSÃO DA MAGNETIZAÇÃO NUM SISTEMA DE NA- NOELIPSES FRACAMENTE ACOPLADAS	81
4.4 CONCLUSÕES	94
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	97

1 INTRODUÇÃO E MOTIVAÇÃO

Em nosso cotidiano, estamos acostumados a observar diversos fenômenos magnéticos que determinados objetos apresentam quando estão sujeitos a algum campo magnético externo. Isso acontece nos mais distintos cenários, como por exemplo, a resposta que um objeto magnético apresenta quando é exposto a um ímã, ou então, o comportamento que a agulha de uma bússola exibe devido a interações com o campo magnético terrestre.

Os primeiros registros a respeito de fenômenos relacionados a efeitos magnéticos foram registrados na Grécia antiga e datam do século VI a.C., em uma região chamada de Magnésia. Esses fenômenos foram observados em algumas rochas, chamadas de Magnetitas, que apresentavam uma característica notável, a de atração ou repulsão de determinados tipos de objetos. Desde então, sua importância cresceu significativamente, se tornando indispensável para o desenvolvimento tecnológico da humanidade, passando a ser utilizado por exemplo, em disco rígidos de computadores, na medicina, em equipamentos de ressonância magnética para fins de diagnóstico médico, na indústria eletrônica em microchips magnéticos e etc, como pode ser observado na Figura 1.1.

Figura 1.1 – Aplicações do magnetismo [1].



A Spintrônica é uma área da Física com um enorme potencial para aplicações tecnológicas, em que ocorre a junção dos princípios fundamentais do magnetismo com a eletrônica. Uma dessas aplicações, que nos últimos anos vem despertando o interesse de muitos pesquisadores, são os dispositivos de armazenamento de dados, como por exemplo, unidades de “*hard disk*” (HD) e “*magnetic random access memories*”(MRAMs) [2]. Muitos desses dispositivos são construídos utilizando matrizes compostas de nanopartículas monodomínio, em que a interação entre elas é desconsiderada para uma determinada distância de separação, pois, nesta distância a interação entre as nanopartículas da matriz é muito fraca, lhe assegurando o estado de monodomínio [3, 4].

A necessidade de desenvolver tais dispositivos de gravação magnética com uma velocidade de processamento maior, vem estimulando a pesquisa e o desenvolvimento de materiais magnéticos nanoestruturados, que são conhecidos como nanomagnetos. Neste contexto, o estudo da inversão da magnetização em filmes finos tem sido altamente investigado por pesquisadores que buscam entender melhor esses sistemas magnéticos, para que possam ser utilizados em dispositivos de memórias magnéticas de acesso aleatório (MRAMs) e de alta densidade de armazenamento de dados rápido [5–7].

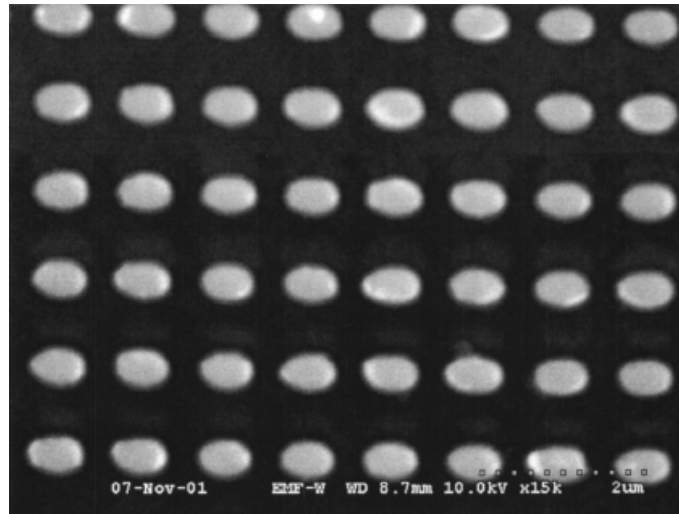
1.1 NANOMAGNETISMO

Como mencionado anteriormente, as pesquisas em magnetismo na escala nanométrica (1×10^{-9} m) tem aumentado bastante nos últimos anos. A grande procura por dispositivos cada vez mais rápidos e com grande capacidade de armazenamento, vem estimulando o desenvolvimento de estruturas magnéticas nanoestruturadas conhecidas como nanomagnetos [5, 7, 8]. Neste cenário, o nanomagnetismo é uma área de pesquisa da Física que desenvolve estudos sobre as propriedades magnéticas de objetos na escala nanométrica, e também busca a aplicação do magnetismo em nanopartículas isoladas, filmes finos, entre outras coisas.

Nos últimos anos, o nanomagnetismo tem despontado na ciência como uma das áreas mais inovadoras e que certamente possui um potencial muito grande para possibilitar avanços tecnológicos significativos para a humanidade. Suas aplicações vão desde técnicas relacionadas a medicina, como por exemplo transportar determinados tipos de drogas diretamente para órgãos ou tecidos específicos [9, 10], até a utilização em gravação magnética, ferrofluidos dentre outras aplicações [11].

Devido aos constantes avanços tecnológicos dos últimos anos, a exigência de técnicas de manipulação de nanomagnetos e métodos de fabricação de sistemas magnéticos para dimensões ainda mais reduzidas tem crescido bastante. Certamente, o domínio que se tem até o momento das técnicas em escala nanométrica de fabricação e manipulação dessas amostras, vem estimulando pesquisadores a estar desenvolvendo muitas pesquisas em nanomagnetismo, principalmente, com os materiais ferromagnéticos. Com isso, o avanço de técnicas de nanofabricação vem abrindo novas possibilidades para a manipulação de nanoestruturas magnéticas, como pode ser observado na Figura 1.2, abrindo assim, novas possibilidades para o desenvolvimento de novos dispositivos magnéticos [12, 13].

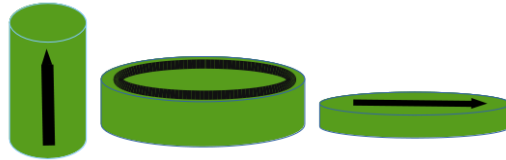
Figura 1.2 – Matriz composta por nanoelipses feitas do material Permalloy, a imagem foi feita através de microscopia eletrônica de varredura (MEV) [14].



Diante desses fatos, os materiais ferromagnéticos vem se destacando no estudo da reversão da magnetização de nanoelipses, estes materiais possuem estruturas magnéticas, em que a magnetização local se minimiza formando numerosos domínios magnéticos a fim de minimizar a energia magnetostática do sistema. Esses domínios magnéticos aparecem devido a competição da interação quântica de troca entre cada momento magnético que se encontra próximo, com a interação clássica entre cada dipolo com o campo magnético produzido pelos outros momentos magnéticos da rede [15].

Materiais ferromagnéticos possuem um comportamento peculiar em dimensões nanométricas. Suas configurações em domínios magnéticos podem não corresponder ao estado menos energético pois a geometria do objeto passa a influenciar nos arranjos dos momentos magnéticos no estado de mais baixa energia, assim, torna-se possível obter partículas monodomínio como nanoelipses e também vórtices [16–21] e skyrmions [22–25] como é mostrado na Figura 1.3.

Figura 1.3 – Configurações possíveis para estado remanescente da magnetização, dependendo da geometria e dimensão do nanomagnet.



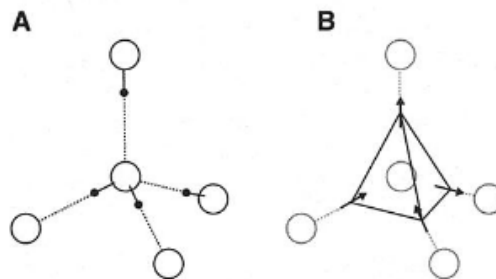
Dizemos que determinado material é anisotrópico quando uma certa propriedade física tende a variar com a direção. Em escala nanométrica os nanomagnetos tem a sua magnetização no estado fundamental estabelecida por sua forma geométrica e pelo seu tamanho, isso acontece devido a forte anisotropia de forma. Isso mostra que é muito importante obter resultados que contribuem para que se tenha um controle do comportamento magnético estático e dinâmico dessas estruturas, pois elas são fundamentais para aplicação em novos dispositivos tecnológicos. Com base no que foi exposto até aqui, neste trabalho foram construídas nanoilhas ferromagnéticas, via simulação computacional, através dos parâmetros do material ferromagnético Permalloy-79. Este material é bastante utilizado em aplicações tecnológicas, e também em muitos trabalhos experimentais [5, 7, 18, 26] pois, apresenta algumas características interessantes, tais como, alta permeabilidade magnética, baixa coercividade e magnetostricção desprezível, que é o nome dado ao efeito da possível mudança das dimensões de um ferromagneto quando se encontra na presença de um campo magnético externo. Este material também apresenta uma anisotropia magnetocristalina muito baixa [27, 28], logo, o estado da magnetização no equilíbrio é definido pela forma que o nanomagnet apresenta, devido ao fenômeno da anisotropia de forma. As nanoilhas ferromagnéticas também são unidades fundamentais para construir arranjos magnéticos bidimensionais, conhecidos como sistemas de gelo de spin artificiais [29], que é uma das principais motivações deste trabalho.

1.2 GELOS DE SPIN

uma estrutura de spins alinhados pode criar monopólos magnéticos efetivos. Estruturas como essa são chamadas de **gelo de spin** devido a similaridade com os estados mais estáveis de prótons no gelo da água [30], que nesse caso, se evidencia através da orientação de menor energia dos spins.

Linus Pauling [31], ao estudar a molécula do gelo da água, observou que ela apresenta uma estrutura cristalina tetraédrica, contendo íons O^{-2} situados nos vértices e também no centro do tetraedro. Na posição de mais baixa energia, os prótons H^{+} organizam-se a nível molecular ao longo dos segmentos O-O de cada tetraedro, de tal forma, que se tem dois prótons H^{+} próximos ao íon O^{-2} do centro do tetraedro, e dois prótons mais distantes do mesmo, ver Figura 1.4. A Figura 1.4(a) ilustra a configuração que os prótons H^{+} ocupam ao redor do íon O^{-2} no gelo da água. Por fim, a regra do gelo de Bernal-Fowler [32], para a configuração de mais baixa energia no arranjo local de prótons H^{+} , pode ser representada por vetores deslocamentos, como pode ser visto na Figura 1.4(b). Isso torna possível enunciar a regra do gelo como “dois momentos magnéticos entrando”/“dois momentos magnéticos se afastando”. Essa regra do gelo pode ser satisfeita em cada célula tetraédrica unitária, em várias configurações dos íons H^{+} .

Figura 1.4 – (a) Arranjo local de prótons no gelo de água, onde os grandes círculos representam íons de óxido e os círculos pequenos e pretos os prótons (íons de hidrogênio). (b) Esquema do gelo da água parecido com (a), onde a posição dos prótons é representada por vetores de deslocamento. As regras do gelo em (a) é mostrada através da configuração de dois vetores apontando para o íon O^{-2} do centro e dois vetores apontando em direção oposta [33].

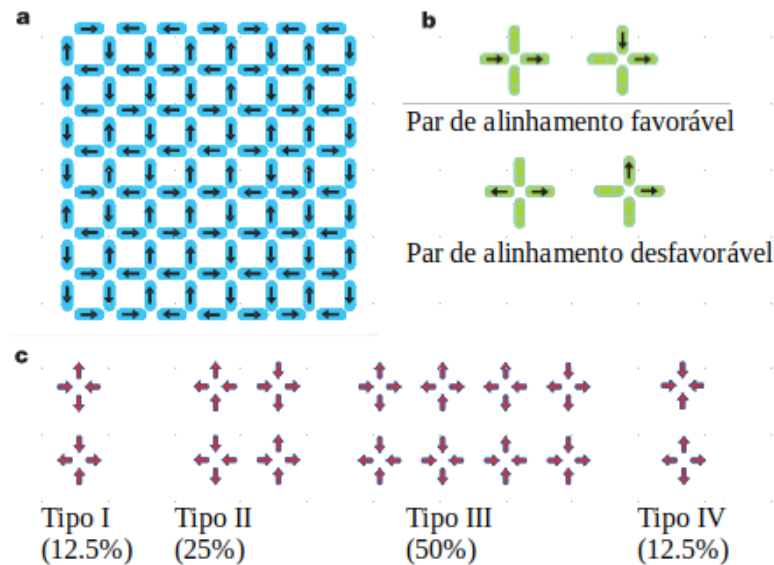


Isso levou Bernal e Fowler [32] a nomear como *regra do gelo* essa configuração em que para cada íon que se encontra localizado no centro de um tetraedro, existam dois prótons mais próximos e dois prótons mais afastados dele (regra two in/two out).

1.3 GELOS DE SPIN ARTIFICIAIS

A regra do gelo também tem sido observada em sistemas magnéticos bidimensionais. As pesquisas desenvolvidas por Wang e seus colaboradores em 2006 [29], revelaram que é possível produzir estruturas ferromagnéticas de gelo de spin artificiais bidimensionais. Neste contexto, Wang foi o primeiro pesquisador a criar o primeiro sistema ferromagnético bidimensional artificial. Ele criou uma rede quadrada bidimensional, composta por nanoilhas ferromagnéticas alongadas, organizadas em direções perpendiculares uma das outras, ver Figura 1.5(a). As nanoilhas utilizadas no trabalho de Wang, possuíam característica de monodomínio principalmente devido as suas dimensões, pois a sua magnetização no estado fundamental, estava alinhada ao longo do seu eixo maior, conferindo um comportamento tipo Ising para o momento magnético total.

Figura 1.5 – (a) Rede dos momentos magnéticos das nanoilhas no gelo de spin artificial feito por Wang, 2006. (b) Alinhamentos de dipolos energéticos com alinhamentos favoráveis (acima) e desfavoráveis (abaixo) entre pares de momentos magnéticos. (c) Dezesesseis configurações possíveis para cada encontro de quatro nanoilhas, em que estas se encontram separadas por topologias distintas, ordenadas de maneira crescente no que diz respeito a sua energia magnetostática. A porcentagem indica a quantidade esperada para cada arranjo de configuração em um arranjo totalmente aleatório. Fonte: Figura adaptada de Wang [29].



As diferentes interações entre os momentos magnéticos (que podem ter um alinhamento favorável ou desfavorável Figura 1.5(b)) que podem levar o sistema a ter energias magnetostáticas diferentes. A Figura 1.5(c) mostra as possíveis configurações para um vértice com quatro nanoilhas magnéticas, onde as setas indicam os domínios ferromagnéticos ao longo do seu eixo maior. Com essa rede criada por Wang, ele então estudou a frustração do sistema. Nesse sistema, para que a sua energia seja mínima a regra do gelo deve ser obedecida (dois momentos magnéticos apontando para o centro do vértice e dois momentos magnéticos apontando para fora).

Trabalhos subsequentes experimentais e teóricos examinaram as estruturas de gelo de spin em outras geometrias [34, 35], como em redes do tipo colméia [36] e triangular [37]. Nesse contexto, é importante conhecer mais sobre as características fundamentais sobre os geos de spin artificiais, principalmente devido a quantidade de efeitos fundamentais que podem

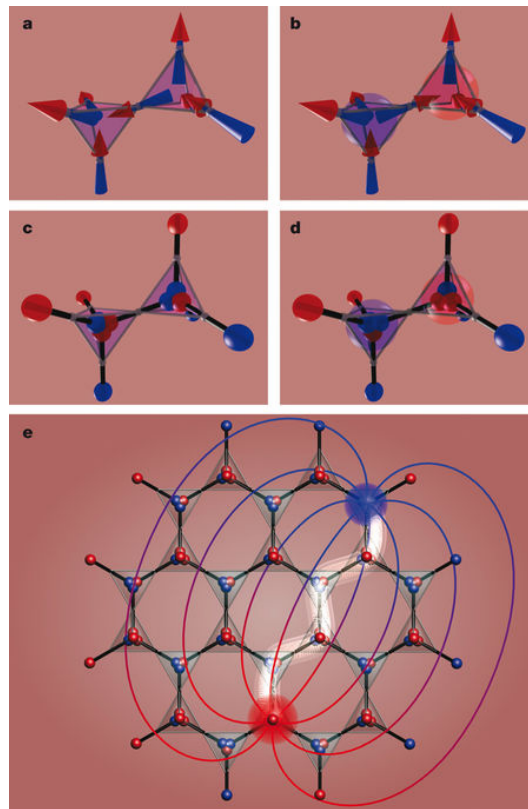
ser observados nessas estruturas. Um dos pontos importantes deste trabalho, é determinar uma distância mínima entre as elipses da matriz, em que os efeitos da interação dipolar sejam minimizados, garantindo desta forma um estado de monodomínio para as nanoelipses.

1.4 MONOPÓLOS MAGNÉTICOS PRESENTES EM GELO DE SPIN

O estudo de gelos de spin artificiais em que as excitações topológicas apresentam comportamento parecido com monopólos magnéticos, tem contribuído muito para a área de Física da Matéria Condensada [38, 39]. Esse fenômeno já havia sido observado em sistemas de gelo de spin naturais à baixas temperaturas [40]. A compreensão desse fenômeno em sistemas bidimensionais artificiais contribui para o desenvolvimento de novas tecnologias além do fato de poder levar a um conjunto de novos fenômenos.

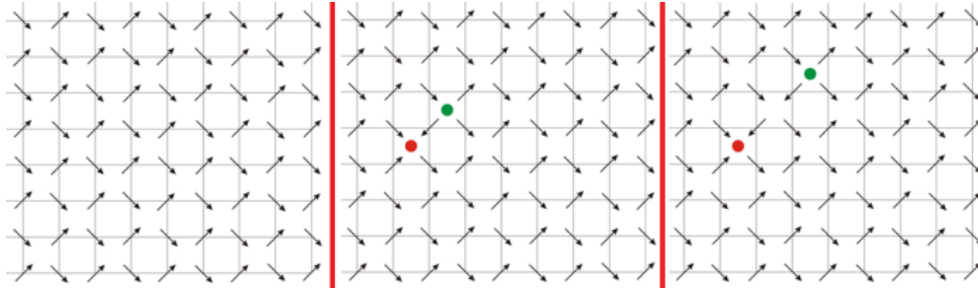
Observar e manipular monopólos magnéticos sempre foi um grande desafio para físicos de todo o mundo, com os gelos de spin isso se tornou possível. A Figura 1.6 mostra o processo de excitação de um par de monopólos magnéticos em uma rede tridimensional. A Figura 1.6(a) mostra uma rede pirocloro em que se encontram duas células tetraédricas adjacentes obedecendo a regra do gelo onde não se tem excesso de carga magnética nem excitação. Na figura 1.6(b e d) nota-se o excesso de carga magnética que é gerado devido a inversão de polaridade do momento magnético, gerando assim o que se chama de monopólos magnéticos. Na figura 1.6(c) tem-se uma visualização melhor da carga magnética. Teoricamente, o que se sabe até então, é que, cada momento magnético pode ser manipulado individualmente desde que para isso se gaste uma determinada quantidade de energia. Uma “*Dirac String*” (Corda de Dirac) [40] é formado devido a inversão consecutiva que ocorre com os momentos magnéticos, suas linhas de campo magnético devido à configuração de cargas é mostrado na figura 1.6(e).

Figura 1.6 – (a) Rede tipo pirocloro em que cada célula tetraédrica obedece a regra do gelo. (b) O momento magnético compartilhado pelas células tetraédricas é invertido, um par de monopólos magnéticos são criados devido ao excesso de carga magnética em cada célula. As figuras (c) e (d) são análogos com (a) e (b), a diferença está na troca na representação em momentos pela representação por cargas magnéticas. (e) Representam um par de momentos magnéticos que se encontram separados na rede pela inversão consecutiva de momentos magnéticos adjacentes (corda de Dirac) onde se tem as linhas de campo magnético esboçado [40].



O tamanho dos momentos magnéticos das nanoilhas presentes em sistemas artificiais é bem maior e mais acessíveis para serem manipulados do que as redes de spin naturais, uma vez que sua excitação bem como a manipulação dos momentos magnéticos nos gelos de spin é bem parecido com a rede pirocloro 3D. Uma matriz bidimensional, possibilita visualizar melhor o fenômeno. É possível visualizar como ocorre a criação e manipulação cargas magnéticas em redes de spin através da Figura 1.7.

Figura 1.7 – Rede quadrada de gelo de spin bidimensional. (a) Não existe excitação topológica, a rede se encontra no estado fundamental, as regras do gelo são obedecidas. (b) Cria-se um par de monopólos magnéticos ao inverter a magnetização em uma das nanoilhas. (c) É possível manipular um monopólo individual fazendo a inversão da magnetização em mais uma ilha [41].



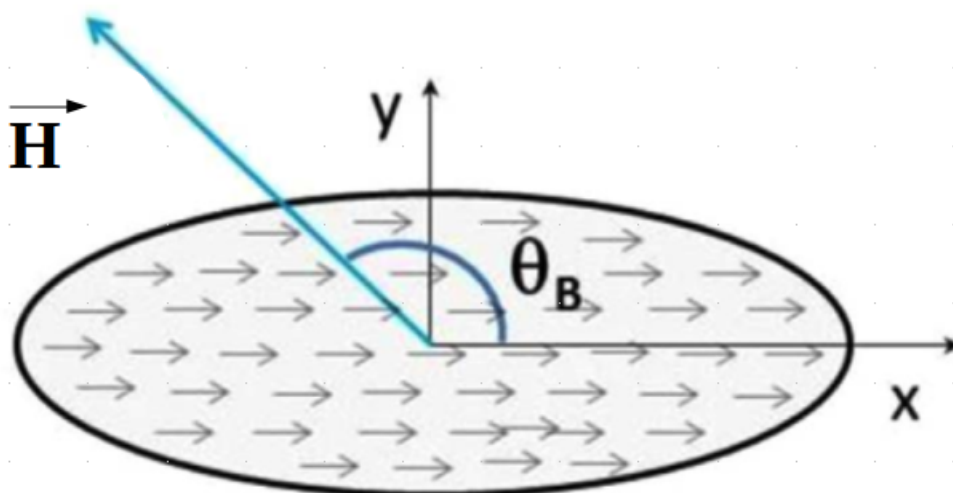
A Figura 1.7 mostra os passos a serem seguidos para criar e manipular cargas magnéticas presentes em uma rede de spin artificial. Em (a) tem-se à rede em um estado fundamental que obedece a regra do gelo, em (b) propositalmente inverte-se a magnetização em uma das nanoilhas, criando-se assim um par de monopólos magnéticos. como é observado em (c), quando se faz a inversão da magnetização em mais uma ilha, consegue-se manipular individualmente um monopólo magnético. Dentre as diversas geometrias possíveis, independente disso, excitar e manipular a carga magnética acontece manipulando um dipolo magnético clássico sem violar qualquer princípio físico.

1.5 PROPOSTA DO TRABALHO

Trabalhos realizados anteriormente pelo grupo de Simulação Computacional do Departamento de Física da Universidade Federal de Juiz de Fora, estudaram o estado fundamental magnético das nanoilhas elípticas de Permalloy. Observou-se que os efeitos da interação dipolar, produz uma forte anisotropia de forma, com isso, o estado fundamental da magnetização é definida pela geometria que a partícula apresenta, ou seja, dependendo do tipo de simetria que a partícula tenha, podem aparecer configurações do tipo vórtice ou skyrmions [6]. O estado fundamental da magnetização apresentado por elipses com formato elíptico, é uma configuração cujo a magnetização se alinha ao longo do eixo maior da nanoelipse. Neste mesmo trabalho, as simulações numéricas permitiram analisar os processos de reversão da magnetização em uma

única nanoelipse de Permalloy (em que devido as suas dimensões o estado magnético da nanoelipse é o alinhado ao longo do seu eixo maior), sob a aplicação de pulsos de campos magnéticos planos, ao longo de direções longitudinais e transversais, cujo as dimensões das nanoelipses eram respectivamente, $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$ e $70 \times 50 \times e$, onde a espessura e variava de 5 a 25 nm em passos de 5 nm. Chegou-se a conclusão que o tempo de reversão da magnetização está relacionada diretamente com a direção em que o pulso de campo magnético é aplicado, pois, este influencia na coerência em que a inversão da magnetização acontece, ver Figura 1.8. A intensidade mínima do pulso do campo magnético externo aplicado, necessário para promover a reversão da magnetização depende dimensões da nanoelipse. Um outro resultado bastante importante deste trabalho, mostra a dependência do índice de coerência com as direções em que o campo magnético externo é aplicado para que ocorra a inversão da magnetização na nanoelipse. Seus resultados mostraram, que o índice de coerência assume o seu valor máximo quando o campo magnético externo é aplicado sob um ângulo de $\theta = 90^\circ$ em relação ao eixo maior (eixo fácil de magnetização) da nanoelipse, revelando que a inversão da magnetização ocorre de maneira coerente, como pode ser visto na Figura 1.8.

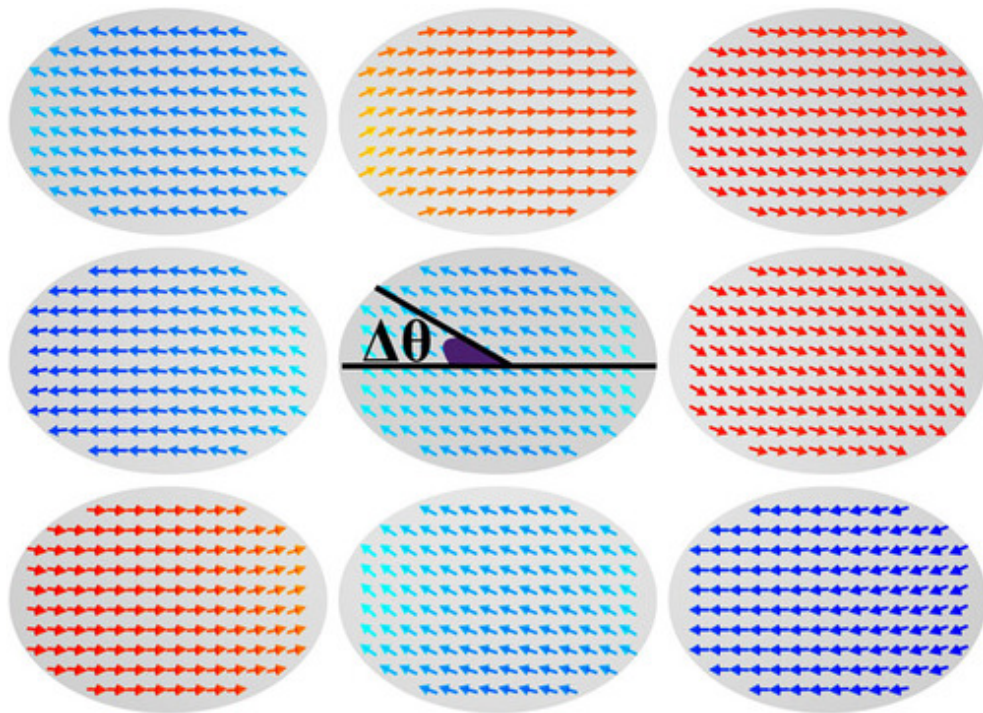
Figura 1.8 – Visão esquemática de uma nanoelipse monodomínio, em que um campo magnético externo \vec{H} é aplicado em um ângulo de θ em relação ao eixo fácil de magnetização [6].



Em um outro trabalho realizado por Gomes (2018), foram investigadas as interações dipolares em matrizes composta por nanoelipses de monodomínio feitas de Permalloy, através de

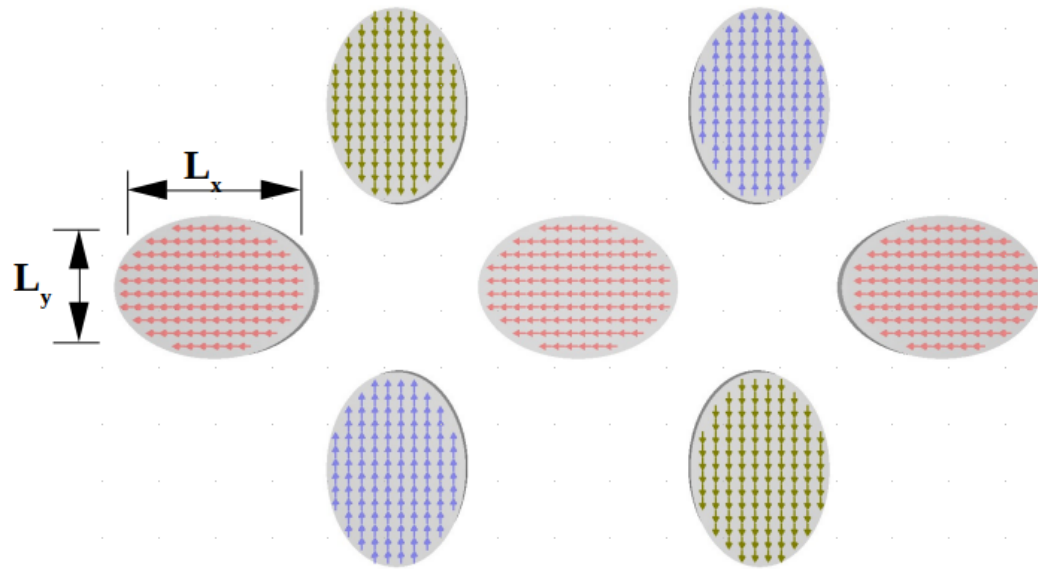
simulações numéricas. Neste trabalho, foram estudadas nanopartículas com razões de aspecto (q) distintas, entre o eixo maior da nanoelipse e o eixo menor ($q = \frac{L_x}{L_y}$). A matriz estudada continha nove nanoelipses, como pode ser visto na Figura 1.9, no entanto, tal arranjo de nove nanoelipses, não favorece que a regra do gelo seja satisfeita. Contudo, no trabalho de Gomes (2018), determina-se uma distância mínima entre as partículas, em que elas se encontram desacopladas. Desta forma, é mais fácil inverter a magnetização da nanoelipse central aplicando um baixo campo magnético. Também foi observado, que devido as interações dipolares entre as nanoelipses, a configuração da matriz de nanomagnetos pode dificultar nessa inversão, ou seja, dependendo da distribuição da magnetização das elipses, o campo necessário para que ocorra a inversão pode ser maior. O estudo da distância entre esses nanomagnetos é muito importante para físicos experimentais, pois fornece a eles qual a distância que se deve ter entre as nanoelipses para que os efeitos da interação dipolar sejam minimizados, garantindo assim o estado de monodomínio das nanoelipses.

Figura 1.9 – Estado magnético de equilíbrio de um sistema magnético em que se observa uma forte interação entre elipses [27]. Nota-se que a magnetização individual da nanoelipses podem não estar alinhados ao longo do eixo fácil.



Diante dos trabalhos já realizados pelo grupo de Simulação Computacional do departamento de Física da UFJF, e diante da importância de estudar e contribuir com novas informações para os sistemas magnéticos, especificamente, os sistemas de gelo de spin, o presente trabalho buscou estudar nanoilhas ferromagnéticas de monodomínio, via simulação computacional, pois, as informações obtidas neste trabalho contribuem principalmente para que os físicos experimentais possam construir uma matriz de nanoelipses, com uma distância de separação S entre as bordas das elipses que garante que a magnetização do estado fundamental esteja alinhada ao longo do seu eixo maior. Portanto, foram investigadas o processo de inversão da magnetização nas nanoelipses, mediante a aplicação de um campo magnético externo mínimo, que foi determinado anteriormente de acordo com as dimensões de cada nanomagnet. As nanoilhas estudadas possuem dimensões que lhe asseguram o estado menos energético da magnetização alinhado ao longo do seu eixo maior. Após encontrar o valor mínimo de campo magnético externo para cada tamanho da nanoilha, buscou-se investigar uma matriz composta de nanoelipses, com um arranjo que possa satisfazer a regra do gelo, como pode ser visto na Figura 1.10. Neste trabalho, variamos a distância entre elipses, ou seja, a separação borda-a-borda. Dessa forma, determinou-se a separação mínima entre elipses, $S = S_{min}$, tal que a interação dipolar entre elipse torna-se relativamente fraca. Para fins práticos, as nanoelipses estarão desacopladas magneticamente. Este resultado é muito importante, pois auxilia possíveis trabalhos experimentais na construção de sistemas magnéticos, garantindo o estado de monodomínio das elipses. Posteriormente, também foram analisados as energias das configurações magnéticas e também os processos de inversão da magnetização da nanoelipse central na presença dos seus primeiros vizinhos.

Figura 1.10 – Sistema artificial de gelo de spin (spin-ice.)



2 CONCEITOS FUNDAMENTAIS EM NANOMAGNETISMO

Hoje em dia, realizar observações de sistemas magnéticos tornou-se algo extremamente comum. Essas observações podem ser feitas desde algo extremamente simples, no qual boa parte da população tem acesso, como por exemplo os ímãs, que possui diversas aplicações, ou então, podem ser realizadas através de exemplos mais robustos, em que também é possível fazer observações dos efeitos magnéticos, como por exemplo, os eletroímãs utilizados em ferro velhos que possibilitam mover de forma apropriada os objetos pesados a partir de um equipamento que utiliza a força magnética. As observações cotidianas indicam que materiais apresentam tipos de comportamento macroscópico diferentes quando se encontram na presença de um campo magnético, mostrando assim que os materiais que possuem uma forte reação ao campo magnético são os mais notáveis para serem utilizados em aplicações do magnetismo.

Materiais que visivelmente não reagem ao campo magnético podem apresentar dois comportamentos distintos conhecido como diamagnetismo e paramagnetismo [42]. O paramagnetismo ocorre em materiais no qual os átomos possuem elétrons desemparelhados, nestes materiais os momentos magnéticos intrínsecos dos elétrons tendem a se orientar na direção e sentido do campo que foi aplicado. A susceptibilidade (χ) desses materiais é positiva e muito pequena. Já os materiais ditos diamagnéticos, possui um valor valor baixo e negativo de susceptibilidade, eles possuem o tipo mais fraco de resposta magnética, é importante ressaltar que todos os materiais apresentam esses comportamento, porém, sua observação só é possível na ausência de outros tipos de comportamentos que podem vir a sobrepor este. O momento angular dos átomos dos materiais diamagnéticos é nulo ($J = L + S = 0$), portanto, não apresentam momento

magnético intrínseco, seus momentos magnéticos são induzidos pelo campo magnético externo [43].

Macroscopicamente falando, os materiais que apresentam forte reação a um campo magnético ou apresentam magnetização não nula mesmo na ausência de campo, são conhecidos como materiais ferromagnéticos. A interação de troca entre os momentos de dipolo magnéticos atômicos, apesar de ser curto alcance, é muito intensa, e ela é responsável por favorecer o alinhamento paralelo (ferromagnetismo) ou antiparalelo (antiferromagnetismo) entre eles, resultando em um ordenamento de longo alcance [44]. Esses materiais perdem a magnetização espontânea quando a sua temperatura é superior a temperatura de *Curie*, quando isso acontece, o ferromagneto se comporta como um paramagneto.

2.1 MOMENTO MAGNÉTICO E MAGNETIZAÇÃO

O princípio das propriedades magnéticas dos materiais ferromagnéticos provém da estrutura eletrônica dos átomos. Dessa forma, o spin do elétron, que assim como a massa e a carga elétrica é uma propriedade intrínseca do elétron, é objeto fundamental no ferromagnetismo. O comportamento ferromagnético dos materiais surge através da interação entre os momentos magnéticos associados aos spins dos elétrons e não nos momentos magnéticos de origem orbital, fato este mostrado através da Mecânica Quântica [43]. O momento magnético que está associado ao momento angular de spin total S dos elétrons é dado por:

$$\vec{m} = -\gamma\vec{S} = -\frac{g\mu_B}{\hbar}\vec{S} = -\frac{ge}{2m_e}\vec{S}, \quad (2.1)$$

γ é denominado razão giromagnética do elétron, seu valor é $\gamma = \frac{ge\mu_B}{\hbar} = 1,77 \times 10^{11} \text{1/Ts}$ e é uma constante de proporcionalidade. O momento angular de spin é medido em unidades de $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34} \text{[J.s]}$, conhecida por constante de Planck normalizada. O momento magnético m , possui a mesma dimensão de $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,27 \times 10^{-24} \text{[(A.m}^2\text{)=(J/T)]}$, conhecido por magnéton de Bohr.

A magnetização \vec{M} de uma amostra que contém um determinado volume V , é definida

através da soma dos momentos magnéticos dividido pelo seu volume:

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_i m_i. \quad (2.2)$$

A indução magnética \vec{B} na presença da matéria é dada pela seguinte expressão:

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}), \quad (2.3)$$

sua unidade de medida do Sistema Internacional (SI) é Tesla [T], a permeabilidade magnética do vácuo tem valor de $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} [\text{T}\cdot\text{m}/\text{A}]$, \vec{H} é o campo magnético auxiliar e possui a mesma unidade no SI de \vec{M} que é [A/m].

Quando a magnetização (\vec{M}) é paralela ao campo magnético \vec{H} , é possível escrever:

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

χ é denominada susceptibilidade magnética do material, uma grandeza adimensional muito importante devido ao fato de trazer informações em relação a capacidade de magnetização do material quando este se encontra na presença de um campo \vec{H} . Tanto os valores quanto os sinais de χ serve de parâmetro para classificar os materiais em diamagnéticos, paramagnéticos e ferromagnéticos [45, 46].

2.2 INTERAÇÃO DE TROCA

No modelo de Heisenberg, os momentos magnéticos estão fixos nos sítios de uma rede e suas interações acontecem devido a interação de troca direta ou indireta. A existência dos momentos magnéticos localizados presume que os elétrons responsáveis pelo magnetismo não são os de condução.

O alinhamento paralelo dos momentos magnéticos presentes em materiais paramagnéticos só acontece quando se tem temperaturas próximas ao zero absoluto. Isso gera um entendimento sobre o ordenamento espontâneo observado nos materiais ferromagnéticos de que isso acontece devido a presença de um campo magnético interno muito forte. No entanto, notou-se que esse

campo interno não poderia ter origem pela interação dipolo-dipolo, pois esta seria fraca, não sendo capaz de manter o ordenamento ferromagnético [47]. Heisenberg justificou esse fato em 1928, dizendo que esse campo magnético interno surge devido a interação entre os momentos magnéticos de átomos vizinhos, e se justifica através da Mecânica Quântica [48].

A interação de troca tem origem quântica, proveniente do princípio de exclusão de Pauli em que um átomo não pode conter dois elétrons com o mesmo conjunto de números quânticos. A interação de troca é obtida realizando os cálculos das energias dos estados possíveis para um sistema de dois elétrons (estado singleto e tripleto) com autofunções antissimétricas, e sua dedução pode ser encontrada nas referências [49–51], o resultado disso leva a energia de interação de troca entre um par de spins e é dada por,

$$H_{tro} = -\frac{J_{1,2}}{\hbar^2} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \quad (2.5)$$

$J_{1,2}$ representa a constante de interação de troca e possui dimensões de energia, ela surge da superposição das funções de onda espaciais dos momentos magnéticos de spin 1 e 2 e é considerável apenas para par de spins que se encontram próximos mostrando que a interação de troca é uma interação de curto alcance.

Após saber a interação de troca entre um par de spins, torna-se possível escrever a hamiltoniana para um sistema discreto, que contém spins localizados em seus respectivos sítios como,

$$H_{tro} = -\frac{1}{2\hbar^2} \sum_{i,j} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (2.6)$$

Para evitar a contagem dupla da interação entre um par de spins, é incluído um fator $\frac{1}{2}$. \vec{S}_i e \vec{S}_j são respectivamente o spin dos íons localizados nos sítios i e j .

Levando em conta que esta interação é uma interação de curto alcance, a energia do sistema é resultado das interações entre primeiros vizinhos, assim, os fatos apresentados nos

levam a fazer as seguintes aproximações,

$$J_{ij} = J_{ji} = \begin{cases} J, & \text{para } i,j \text{ primeiros vizinhos;} \\ 0, & \text{para demais casos.} \end{cases} \quad (2.7)$$

Desta forma, pode-se reescrever 2.6 que é conhecido como hamiltoniano de Heisenberg, da seguinte forma,

$$H_{tro} = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.8)$$

onde $\langle i, j \rangle$ mostra que a soma é realizada entre os pares de spins que são primeiros vizinhos.

Através da equação 2.1 ($\vec{m} = -\gamma\vec{S}$) que define o momento magnético associado ao spin do elétron, é possível reescrever a equação 2.8 como:

$$H_{tro} = -\frac{J}{2\gamma^2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j. \quad (2.9)$$

O modelo teórico presume a existência de uma rede ferromagnética com momentos magnéticos localizados de tal forma que todos os momentos magnéticos possui o mesmo módulo em qualquer sítio da rede ($|\vec{m}_i| = m$):

$$\hat{m}_i = \frac{1}{|\vec{m}_i|} \vec{m}_i = \frac{1}{m} \vec{m}_i. \quad (2.10)$$

\hat{m}_i é um versor unitário que corresponde ao momento magnético que se encontra localizado no sítio i , m é o módulo de cada momento magnético, no modelo em questão consideramos que os momentos magnéticos são iguais. Reescrevendo a equação 2.9, conforme segue:

$$H_{tro} = -\frac{J}{2} \left(\frac{m}{\gamma\hbar} \right)^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j. \quad (2.11)$$

Desenvolvendo o produto escalar para a equação 2.1, obtém-se:

$$\begin{aligned} \vec{m} \cdot \vec{m} &= (-\gamma\vec{S}) \cdot (-\gamma\vec{S}) \\ m^2 &= \gamma^2 S^2. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Através da equação 2.12, é possível escrever a seguinte igualdade:

$$H = -J \left(\frac{m}{\gamma \hbar} \right)^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j = -J \left(\frac{S}{\hbar} \right)^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j, \quad (2.13)$$

lembrando que S representa o módulo do momento angular de spin, onde a sua dimensão é dada pela constante \hbar , dessa forma, pode-se definir o parâmetro adimensional da seguinte maneira:

$$\sigma = \frac{S}{\hbar} = \frac{m}{\gamma \hbar} = \frac{m}{g \mu_B}. \quad (2.14)$$

A equação 2.14, mostra o módulo do momento magnético normalizado e também o módulo do spin normalizado. Assim, a equação 2.13, pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$H = -J \sigma^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j = -J \sigma^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j. \quad (2.15)$$

É de praxe incluir o fator adimensional σ^2 na constante de troca, de maneira a definir uma nova constante de troca:

$$J \rightarrow J \sigma^2. \quad (2.16)$$

Assim, a hamiltoniana da interação de troca de um sistema de momentos magnéticos discretos localizados pode ser escrito como:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j. \quad (2.17)$$

A equação 2.17, em conjunto com o vínculo não linear

$$\hat{m}_i \cdot \hat{m}_i = (m_i^x)^2 + (m_i^y)^2 + (m_i^z)^2, \quad (2.18)$$

é conhecido como **modelo de Heisenberg isotrópico**. A constante de troca J determina a força da interação, sua intensidade pode mudar dependendo do material. Quando $J > 0$, a energia do sistema se minimizará de tal forma que os momentos magnéticos estarão paralelos, caracterizando um comportamento ferromagnético. Para valores de $J < 0$, o material terá um ordenamento antiferromagnético, e a sua energia será minimizada quando os momentos magnéticos estiverem alinhados antiparalelamente.

2.3 INTERAÇÃO DIPOLAR

A interação dipolar tem origem eletromagnética e acontece entre todos os dipolos magnéticos do sistema. Os dipolos presentes em materiais magnéticos criam um campo magnético ao seu redor, ao mesmo tempo em que tenta se alinhar ao campo magnético efetivo na sua posição. Esse campo efetivo é resultado da contribuição de todos os campos magnéticos gerados pelos demais dipolos presentes na rede, conhecido por campo desmagnetizante, e de outras possíveis contribuições de campos externos.

As interações dipolares são responsáveis por definir o tipo de configuração magnética de acordo com a geometria da amostra, isso acontece devido ao fenômeno conhecido como **anisotropia de forma**. A anisotropia de forma surge devido ao campo desmagnetizante que aparece dentro do material criando pólos nas superfícies [48].

O conceito de momento de dipolo magnético geralmente é discutido no contexto do eletromagnetismo clássico [46, 52]. O campo magnético produzido por um dipolo magnético pontual \vec{m}_j que se encontra na posição \vec{r}_j , em um determinado ponto \vec{r}_i , é dado por:

$$\vec{B}_j(\vec{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \frac{3(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \vec{m}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^5} - \vec{m}_j \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3} \right]. \quad (2.19)$$

Defini-se \hat{r}_{ij} como um versor que une os pontos \vec{r}_i e \vec{r}_j ,

$$\hat{r}_{ij} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}. \quad (2.20)$$

Quando existe um outro momento de dipolo \vec{m}_i em um ponto de interesse, passa a existir uma energia de interação dipolo-dipolo que é representada por,

$$U = -\vec{m}_i \cdot \vec{B}_j(\vec{r}_i) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right]. \quad (2.21)$$

Em um sistema muito grande, composto por um número N grande de dipolos magnéticos, pode-se assumir que, neste sistema exista um número de $N - 1$ interações. Logo, o campo magnético gerado por estes momentos magnéticos em um determinado ponto \vec{r}_i devido a superposição

de cada momento de dipolo magnético, é dado por,

$$\vec{B}(\vec{r}_i) = \sum_{j=i}^{N-1} \vec{B}_j(\vec{r}_i) = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [\hat{r}_{ij} 3(\hat{r}_{ij} \cdot \vec{m}_j) - \vec{m}_j]. \quad (2.22)$$

Com isso, a energia de interação do dipolo \vec{m}_i com todos os demais dipolos do sistema, será dado então por $U_i = -\vec{m}_i \cdot \vec{B}(\vec{r}_i)$, isso leva o hamiltoniano do sistema que contém N dipolos magnéticos a ser representado por,

$$H_{dip} = \sum_{i=1}^N U_i = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N-1} \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]. \quad (2.23)$$

Os termos de interação do dipolo com ele próprio, são excluídos, pois, um dipolo não interage com o campo que ele mesmo gera, isso provocaria uma divergência na energia total do sistema. Pode-se então, escrever a energia de interação dipolar, mostrando a sua simetria, da seguinte maneira,

$$U_{ij} = \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})] \quad (2.24)$$

$$U_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})] + \frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]. \quad (2.25)$$

Colocando o fator 1/2, chegamos na seguinte expressão para a energia,

$$U_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) + \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ji})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ji}) \right]. \quad (2.26)$$

O hamiltoniano é escrito de tal forma que os somatórios vão de 1 a N momentos magnéticos, deve-se excluir o caso em que $i = j$, com isso, encontra-se a seguinte expressão,

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]. \quad (2.27)$$

Pode-se então, reescrever o hamiltoniano das interações dipolares, deixando as distâncias entre os sítios em termos do parâmetro de rede a_0 da seguinte maneira,

$$H_{dip} = \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right], \quad (2.28)$$

pode-se perceber que essa interação dipolar tem comportamento antiferromagnético, pois, o

primeiro termo tende a alinhar antiparalelamente os momentos magnéticos. O segundo termo, alinha os momentos magnéticos ao longo da direção \hat{r}_{ij} que os une, isso contribui para que nas bordas do material, os momentos magnéticos se encontrem paralelos a essas bordas. Então, essa iteração é a responsável pela anisotropia de forma do material. Um outro detalhe muito importante da interação dipolar é a sua natureza de longo alcance, ela cai com o inverso do cubo da distância que une os sítios que estão interagindo.

Considerando que todos os momentos magnéticos são idênticos e assumindo a seguinte transformação, $\vec{m}_i = m\hat{m}_i$, podemos reescrever o hamiltoniano (2.28) da seguinte forma,

$$H_{dip} = \frac{D}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right], \quad (2.29)$$

em que D é a constante de interação dipolar e possui dimensão de energia, sendo representada por:

$$D = \frac{\mu_0 m^2}{4\pi a^3}. \quad (2.30)$$

2.4 INTERAÇÃO ZEEMAN

A energia de interação de um momento magnético individual na presença de um campo magnético externo é dado pela seguinte expressão,

$$E = -\vec{m} \cdot \vec{B}_{ext} = -\mu_0 \vec{m} \cdot \vec{H}_{ext}. \quad (2.31)$$

Na expressão acima \vec{H}_i^{ext} representa o campo externo na posição do i -ésimo momento magnético. Considerando \vec{H}_i^{ext} por conveniência uma vez que \vec{H} e \vec{M} existem no material e são expressos na mesma unidade, é possível reescrever a hamiltoniana de interação Zeeman H_{zee} como uma constante que multiplica um termo da interação adimensional. Para isso é necessário considerar novamente momentos magnéticos idênticos com seus respectivos unitários ($\vec{m} = m\hat{m}_i$) e definir um campo magnético adimensional no i -ésimo sítio da rede em termos da magnetização de

saturação da seguinte maneira,

$$\vec{h}_i^{ext} = \frac{\vec{H}_i^{ext}}{M_S}. \quad (2.32)$$

A hamiltoniana se torna,

$$H_{zee} = -Z \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext}, \quad (2.33)$$

onde Z é a constante de interação Zeeman e é dada por $Z = \mu_0 m M_S$ e assim como as outras constantes de interação também é expressa em Joule [J].

No nosso caso, assumimos que o campo magnético externo é uniforme, desta forma, tem-se que,

$$\vec{h}^{ext} = \frac{\vec{H}^{ext}}{M_S}. \quad (2.34)$$

O que nos leva a seguinte expressão:

$$H_{zee} = - \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{h}^{ext} \quad (2.35)$$

3 *SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA*

O tratamento analítico de sistemas com dimensões nanométricas é bastante complicado, e muitas vezes acaba se tornando restrito a fenômenos muito específicos, isso faz com que em sua grande maioria, aproximações sejam feitas para simplificá-lo em relação ao caso real devido à condições assintóticas e também à simetrias. Em um ferromagneto real, por exemplo, existem um número muito grande de momentos magnéticos atômicos, tornando impraticável o estudo do fenômeno ao qual se está interessado [44].

Nos últimos anos, tem-se aumentado bastante o interesse em estudar sistemas magnéticos nano-estruturados. O desafio nessa área se apresenta na dificuldade de produzir de forma precisa essas estruturas, para que possam ser replicadas em grande escala. Esse fator limitante, acaba se refletindo, aos inúmeros experimentos científicos que possam decorrer do controle dessa fabricação.

Neste contexto, a fim de verificar essas estruturas, existem diversos métodos, bem como programas livres que conseguem simular sistemas magnéticos. Neste trabalho, utilizou-se um código computacional desenvolvido por alunos do nosso grupo de pesquisa de Simulação Computacional do Departamento de Física da Universidade Federal de Juiz de Fora. O código para realizar a simulação micromagnética foi escrito na linguagem de programação *Fortran 90*.

3.1 O HAMILTONIANO DO MODELO

A modelagem do sistema de nanoilhas ferromagnéticas, através de momentos de dipolo magnéticos que se encontram em determinados sítios i de uma rede cúbica de Bravais,

onde se tem interações de troca e interação dipolar, é construída através de momentos de dipolo magnéticos discretos. Na presença de um campo magnético externo, o hamiltoniano das interações magnéticas do sistema, é escrito através das equações (2.17), (2.29) e (2.33), como,

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{D}{2} \sum_{i,j,j \neq i} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3 (\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij}) (\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - Z \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext}. \quad (3.1)$$

Esse hamiltoniano (3.1) é composto pelos termos da interação de troca, energia dipolar e a interação Zeeman, ambos já foram definidos anteriormente. O vetor unitário \hat{m}_i indica tanto o sentido quanto a direção do i -ésimo momento magnético presente na rede.

Para o modelo que está sendo estudado, o primeiro termo do hamiltoniano considera apenas a interação entre os primeiros vizinhos, adota-se também que a constante de interação de troca J é positiva, então, a energia só é minimizada quando os momentos magnéticos se alinham paralelamente. Já o segundo termo, é o responsável pela anisotropia de forma, ele calcula a interação clássica entre os momentos de dipolo magnético, a minimização de energia neste termo, acontece devido a uma configuração intrínseca da magnetização para cada nanopartícula do sistema. Por fim, resta o termo da energia Zeeman de interação do momento magnético com o campo magnético externo, este termo tem sua energia minimizada quando os momentos magnéticos se alinham na mesma direção do campo.

3.2 DINÂMICA DE MAGNETIZAÇÃO

Neste trabalho utiliza-se o método da **dinâmica de spins**, que é um método matemático determinista, que permite analisar de uma forma dinâmica o processo de evolução temporal cujo sistemas magnéticos conservativos estão sujeitos. Este método permite modelar o sistema através de um hamiltoniano como o da seção anterior, cujo a evolução temporal do sistema é descrita pela equação de movimento de Heisenberg.

Partindo da equação de movimento de Heisenberg para o operador de momento angular de spin \vec{S}_i , que se encontra localizado no sítio i , como pode ser verificado na referência [53],

que é dado por,

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_i}{dt} = [\vec{S}_i, H], \quad (3.2)$$

onde na equação acima, H é o Hamiltoniano do sistema, $i \rightarrow i^2 = -1$ é a unidade imaginária, o comutador entre o operador de spin \vec{S}_i e o hamiltoniano H é dado por $[\vec{S}_i, H] = \vec{S}_i H - H \vec{S}_i$. É importante ressaltar que, a equação de movimento de Heisenberg 3.2, deve ser desenvolvida para todas as componentes cartesianas de \vec{S}_i , isso é, x, y e z .

O desenvolvimento da equação (3.2) pode ser encontrada na referência [44], o resultado desse processo é expresso por,

$$\frac{d\vec{S}_i}{dt} = \gamma \vec{S}_i \times \vec{B}_i. \quad (3.3)$$

Na equação (3.3), \vec{B}_i representa o campo de indução magnética efetiva do sítio i , esse campo de indução magnética é obtido através do Hamiltoniano H do sistema.

A equação (3.3) é muito importante, pois, ela descreve, para os operadores de spin \vec{S}_i na representação de Heisenberg, a precessão clássica de Larmor que um momento de dipolo magnético sofre na presença um campo magnético efetivo local. No sistema em questão, o campo efetivo local é decorrente do hamiltoniano H , que conta com as contribuições dos campos de troca, externo e desmagnetizante.

Para que seja possível expressar os operadores de spin \vec{S}_i , de tal forma que estes possam assumir forma de vetores tridimensionais, ou seja, considerando o limite clássico, faz-se necessário utilizar mais uma vez a relação entre o momento magnético e o momento angular de spin, equação (2.1), $\vec{m} = -\gamma \vec{S}$, $\vec{m}_i = m \hat{m}_i$ representa um vetor tridimensional. Quando não se tem magnetização, tem-se que $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$. Logo, a equação 3.3 passa a ser escrita como

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\mu_0 \left(\vec{m}_i \times \vec{H}_i \right). \quad (3.4)$$

A equação (3.4), foi proposta por Landau Lifshitz no ano de 1935, e então, ficou conhecida como equação de Landau-Lifshitz (equação LL) [54]. Essa equação descreve a precessão que o momento magnético i realiza em torno do campo magnético efetivo local \vec{H}_i . Contudo,

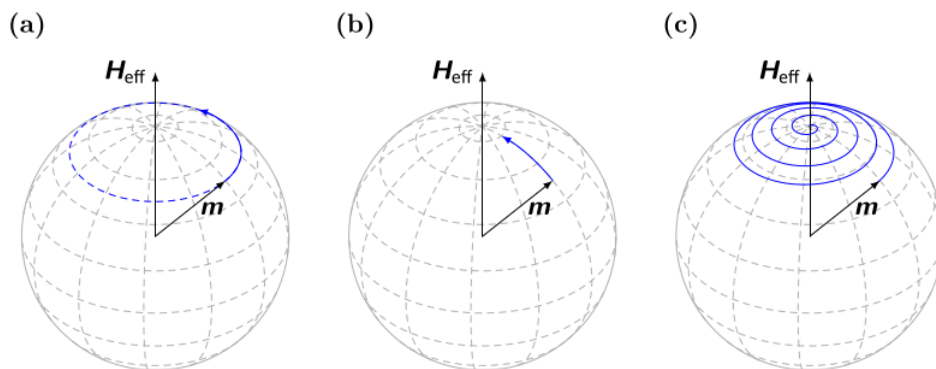
a equação (3.4), não prevê a dissipação de energia, isso implica que o momento magnético iria precessionar infinitamente ao redor do campo \vec{H}_i . Foi então que, no ano de 1955, Gilbert [55], adicionou um termo na equação LL, para descrever a dissipação da energia nos materiais. Assim, a equação passou a ser chamada de equação Landau-Lifshitz-Gilbert (equação LLG),

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\mu_0 (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{|\vec{m}_i| \gamma} \left(\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} \right). \quad (3.5)$$

Na equação (3.5), α é o parâmetro de “damping”, ou parâmetro de amortecimento, seu valor é característico de cada material, sendo obtido na maioria das vezes através de técnicas experimentais. Este termo α é adimensional e fornece a taxa de dissipação de energia do sistema.

O termo adicionado por Gilbert na equação (3.5), é o responsável pelo torque de amortecimento do movimento de precessão, responsável pelo alinhamento do momento de dipolo com o campo magnético no estado de mais baixa energia. Desta forma, esta mesma equação passa a fornecer a evolução temporal do momento magnético em torno do campo \vec{H}_i para duas situações possíveis, que são respectivamente, o caso em que não se tem amortecimento ($\alpha = 0$), e o caso de sistemas que o momento magnético apresenta uma precessão amortecida ($\alpha > 0$). Tais situações são mostradas na Figura 3.1. Considerando a equação (3.5), e fazendo o pro-

Figura 3.1 – (a) ($\alpha = 0$) para o caso em que não se tem amortecimento, nessa situação não se tem dissipação de energia, o momento magnético precessa indefinidamente em torno do campo \vec{H}_{eff} . (b) ($\alpha > 0$) passa a existir um torque de amortecimento, que, nesse caso, alinha paralelamente o momento magnético com o campo efetivo local \vec{H}_{eff} . (c) ($\alpha > 0$) o momento magnético precessiona em torno no campo efetivo local, amortecendo, por que se tem uma dissipação de energia [56].



duto escalar de \vec{m}_i nos dois lados da equação, vamos obter o seguinte resultado:

$$\vec{m}_i \cdot \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\gamma\mu_0\vec{m}_i \cdot (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{|\vec{m}_i|} \vec{m}_i \cdot \left(\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} \right) \quad (3.6)$$

$$\vec{m}_i \cdot \frac{d\vec{m}_i}{dt} = \gamma\mu_0\vec{m}_i \cdot (\vec{H}_i \times \vec{m}_i) - \frac{\alpha}{|\vec{m}_i|} \vec{m}_i \cdot \left(\frac{d\vec{m}_i}{dt} \times \vec{m}_i \right). \quad (3.7)$$

Aplicando a identidade vetorial $\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{b} \cdot (\vec{c} \times \vec{a}) = \vec{c} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$, é possível reescrever a equação da seguinte maneira:

$$\vec{m}_i \cdot \frac{d\vec{m}_i}{dt} = \gamma\mu_0\vec{H}_i \cdot (\vec{m}_i \times \vec{m}_i) - \frac{\alpha}{|\vec{m}_i|} \frac{d\vec{m}_i}{dt} \cdot (\vec{m}_i \times \vec{m}_i) = 0 \quad (3.8)$$

Isso mostra que a variação temporal do momento magnético é perpendicular a ele mesmo.

Para que possamos analisar a evolução temporal do módulo do momento magnético, vamos fazer da seguinte maneira,

$$\frac{d}{dt}(\vec{m}_i \cdot \vec{m}_i) = \frac{d\vec{m}_i}{dt} \cdot \vec{m}_i + \vec{m}_i \cdot \frac{d\vec{m}_i}{dt} = 2\vec{m}_i \cdot \frac{d\vec{m}_i}{dt}. \quad (3.9)$$

Devido a igualdade da equação (3.8), podemos escrever a seguinte igualdade,

$$\frac{d(m_i^2)}{dt} = 0. \quad (3.10)$$

Com isso, está demonstrado a característica que a equação LLG apresenta em preservar a norma do momento magnético, tornando a evolução temporal do momento magnético, restrita ao movimento de precessão em torno do campo efetivo.

A maneira como a equação (3.5) está escrita, é conhecida como forma implícita da equação de LLG, pois, contém a variação temporal do momento magnético $\left(\frac{d\vec{m}}{dt}\right)$ contida nos dois lados da equação, de tal forma que, não é possível fazer a separação diretamente. Fazendo

o produto vetorial entre os momentos magnéticos \vec{m}_i nos dois lados da equação (3.5), obtém-se

$$\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\gamma\mu_0\vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{m_i}\vec{m}_i \times \left(\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} \right). \quad (3.11)$$

Aplicando a seguinte identidade vetorial: $\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c})\vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b})\vec{c}$, reescrevemos a equação (3.11) da seguinte maneira,

$$\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\gamma\mu_0\vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{m_i} \left[\left(\vec{m}_i \cdot \frac{d\vec{m}_i}{dt} \right) \vec{m}_i - (\vec{m}_i \cdot \vec{m}_i) \frac{d\vec{m}_i}{dt} \right] \quad (3.12)$$

$$\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\gamma\mu_0\vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) - \alpha m_i \frac{d\vec{m}_i}{dt}.$$

agora, substituindo a equação (3.13) na equação (3.5), vamos ter

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\mu_0(\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{m_i\gamma} \left[-\gamma\mu_0\vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) - \alpha m_i \frac{d\vec{m}_i}{dt} \right]. \quad (3.13)$$

Abrindo a equação acima,

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\mu_0(\vec{m}_i \times \vec{H}_i) - \frac{\mu_0\alpha}{m_i}\vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) - \frac{\alpha^2}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt}. \quad (3.14)$$

Então, reescrevendo, temos:

$$\frac{1}{\gamma}(1 + \alpha^2) \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\mu_0 \left[(\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{m_i}\vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) \right] \quad (3.15)$$

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\frac{\mu_0}{1 + \alpha^2} \left[(\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{m_i}\vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) \right]. \quad (3.16)$$

É possível observar que, todos os torques que os momentos magnéticos estão sujeitos, são escritos em função do campo \vec{H}_i . A equação (3.16), é responsável por descrever a evolução temporal que um único momento magnético está sujeito. Logo, ela representa respectivamente três equações acopladas das componentes x, y e z , que devem ser resolvidas individualmente para cada uma dessas componentes. Com isso, deve-se observar que, uma única nanoilha, que possui N momentos magnéticos bem localizados, contém um número de $3N$ equações diferenciais acopladas para serem resolvidas. Esse fato, cria uma restrição que só pode ser resolvida através de métodos numéricos.

Para se obter o campo magnético efetivo local \vec{H}_i através do hamiltoniano H deve-se realizar uma derivada parcial da hamiltoniana em relação as componentes dos momentos magnéticos \vec{m}_i ,

$$\vec{H}_i = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i}. \quad (3.17)$$

A dinâmica do sistema magnético se dá a partir de uma configuração inicial e momentos magnéticos e a integração numérica do conjunto de equações é a responsável por realizar a dinâmica da magnetização.

3.3 APROXIMAÇÃO MICROMAGNÉTICA

A aproximação micromagnética, é uma teoria de campo para os sistemas magnéticos, no qual, um sistema magnético é particionado em células em que cada uma dessas possui um número muito grande de momentos atômicos. Ela realiza um tratamento semiclássico em materiais ferromagnéticos em uma escala de comprimento que varia desde algumas dezenas de nanômetros, até algumas centenas de micrômetros, possibilitando particionar as células em dimensões específicas. No entanto, essa teoria não permite obter informações a respeito da distribuição local dos momentos magnéticos, tem-se a informação apenas sobre a magnetização resultante local em cada sítio.

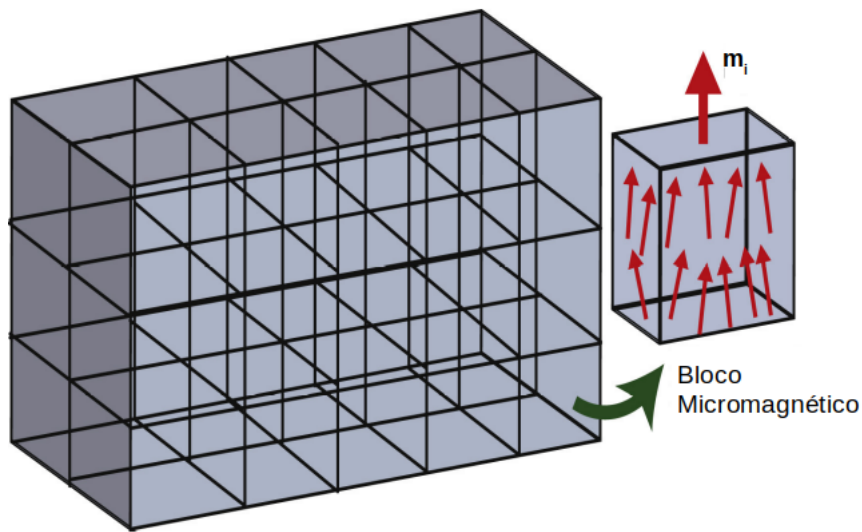
O micromagnetismo permite descrever uma determinada amostra magnética, através de um campo clássico de vetores de magnetização $\vec{M}(\vec{r}, t)$, onde esses vetores, são as médias espaciais dos momentos magnéticos atômicos. Então, é necessário admitir algumas situações, que são respectivamente, considerar que a magnetização é constante ao longo da amostra, e só são admitidas variações suaves na direção, mas sem descontinuidade.

A aproximação magnética, utilizada neste trabalho, considera um ferromagneto macio, que apresenta um valor de anisotropia magnetocristalina muito baixa. Nestes materiais, a orientação da magnetização depende da anisotropia de forma do nanomagnet [44]. Com isso, os cálculos numéricos desse modelo, admitem todas as interações dos momentos magnéticos,

desconsiderando o raio de corte, com o objetivo de calcular valores para a anisotropia de forma que se aproximem de sistemas reais. Em termos práticos, estão sendo calculados $N(N - 1)$ interações dipolares, em um sistema que contém N momentos magnéticos. Devido ao grande número de momentos magnéticos atômicos do sistema, é inviável tratar computacionalmente, as interações entre os momentos magnéticos, utilizando os parâmetros de rede real do material.

Conforme foi dito anteriormente, quando se trata de realizar simulação computacional para sistemas micromagnéticos, considera-se que o sistema é particionado em células, no qual admiti-se que estas células contém muitos momentos magnéticos. A figura abaixo exemplifica essa situação:

Figura 3.2 – Representação esquemática particionamento de um sistema magnético em célula, no qual, esta célula possui muitos momentos magnéticos. Fonte: Wysocki, 2017.



É importante ressaltar que em cada um desses volumes, “clusters”, existe um vetor magnetização local [A/m] que é dado por,

$$\vec{M}_i = \frac{1}{V} \sum_{k=1} \vec{m}_k^{atm} = \frac{1}{V_{cel}} \vec{m}_i, \quad (3.18)$$

onde V_{cel} representa o volume da célula da partição, \vec{m}_i é o momento magnético da célula i . Pode-se assumir um vetor magnetização local, devido ao fato de que para a célula de trabalho, assume-se que o alinhamento entre os momentos magnéticos da rede, é praticamente perfeito, ou seja, eles estão praticamente alinhados.

A discretização do material é realizada de maneira que respeite alguns critérios. O volume da sua célula deve ser pequeno o suficiente para que seus momentos atômicos estejam praticamente alinhados, e ao mesmo tempo, grande, se comparado com as distâncias interatômicas para conter muitos momentos magnéticos. O comprimento de troca λ , é o parâmetro do material, responsável por fornecer a informação a respeito do alcance da interação de troca, ou seja, ele nos diz qual é a distância de interação entre os momentos magnéticos da rede, no qual eles conseguem manter o alinhamento dos momentos magnéticos em uma mesma direção. A expressão do comprimento de troca é dado por

$$\lambda_{exc} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}}, \quad (3.19)$$

onde M_s representa a magnetização de saturação do material, e para o Permalloy-79, o seu valor é de $M_s = 8,6 \cdot 10^5$ [A/m] A é a dureza da constante de troca, e seu valor para o Permalloy-79 é $A = 13 \cdot 10^{-12}$ [J/m]. O comprimento de troca (λ_{exc}) para o Permalloy é de $\lambda_{exc} = 5,3$ nm. Alguns parâmetros do Permalloy-79 são mostrados na Tabela 3.1:

Tabela 3.1 – Valores das constantes fundamentais do material Permalloy-79 utilizado na fabricação das nanoilhas.

Parâmetros do Permalloy-79		
Grandeza	Símbolo	Valor adotado
Comprimento de Troca	λ	5,3 nm
Parâmetro de rede Micromagnético	$a < \lambda$	5,0 nm
Magnetização de saturação	M_s	$8,6 \times 10^5$ A/m
Parâmetro de amortecimento	α	0,01
Dureza de troca	A	$1,3 \times 10^{-11}$ J/m

A escolha de um parâmetro de rede, que não seja adequado para o sistema, pode acarretar em uma discretização, que não consiga otimizar a relação entre momentos magnéticos por volume de célula cúbica. A definição do parâmetro a de rede é feita tendo-se conhecimento do comprimento de troca do material λ , pois é através dele que se tem conhecimento da distância

no qual é possível obter o alinhamento dos momentos magnéticos atômicos em uma mesma direção (magnetização saturada). Neste trabalho, considera-se $a = 5,0\text{nm}$, um valor abaixo do comprimento de troca do Permalloy-79, justamente para garantir o alinhamento dos momentos magnéticos nas células de partição.

Cada célula apresenta aproximadamente o mesmo número de momentos atômicos e os vetores de magnetização só variam de uma célula para a outra, com isso, pode-se escrever o vetor momento magnético da célula da seguinte maneira,

$$\vec{m}_i = |\vec{m}_i| \hat{m}_i = m \hat{m}_i = (M_s V) \hat{m}_i, \quad (3.20)$$

onde \hat{m}_i representa um versor na direção e sentido da saturação.

3.3.1 INTERAÇÃO ENTRE AS CÉLULAS

Seguindo os passos da referência [57], a constante da interação de troca entre os momentos magnéticos das células será obtido. Partindo do limite contínuo do modelo de Heisemberg isotrópico sobre uma rede cúbica simples, obtém se a energia de troca que é dada por:

$$H_{exc} = A \int dv \left(|\vec{\nabla} m_x|^2 + |\vec{\nabla} m_y|^2 + |\vec{\nabla} m_z|^2 \right) \quad (3.21)$$

em que os primeiros vizinhos do momento magnético que está localizado na origem $\vec{m}(\hat{0})$, são respectivamente $\pm a\hat{x}$, $\pm a\hat{y}$ e $\pm a\hat{z}$. A energia de troca para a equação (3.21), usando o método da diferença finita na aproximação de mais baixa ordem para a equação, é dada por

$$H_{exc}^{cel} = AV_{cel} \left[\left(\frac{\vec{m}(a\hat{x}) - \vec{m}(\hat{0})}{a} \right)^2 + \left(\frac{\vec{m}(a\hat{y}) - \vec{m}(\hat{0})}{a} \right)^2 + \left(\frac{\vec{m}(a\hat{z}) - \vec{m}(\hat{0})}{a} \right)^2 \right]. \quad (3.22)$$

Na equação (3.22), estão sendo consideradas apenas os três primeiros vizinhos. Utilizando a seguinte propriedade $|\vec{A} - \vec{B}|^2 = |\vec{A}|^2 - 2\vec{A} \cdot \vec{B} + |\vec{B}|^2$, obtemos,

$$\begin{aligned} H_{exc}^{cel} = & Aa \left[|\vec{m}(a\hat{x})|^2 - 2\vec{m}(a\hat{x})\vec{m}(0) + |\vec{m}(0)|^2 + |\vec{m}(a\hat{y})|^2 - 2\vec{m}(a\hat{y})\vec{m}(0) + |\vec{m}(0)|^2 \right. \\ & \left. + |\vec{m}(a\hat{z})|^2 - 2\vec{m}(a\hat{z})\vec{m}(0) + |\vec{m}(0)|^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Agrupando os termos,

$$H_{exc}^{cel} = Aa \left[|\vec{m}(a\hat{x})|^2 + |\vec{m}(a\hat{y})|^2 + |\vec{m}(a\hat{z})|^2 + 3|\vec{m}(0)|^2 - 2\vec{m}(0) \cdot \{\vec{m}(\hat{x}) + \vec{m}(\hat{y}) + \vec{m}(\hat{z})\} \right]. \quad (3.24)$$

Nos cálculos, assume-se que \vec{m} foi saturado a M_s (quando se particiona o sistema, isso equivale ao alinhamento dos momentos magnéticos atômicos). Além disso, ainda se tem que \vec{m} é um versor de tamanho 1 ($|\vec{m}| = 1$). Com essas considerações, obtém-se, que a contribuição de energia por célula (H_{exc}^{cel}) será

$$H_{exc}^{cel} = Aa \left[6 - 2\hat{m}(0) \cdot \{\hat{m}(a\hat{x}) + \hat{m}(a\hat{y}) + \hat{m}(a\hat{z})\} \right]. \quad (3.25)$$

A contribuição por ligação (para as direções x,y,z) será, então,

$$H_{exc}^{lig-x} = 2Aa \left[3 - \hat{m}(0) \cdot \hat{m}(a\hat{x}) \right] \quad (3.26)$$

$$H_{exc}^{lig-y} = 2Aa \left[3 - \hat{m}(0) \cdot \hat{m}(a\hat{y}) \right] \quad (3.27)$$

$$H_{exc}^{lig-z} = 2Aa \left[3 - \hat{m}(0) \cdot \hat{m}(a\hat{z}) \right] \quad (3.28)$$

Isso demonstra que o acoplamento de troca entre as células será

$$J_{cel} = 2Aa. \quad (3.29)$$

Até o momento, todo o desenvolvimento matemático apresentado anteriormente, considera que a interação entre os momentos magnéticos possui um módulo m idênticos. Logo, é necessário fazer a seguinte transformação $m \rightarrow M_s V_{cel}$, definindo o parâmetro de rede a da célula de partição adequado para aquele particionamento e utilizando o valor de M_s do respectivo material a ser estudado.

Assim, a hamiltoniana micromagnética pode ser escrita como,

$$H_{exc} = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j. \quad (3.30)$$

a hamiltoniana da interação dipolar, é dada pela seguinte expressão

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \frac{\mu_0 m_{cell}^2}{4\pi a^3} \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right). \quad (3.31)$$

O próximo passo é definir a constante de interação dipolar em termos de J e da constante de troca,

$$D_{cel} = \frac{\mu_0 m_{cel}^2}{4\pi a^3} = \frac{\mu_0 (V_{cel} M_S)^2}{4\pi a^3}. \quad (3.32)$$

Após realizar a manipulação matemática com alguns termos da equação acima, obtemos,

$$D_{cel} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 J_{cel}. \quad (3.33)$$

A hamiltoniana de interação Zeeman pode ser escrita da seguinte maneira,

$$H_{ext} = -m_{cel} \mu_0 M_S \left(\sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext} \right) \quad (3.34)$$

onde o campo externo adimensional \vec{h}_i^{ext} , é definido como,

$$\vec{h}_i^{ext} = \frac{1}{\mu_0 M_S} \vec{H}_i^{ext}. \quad (3.35)$$

A constante de interação Zeeman, assim como as demais, também deve ser renormalizada, de forma a ficar definida em termos do novo parâmetro de rede. Logo, com alguma manipulação algébrica, obtém-se,

$$Z = m_{cel} \mu_0 M_S = a^2 \left(\frac{\mu_0 M_S^2}{2A} \right) 2Aa \quad (3.36)$$

Reescrevendo a constante de interação Zeeman em termos de J , encontra-se,

$$Z = \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 J_{cel} \quad (3.37)$$

Todas as constantes de interação definidas anteriormente, possuem dimensão de energia [J].

A hamiltoniana micromagnética do sistema, contendo todas as interações, é escrita com a soma de todas as contribuições:

$$H = J_{cel} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{1}{2} \frac{D_{cel}}{J_{cel}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \frac{m_{cel} \mu_0 M_S}{J_{cel}} \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext} \right\}. \quad (3.38)$$

Substituindo as equações (3.33) e (3.37) na equação (3.38), obtém-se,

$$H = J_{cel} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext} + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{i,j} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\} \quad (3.39)$$

O termo que se encontra entre chaves pode ser definido como H' , ele é o hamiltoniano adimensional do sistema H' ,

$$H = J_{cel} H' \quad (3.40)$$

Com isso, o campo efetivo local \vec{H}_i em cada sítio, medido em Tesla [A/m], é obtido após derivar a hamiltoniana em relação as componentes dos momentos magnéticos das células \vec{m}_i ,

$$\vec{H}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i} = -\frac{J_{cel}}{m} \frac{\partial H'}{\partial \hat{m}_i} = \frac{J_{cel}}{m} \vec{h}_i \quad (3.41)$$

O campo efetivo local adimensional, é dado por

$$\vec{h}_i = -\frac{\partial H}{\partial \hat{m}_i} = \frac{\partial}{\partial \hat{m}_i} \left\{ +\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{i,j} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} \right\}, \quad (3.42)$$

simplificando a equação, encontramos

$$\vec{h}_i = -\frac{\partial H}{\partial \hat{m}_i} = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{j=1, j \neq i}^N \left[\frac{3(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})\hat{r}_{ij} - (\hat{m}_j)\hat{r}_{ij}}{(r_{ij}/a)^3} \right] + \frac{1}{2} \sum_{j=1, j \neq i}^N \hat{m}_j + \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \vec{b}_i^{ext}. \quad (3.43)$$

Então, o campo adimensional pode ser escrito da seguinte forma,

$$\vec{h}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N C_{ij} \hat{m}_j + \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{j=1, j \neq i}^N \left[\frac{3(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij} - \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} \right] + \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \vec{b}_i^{ext}, \quad (3.44)$$

onde o C_i é tal que

$$C_{ij} = C_{ji} = \begin{cases} 1, & \text{se } i, j \text{ são primeiros vizinhos;} \\ 0, & \text{para demais casos.} \end{cases} \quad (3.45)$$

A relação entre o campo magnético efetivo adimensional no sítio i e o campo magnético H_i é

$$\vec{H}_i = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i} = -\frac{J}{\mu_0 m} \frac{\partial H'}{\partial \hat{m}_i} = \frac{J}{\mu_0 m} \vec{h}_i, \quad (3.46)$$

na expressão acima temos $J = 2Aa$ e $m = M_S V_{cel} = M_S a^3$. Com isso, podemos definir uma constante de conversão β entre esses dois campos que é dada por

$$\beta = \frac{J}{\mu_0 m} = \frac{2Aa}{\mu_0 M_S a^3} = \left(\frac{2A}{\mu_0 M_S^2} \right) \frac{M_S}{a^2} = \left(\frac{\lambda}{a} \right)^2 M_S. \quad (3.47)$$

Desta forma, o campo magnético efetivo H_i está relacionado com o campo de indução magnética efetiva \vec{B}_i através da seguinte relação,

$$\vec{H}_i = \frac{\vec{B}_i}{\mu_0} = \beta \vec{h}_i. \quad (3.48)$$

A dinâmica da magnetização, é governada pelas equações fenomenológicas. Neste presente trabalho, utiliza-se a versão discreta da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG). Logo, é necessário reescrever a equação LLG de uma maneira adimensional segundo os parâmetros da aproximação micromagnética para que o conjunto de equações possa ser implementado neste sistema. Em relação a equação (3.16), é possível modificá-la para o modelo discreto de partição, para fazer isso, se faz necessário substituir as expressões dos momentos magnéticos das células de partição equação (3.20) e o campo magnético efetivo da equação (3.48) da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} &= -\frac{\mu_0}{1 + \gamma^2} \left[(\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{m_i} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) \right] \\ \frac{m}{\gamma} \frac{d\hat{m}_i}{dt} &= -\frac{\mu_0}{1 + \alpha^2} \left[(m\hat{m}_i \times (\beta\vec{h}_i)) + \frac{\alpha}{m} m^2 \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times (\beta\vec{h}_i)) \right] \end{aligned} \quad (3.49)$$

$$\frac{d\hat{m}_i}{dt} = -\mu_0\beta\gamma \left\{ \frac{1}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{h}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{h}_i) \right] \right\}. \quad (3.50)$$

Na equação (3.50), o parâmetro de amortecimento do material é um termo adimensional. Com isso, os termos que estão entre chaves também não possui unidades de medida, então, $\mu_0\beta\gamma$ devem possuir a mesma unidade do lado esquerdo, que é o inverso do tempo [1/s],

$$(\mu_0\beta)(\gamma) \rightarrow [T] \left[\frac{1}{T.s} \right] = \left[\frac{1}{s} \right]. \quad (3.51)$$

Definindo o parâmetro ν que possui unidades de inverso do tempo,

$$\nu = \mu_0\beta\gamma = \mu_0 M_S \gamma \left(\frac{\lambda}{a} \right)^2. \quad (3.52)$$

O parâmetro é usado para realizar a conversão entre tempo computacional adimensional e tempo real. O incremento de tempo computacional adimensional $d\tau$ possui a seguinte forma,

$$d\tau = \nu dt. \quad (3.53)$$

Realizando as substituições $\mu_0\beta\gamma \rightarrow \nu$ e $\nu dt \rightarrow d\tau$ na equação(3.50), obtemos,

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = -\frac{1}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{h}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{h}_i) \right]. \quad (3.54)$$

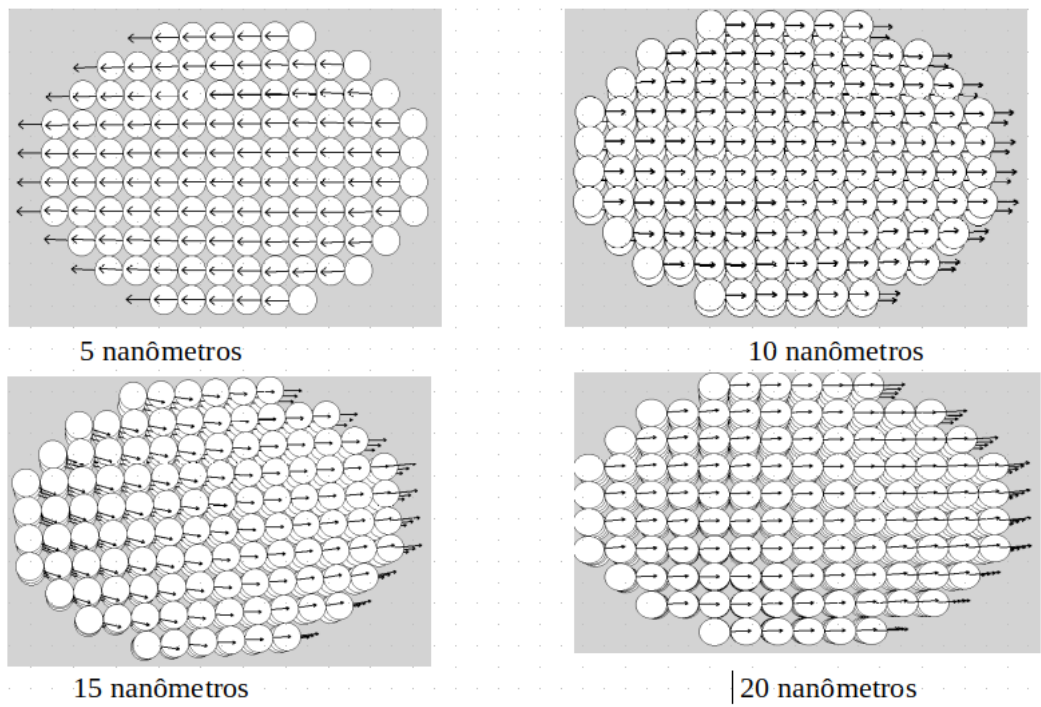
Esta equação é a versão adimensional da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert. O valor do parâmetro de amortecimento para o Permalloy-79 aplicado neste trabalho é de $\alpha = 0,01$. Este valor é usualmente utilizado tanto em trabalhos experimentais [58] quanto teóricos [59–62].

4 *RESULTADOS*

As próximas seções, irão mostrar os resultados obtidos neste trabalho. Inicialmente serão apresentados os resultados obtidos para a inversão da magnetização mediante a aplicação de um campo magnético externo, em uma única nanoelipse isolada. Na sequência, serão apresentadas as configurações iniciais tipo Ising para 7 nanoelipses, dentre as configurações, uma satisfaz a regra do gelo.

Foram utilizadas nanoelipses com duas razões de aspecto ($q = \frac{L_x}{L_y}$), uma de $q = 1,4$ que corresponde a $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$ e a outra com razão de aspecto de $q = 1,83$ que corresponde a $110 \times 60 \times e \text{ nm}^3$, as suas espessuras e variam respectivamente de 5 a 20 nm como se observa na Figura 4.1. O espaçamento borda a borda entre as nanoelipses, variou de 20 em 20 nm.

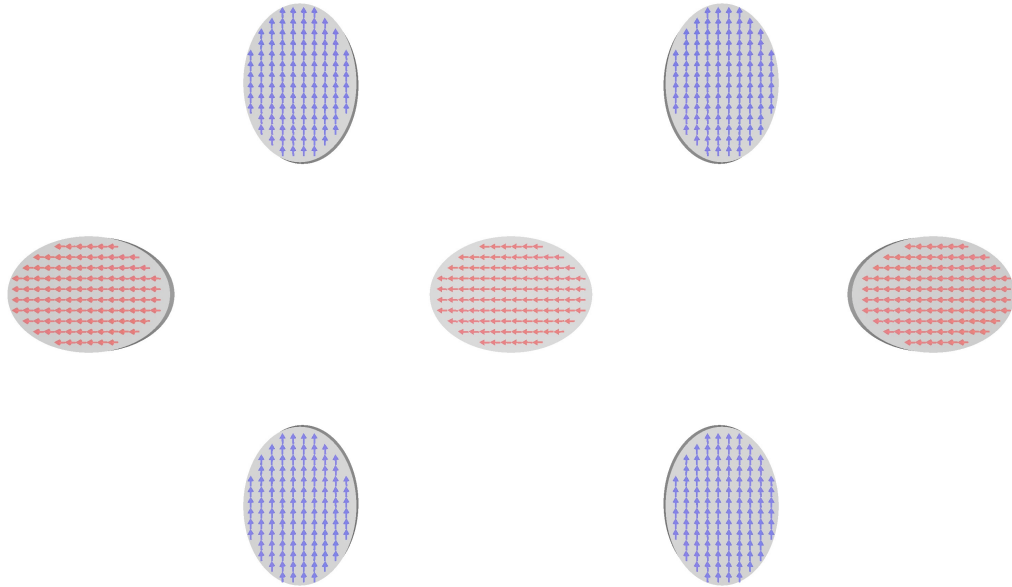
Figura 4.1 – Imagem ilustrativa das nanoelipses com espessuras que variam de 5 a 20 nm.



Todas as nanoelipses utilizadas neste trabalho, foram simuladas com os parâmetros do material Permalloy-79. As razões de aspecto das nanoelipses, favorecem que o estado da magnetização esteja alinhado ao longo do seu eixo maior, resultando que a magnetização no seu estado de equilíbrio tenha domínio único.

Uma matriz composta por nanoelipses foi gerada. A forma com que as sete nanoelipses estão dispostas na matriz, favorece que a regra do gelo seja satisfeita em cada vértice (dois momentos magnéticos apontando na direção do vértice e dois apontando em sentido oposto), como é mostrado na Figura 4.2.

Figura 4.2 – Matriz contendo sete nanoelipses, em que as elipses possuem um espaçamento S borda a borda.



Nesta seção, serão apresentados resultados referentes a reversão da magnetização das nanoilhas individuais sob a aplicação de um campo magnético externo na forma de pulsos gaussianos curtos.

As nanoilhas estudadas possuem dimensões típicas de monodomínio, o que faz com que a forte anisotropia de forma resultante das interações dipolares confine a magnetização para o estado fundamental ao longo do eixo maior da magnetização. O parâmetro de rede utilizado nas simulações foi de $a = 5,0$ nm, isso permite que nanoilhas com dimensões múltiplas de 5,0nm sejam simuladas. Foram utilizadas nanoelipses com espessuras de 5 nm, 10 nm, 15 nm e 20 nm para duas razões de aspecto fixas, $q = 1,4(70 \times 50 \times e \text{ nm}^3)$ e $q = 1,83(110 \times 60 \times e \text{ nm}^3)$.

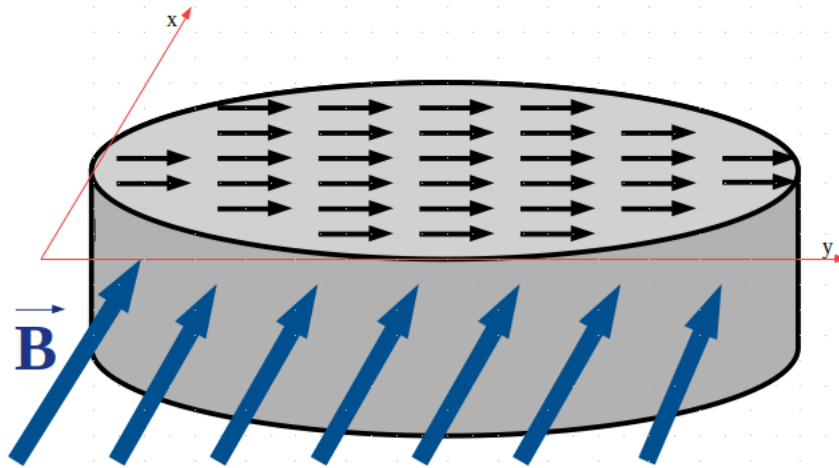
Estudamos o processo de reversão da magnetização aplicando um pulso de campo magnético homogêneo com perfil gaussiano em um ângulo de 90° (Figura 4.3) no plano em que os momentos magnéticos estão contidos (plano xy). Os pulsos de campo magnético na forma gaussiana,

tem módulo dado por

$$\left| \vec{H}_i^{ext} \right| = \left| \vec{H}(t) \right| = H_0 e^{-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}}. \quad (4.1)$$

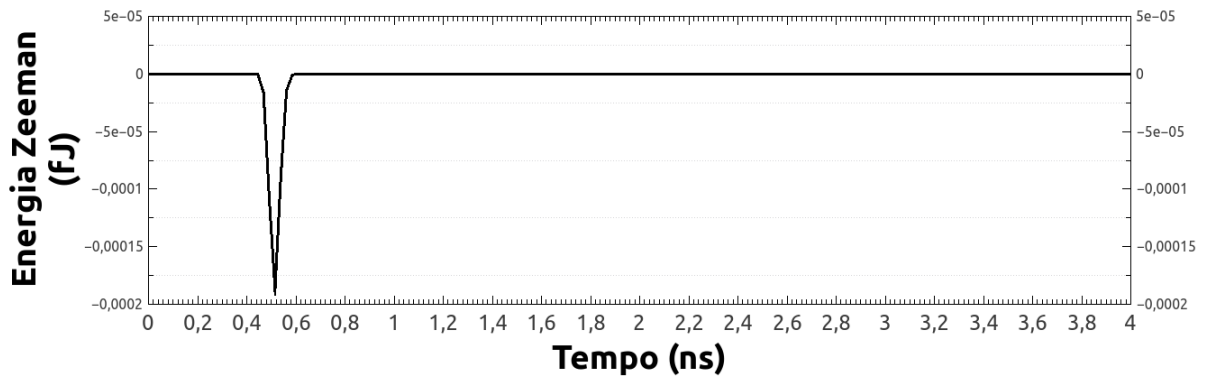
Na equação acima, H_0 representa a amplitude do pulso, a duração desse pulso é de 0,2 ns ($\sigma = 0.25$ ps). Esses pulsos de campo magnético externo foram aplicados em um ângulo de $\theta = 90^\circ$, vale ressaltar ainda que esse campo magnético externo aplicado deve ser o mínimo possível para gerar a inversão da magnetização de precessão das nanoelipses.

Figura 4.3 – Vista esquemática da direção do campo magnético aplicado.



Foi adotado o ângulo para a aplicação do campo magnético externo ($\theta = 90^\circ$), pois, em estudos anteriores [6], foi verificado que com esse ângulo, consegue-se inverter a magnetização de precessão aplicando um baixo campo magnético, além de que, a inversão da magnetização na elipse acontece com altos índices de coerência. Como o termo da energia Zeeman só existe quando se tem um campo magnético externo aplicado, o seu gráfico em função do tempo (Figura 4.4), fornece a informação do tempo no qual o pulso de campo magnético é aplicado.

Figura 4.4 – Energia Zeeman para única Nanoelipse.



4.1 ESTUDO DE UMA NANOELIPSE ISOLADA

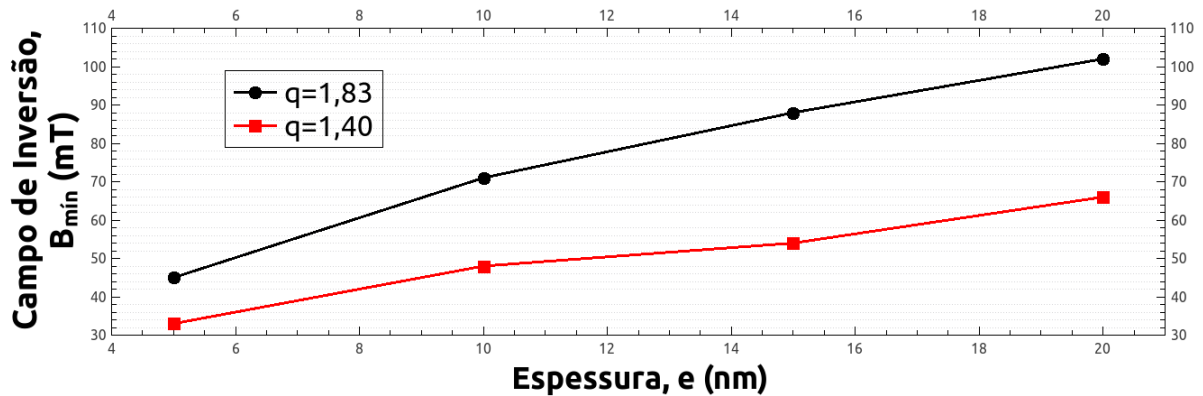
Foram encontrados valores mínimo de campo magnético externo que são suficientes para inverter a magnetização destas nanoilhas. Após gerar a nanoilha com a magnetização ordenada de maneira distinta (algumas nanoelipses com o sentido da magnetização ao longo do eixo positivo do eixo comprido, outras nanoelipses com a magnetização orientada ao longo do eixo x no sentido negativo.), ela atingiu a configuração de equilíbrio após um intervalo de tempo de 4 ns. Com a magnetização da nanoelipse no seu estado de equilíbrio foi aplicado um pulso de campo magnético externo. Esses valores podem ser encontrados na Tabela 4.1:

Tabela 4.1 – Campo Magnético Mínimo de Reversão para uma única nanoelipse isolada. Os valores dos campos magnéticos externos H_{min}^{ext} são da ordem de mT.

Dimensão	H_{min}^{ext}	Dimensão	H_{min}^{ext}
(nm ³)	(mT)	(nm ³)	(mT)
70 × 50 × 5	33	110 × 60 × 5	46
70 × 50 × 10	49	110 × 60 × 10	71
70 × 50 × 15	68	110 × 60 × 15	91
70 × 50 × 20	69	110 × 60 × 20	102

O campo magnético mínimo aplicado varia de acordo a razão de aspecto e a espessura da nanoelipse como é mostrado na Figura 4.5:

Figura 4.5 – Valores mínimos do campo magnético externo, responsáveis por provocar a inversão da magnetização nas nanoelipses com razão de aspecto de $q = 1.4$ e 1.83 .



Na Figura 4.5, temos os valores mínimos de campo magnético externo para provocar a inversão da magnetização de uma nanoelipse isolada. Pode-se verificar que a medida em que se aumenta a espessura da nanoelipse, também aumentam os valores do campo magnético externo. Isso ocorre para as elipses com razões de aspecto $q = 1,40$ e $q = 1,83$. Abaixo, podemos verificar nas Figuras 4.6 e 4.7 que esses campos foram suficientes para inverter a magnetização da nanoelipse.

Figura 4.6 – Reversão da magnetização para uma única nanoelipse com dimensão de $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$ e espessura variando de 5 a 20 nm, após a aplicação do menor campo magnético externo possível.

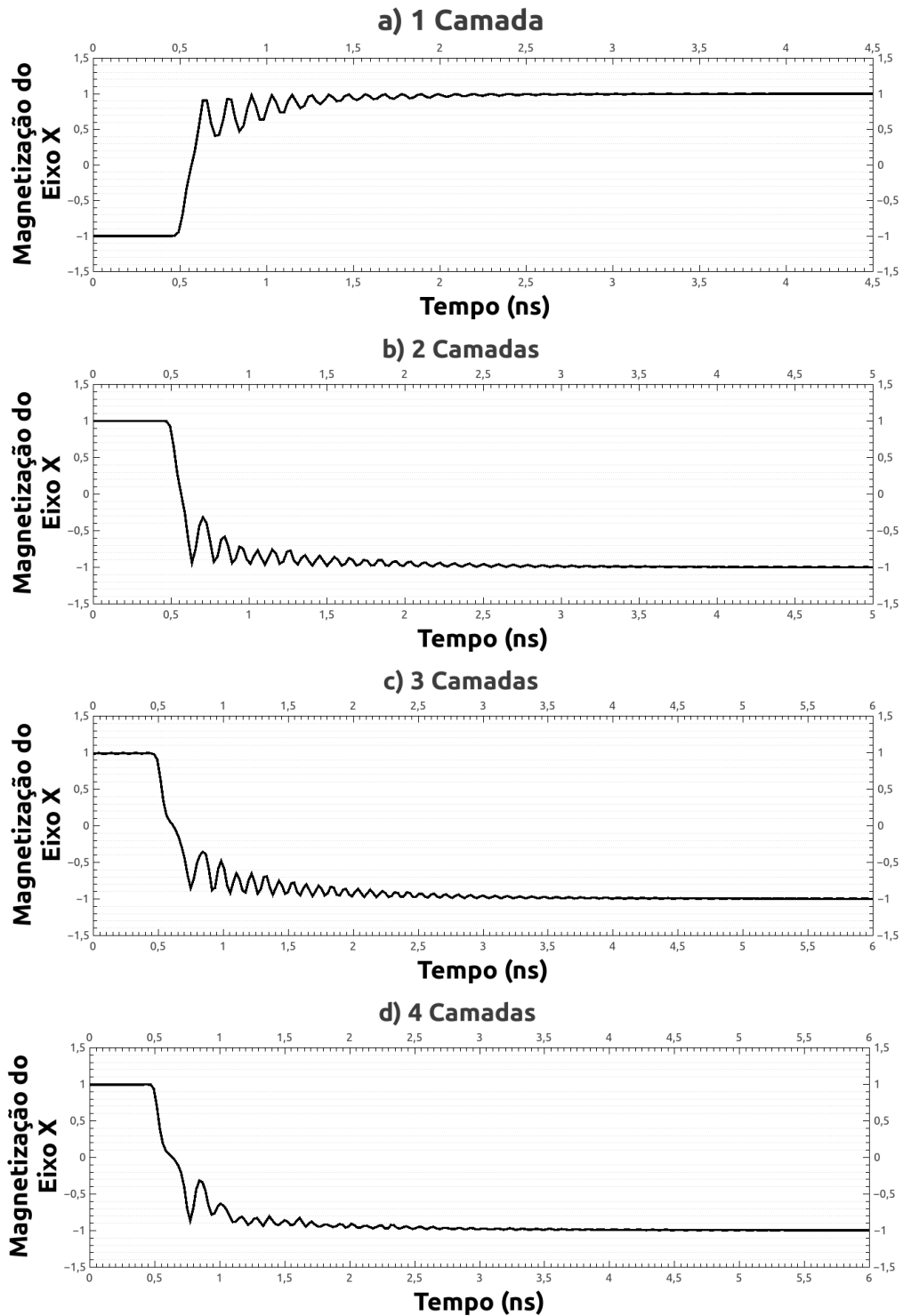
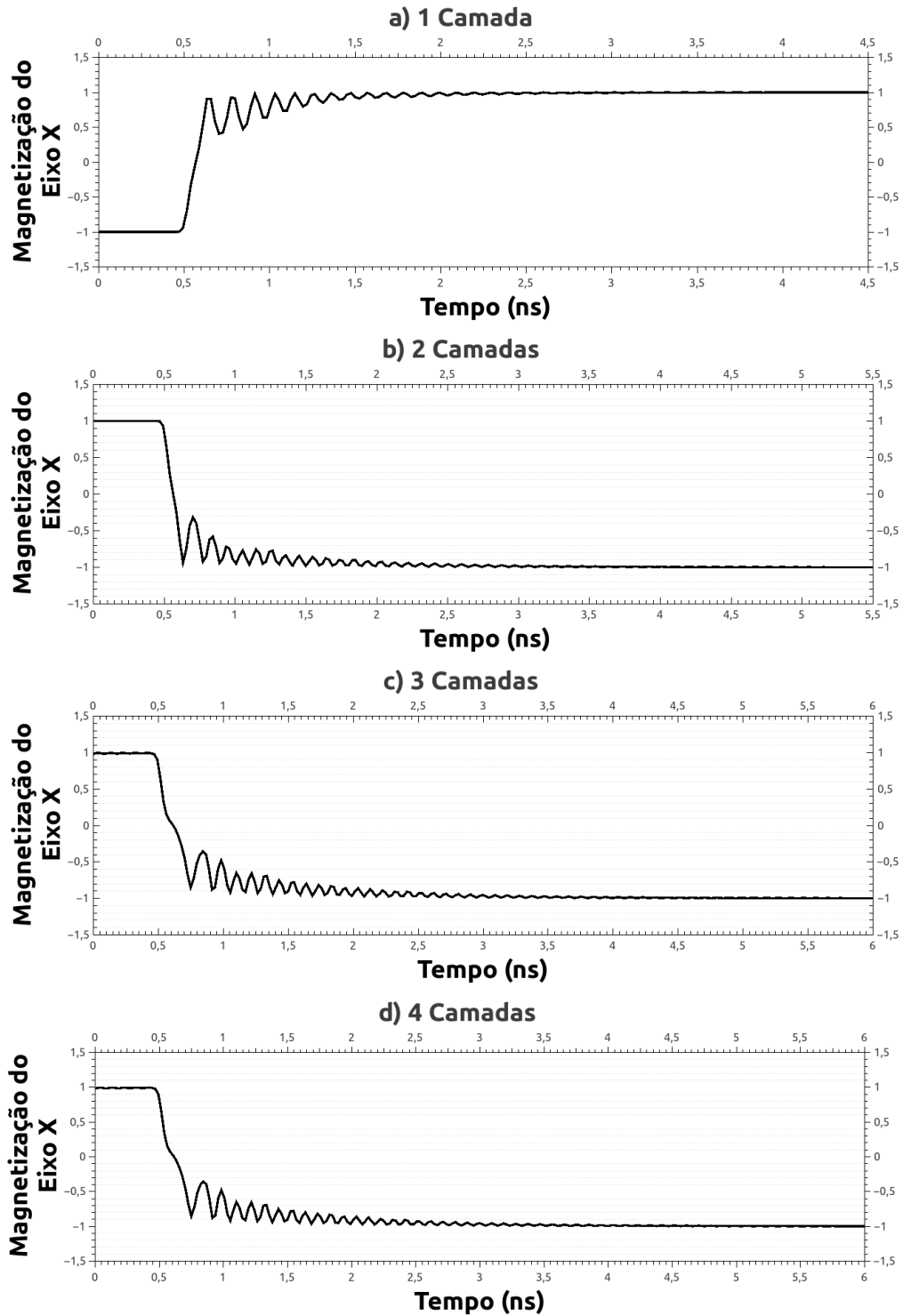


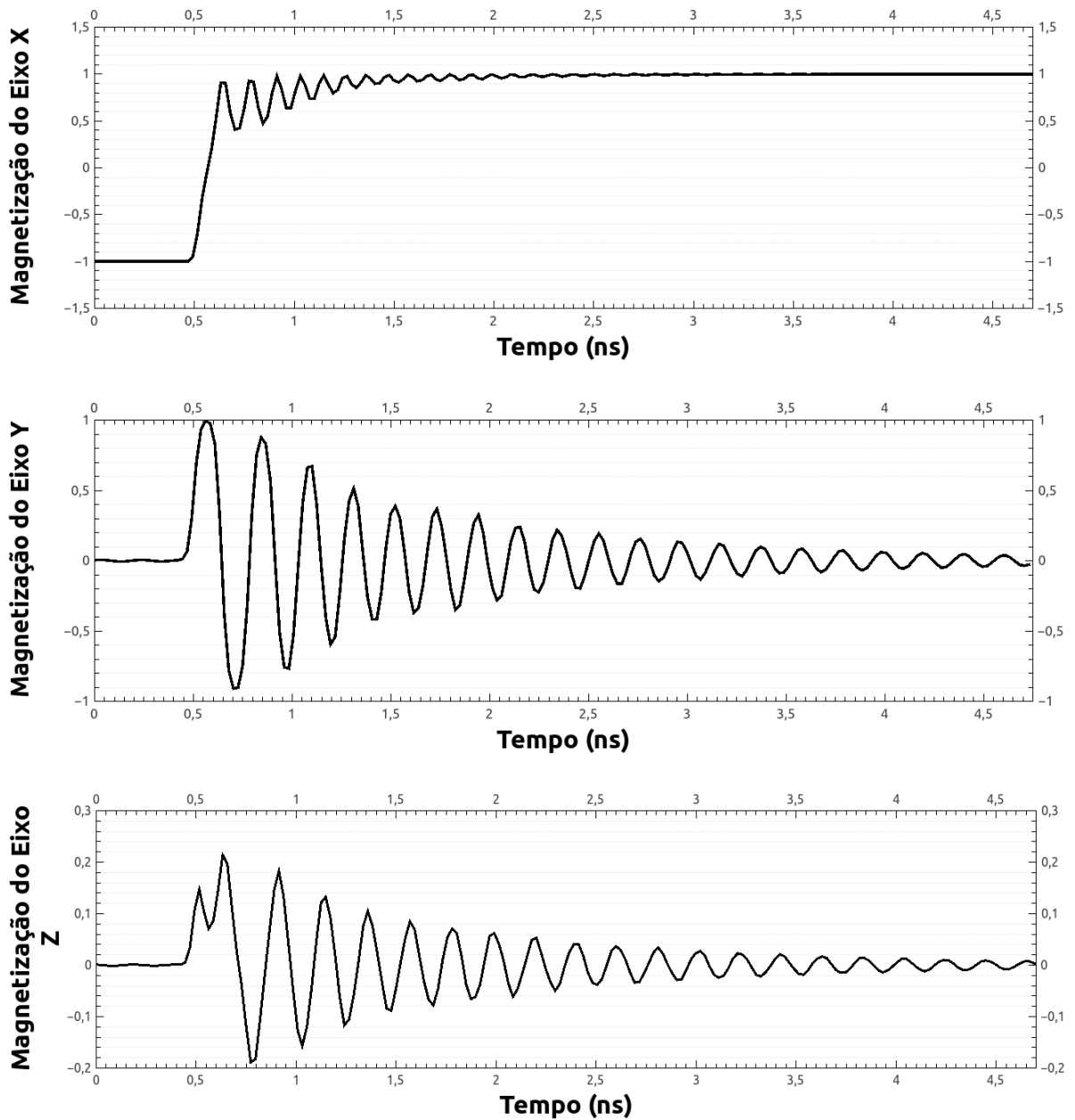
Figura 4.7 – Reversão da magnetização para uma única nanoelipse com dimensão de $110 \times 60 \times e \text{ nm}^3$ e espessura variando de 5 a 20 nm, após a aplicação do menor campo magnético externo possível.



Através das Figuras 4.6 e 4.7, nota-se que, para uma nanoelipse isolada, de razão de aspecto 1,4 e 1,83, a nanoelipse leva em média 4 ns para inverter o sentido da sua magnetização, e logo após, atingir o estado de monodomínio, que representa o estado menos energético para as configurações dos momentos magnéticos. Todas essas inversões na magnetização, acontecem com valores de índice de coerência (I_{coe} , será discutido na sequência) bem próximos a 1.

Na Figura 4.8, é possível observar o comportamento da magnetização no eixo x e no eixo y. No eixo x, nota-se a inversão no sinal da magnetização, enquanto que, no eixo y, percebe-se que a magnetização em torno de um ponto de equilíbrio, até atingir a posição menos energética.

Figura 4.8 – Componentes da magnetização referentes ao eixo x , y e z .

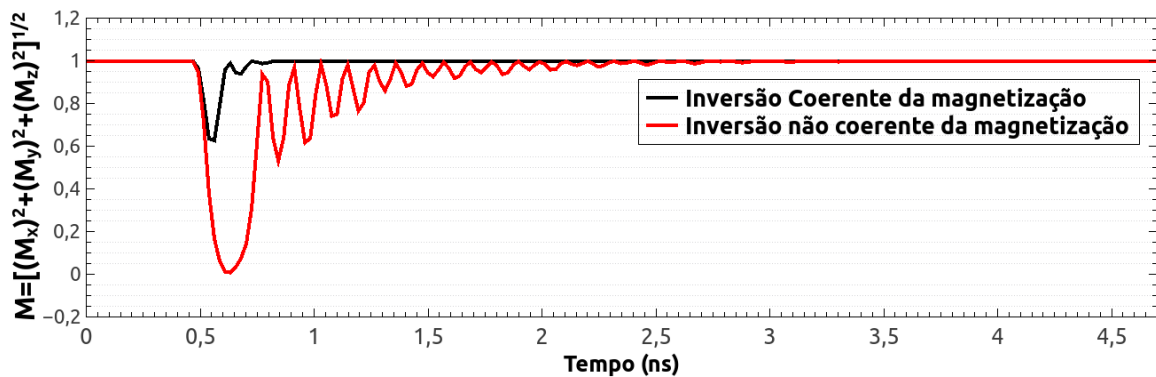


Analisaremos o processo de reversão da magnetização através do **índice de coerência** [44, 63]. Este parâmetro é definido através da equação (4.2),

$$I_{coe} = \min \left(\left| \vec{M} \right| \right) = \min \left(\sqrt{(M_x)^2 + (M_y)^2} + (M_z)^2 \right), \quad (4.2)$$

Na equação (4.2), $\min(|\vec{M}|)$ representa o valor mínimo do vetor magnetização reduzida. Quando a magnetização acontece de maneira totalmente coerente, esse índice tem valor 1 ($I_{Coe} = 1$). Por outro lado, quando não se tem coerência, esse valor tende a zero ($I_{Coe} = 0$). A Figura 4.9 mostra o exemplo da medição do Índice de Coerência.

Figura 4.9 – A evolução temporal da magnitude reduzida do vetor de magnetização durante uma inversão de magnetização. Um exemplo da medição do índice de coerência.

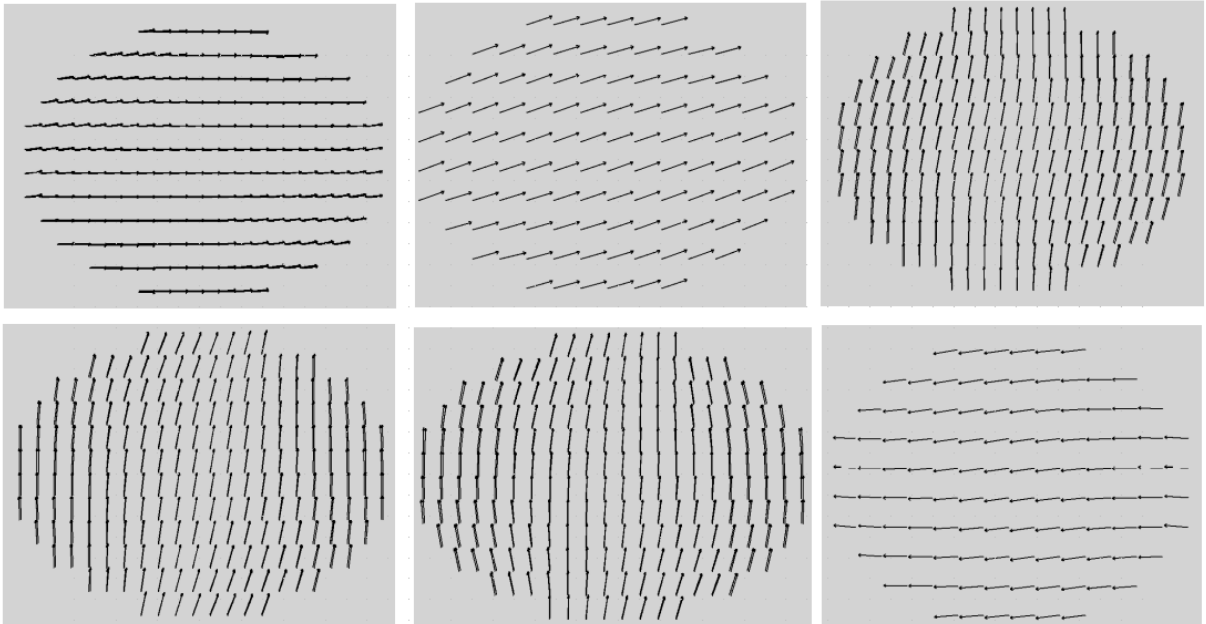


Essas afirmações significam que, quando se tem uma reversão coerente, com valores de I_{Coe} próximos a 1, os mecanismos de reversão da magnetização consiste na rotação de maneira sincronizada dos momentos magnéticos. Desta maneira a magnetização da nanoilha se comporta como um grande momento magnético inclusive durante o processo de inversão no seu sentido de orientação [6].

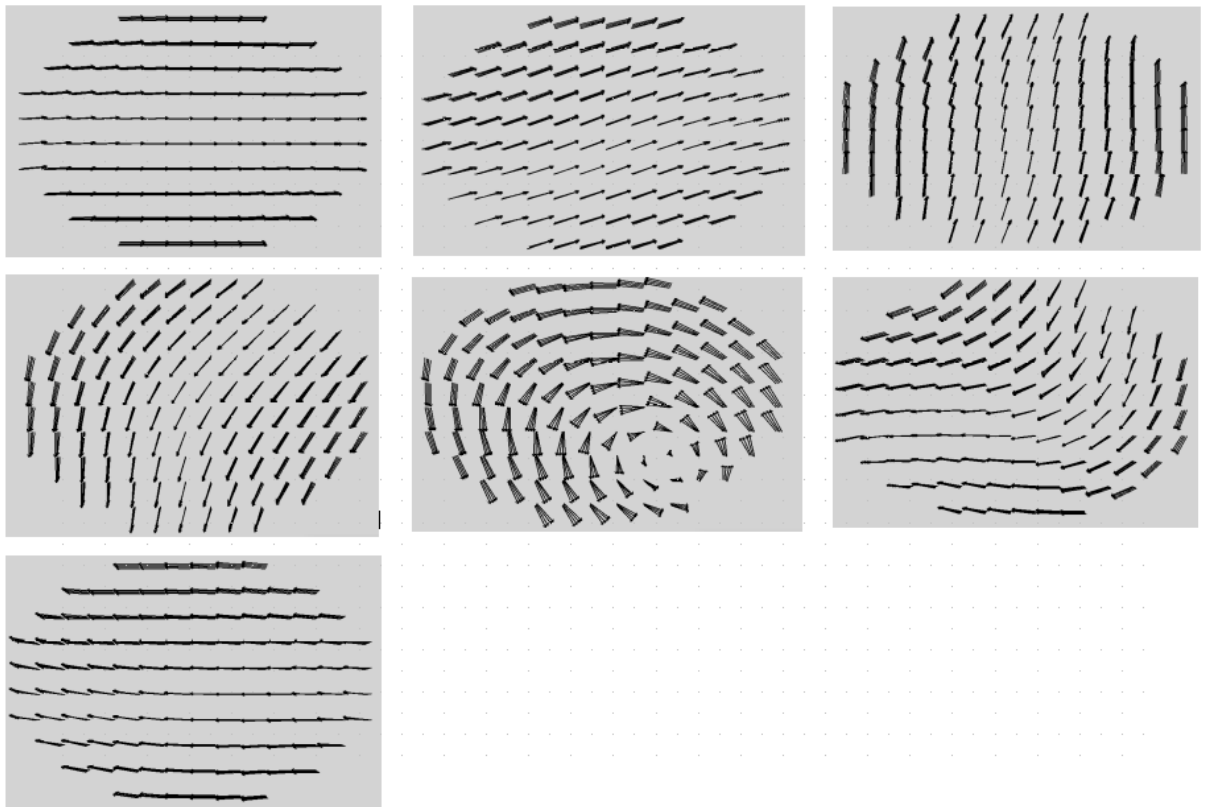
Na Figura 4.10 temos exemplos de quando o processo de inversão acontece de forma coerente e de quando isso não acontece.

Figura 4.10 – Processos de inversão da magnetização dos momentos magnéticos da elipse. A Figura 4.10a representa um processo em que se tem uma inversão da magnetização de maneira coerente. A Figura 4.10b mostra um processo de inversão da magnetização de maneira não coerente, apresentando um estado de vórtice.

(a) Processo coerente da inversão da magnetização de maneira coerente.

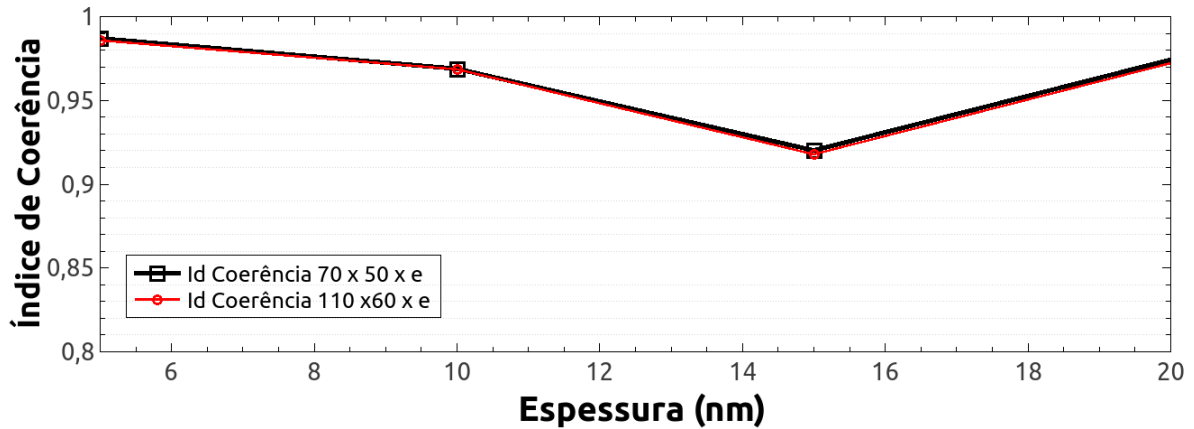


(b) Processo não coerente da inversão da magnetização apresentando vórtice.



Desta forma, os índices de coerência obtidos neste trabalho são mostrados na Figura 4.11.

Figura 4.11 – Valores do índice de Coerência para nanoelipses com razão de aspecto de $q = 1,4$ e $q = 1,83$. Seus valores variam para cada espessura analisada.



O gráfico da Figura 4.11 revela os valores de Índice de Coerência encontrado para as duas razões de aspecto das nanoilhas variando apenas a sua espessura em 5, 10, 15 e 20 nm. Os valores encontrados estão bem próximos do valor ideal que seria 1. Notou-se que a nanoelipse com 15 nm de espessura apresentou uma queda acentuada em comparação com as outras espessuras, no entanto, permaneceu com um índice de coerência próximo a 1.

4.2 ANÁLISE DAS CONFIGURAÇÕES DE GELO DE SPIN

As nanopartículas que estão sendo estudadas neste trabalho, são unidades de estudo de sistemas muito interessantes, dentre esses sistemas, se destacam os chamados gelos de spin artificiais (spin-ice), pois apresentam características interessantes principalmente devido ao caráter de baixa energia que apresenta quando comparado a outras configurações. Com isso, foram criadas matrizes composta por sete nanomagnetos, em que só uma atende a regra do gelo de spin. Desta forma, a orientação dos momentos magnéticos foram alternados, produzindo cinco configurações diferentes que são mostradas nas Figuras 4.12 e 4.13.

Diante das configurações apresentadas nas Figura 4.12, 4.13 e 4.14 um estudo sobre a energia do sistema foi realizado, de tal forma que as energias destes sistemas foram comparadas

entre si. Diante dessas configurações, apenas a Configuração (a) da Figura 4.12 satisfaz a regra do gelo de spin. Para analisar as energias das configurações, gerou-se as cinco configurações, deixando em seguida o sistema atingir o equilíbrio. Esse procedimento é ilustrado na Figura 4.15 e 4.16.

Figura 4.12 – Matrizes composta por nanomagnetos com formato elíptico, a figura **a** apresenta a configuração de spin ice. A Figura **b**, apresenta uma configuração que não satisfaz a regra do gelo de spin.

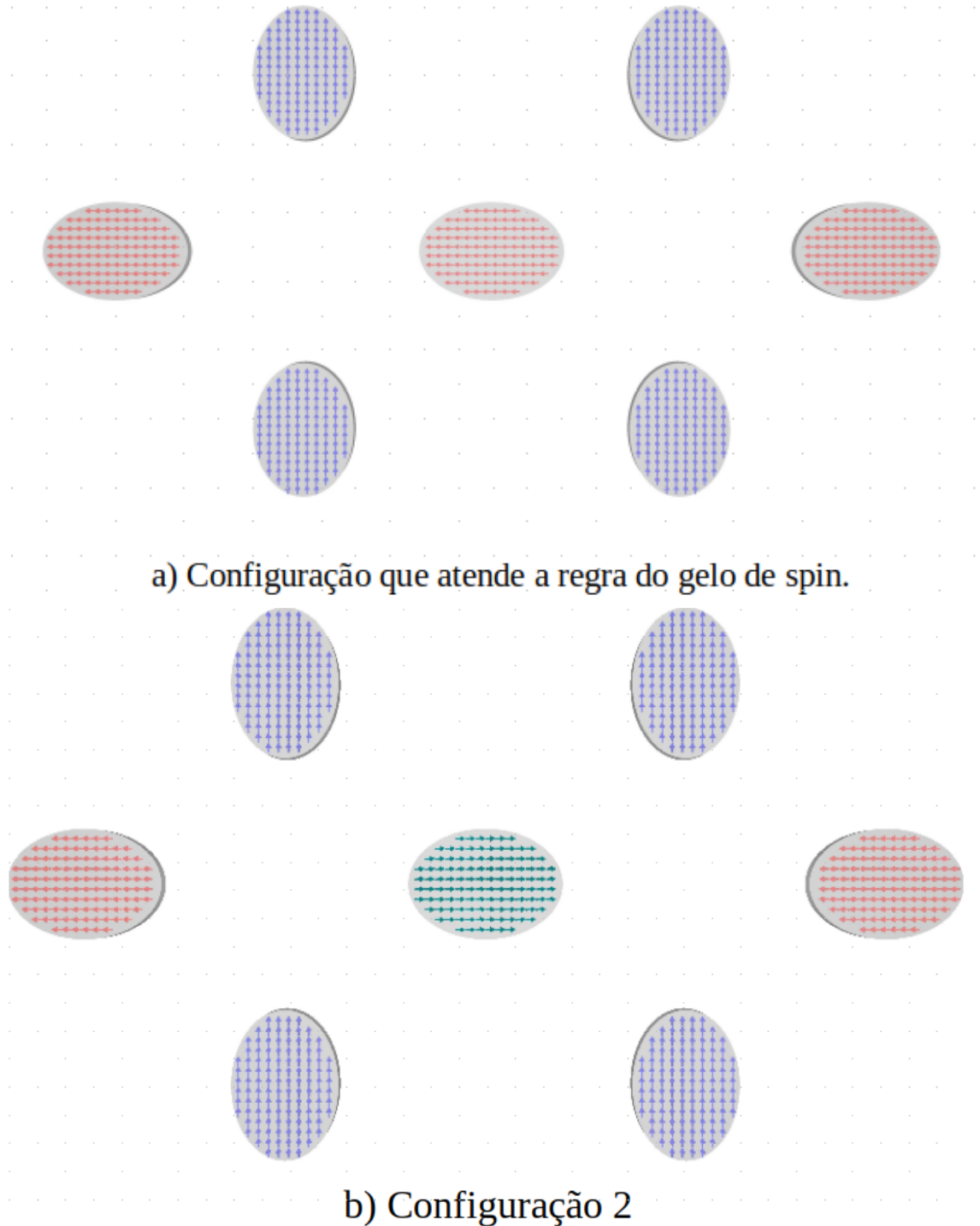


Figura 4.13 – Matrizes composta por nanomagnetos com formato elíptico, as Figuras *c* e *d* apresentam configurações que não satisfazem a regra do gelo de spin.

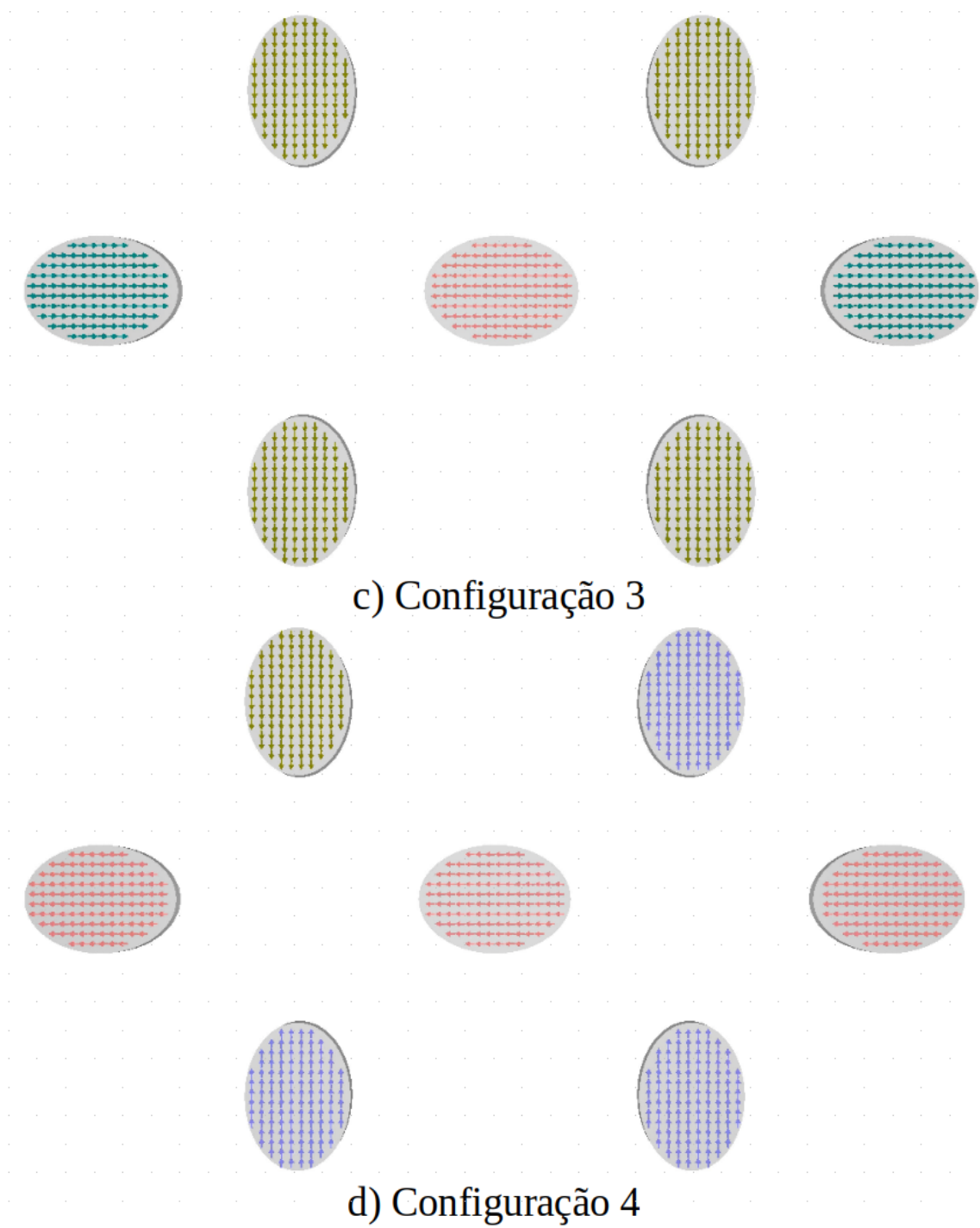


Figura 4.14 – Matriz composta por nanomagnetos com formato elíptico, a Figura e apresenta uma configuração que não satisfaz a regra do gelo de spin.

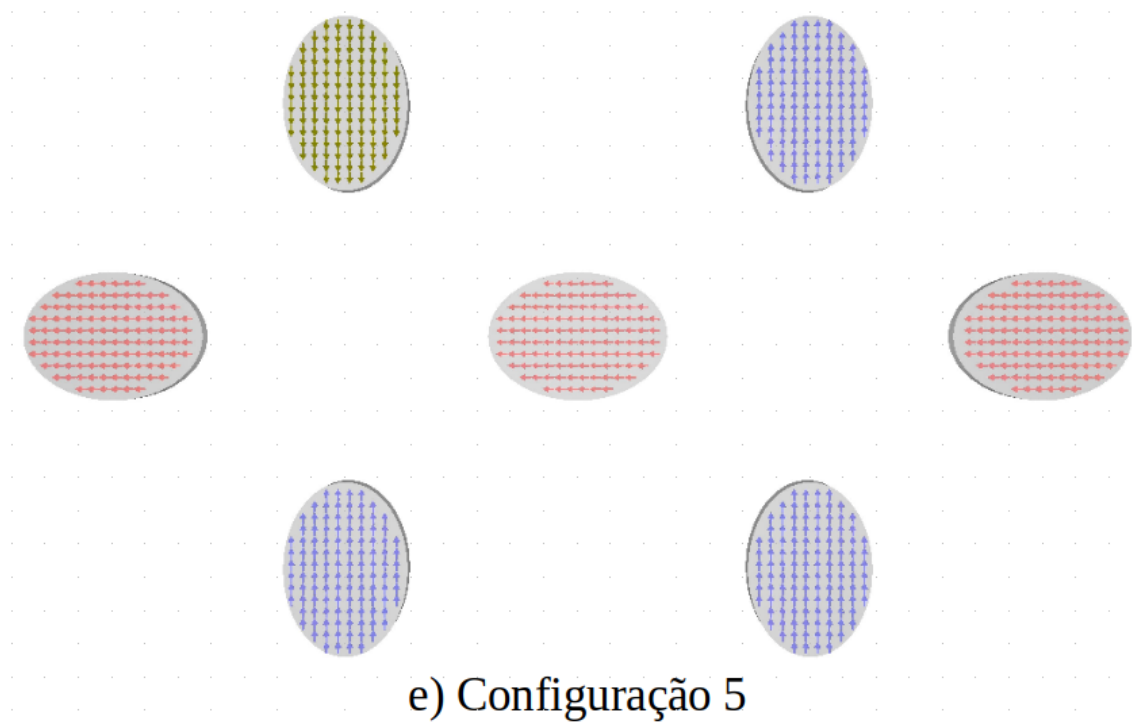
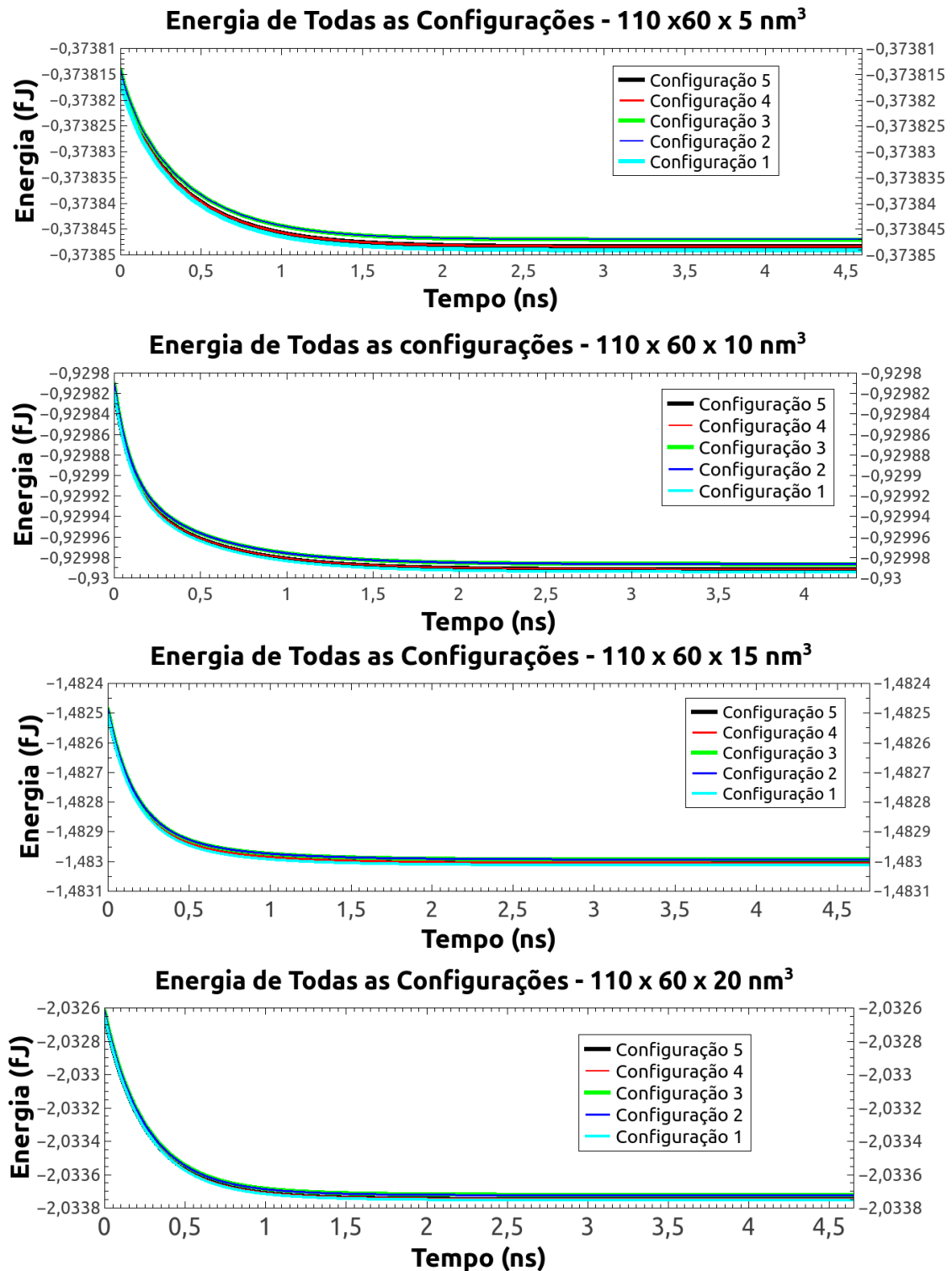


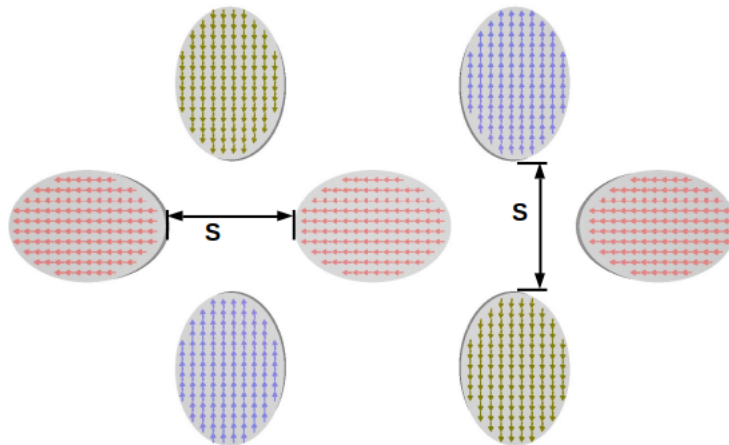
Figura 4.16 – Gráficos de energia para as 5 configurações de razão de aspecto $q = 1,83$, para as espessuras de 5, 10, 15 e 20 nm. A distância S entre as nanoelipses é de 190 nm. Em média as configurações demoram cerca de 3 ns para atingir o equilíbrio.



Através dos gráficos de energia das Figuras 4.15 e 4.16, observamos que as configurações que obedecem a regra do gelo (dois momentos magnéticos apontando para o centro do vértice e dois momentos magnéticos se afastando dele) que são representados pela configuração 1, apresentaram uma energia menor em relação as outras configurações. Todas essas análises foram feitas após as 5 configurações atingirem o equilíbrio. Em média, o tempo para que todas as configurações atinjam a configuração menos energética, é de cerca de 3 ns.

Após analisar as energias das configurações geradas, um outro estudo foi desenvolvido a respeito da distância S (separação borda a borda entre as elipses) entre os nanomagnetos da matriz, no qual a interação entre os nanomagnetos da matriz, não altere o estado de monodomínio das elipses.

Figura 4.17 – Distância de separação entre as nanoelipses da matriz, borda a borda.



As tabelas abaixo mostram os valores das distâncias de separação borda a borda obtidos neste trabalho.

Tabela 4.2 – Distância referente ao espaçamento entre as elipses da matriz, essas distâncias são respectivamente para as configurações de $(70 \times 50 \times 5) \text{ nm}^3$ e $(70 \times 50 \times 10) \text{ nm}^3$. Essas distâncias são medidas em relação as extremidades das elipses, onde, elas vão de uma extremidade até a outra.

Dimensões $(70 \times 50 \times e) \text{ nm}^3$			
Espessura 5 nm		espessura 10 nm	
Configuração	distância (nm)	Configuração (nm)	Distância (nm)
1	150	1	130
2	130	2	150
3	150	3	150
4	150	4	150
5	150	5	150

Tabela 4.3 – Distância referente ao espaçamento S entre as elipses da matriz, essas distâncias são respectivamente para as configurações de $(70 \times 50 \times 15) \text{ nm}^3$ e $(70 \times 50 \times 20) \text{ nm}^3$. Essas distâncias são medidas em relação as extremidades das elipses, onde, elas vão de uma extremidade até a outra.

Dimensões $(70 \times 50 \times e) \text{ nm}^3$			
Espessura 15 nm		espessura 20 nm	
Configuração	distância (nm)	Configuração (nm)	Distância (nm)
1	150	1	150
2	150	2	150
3	150	3	150
4	150	4	150
5	150	5	150

Tabela 4.4 – Distância referente ao espaçamento S entre as elipses da matriz, essas distâncias são respectivamente para as configurações de $(110 \times 60 \times 5) \text{ nm}^3$ e $(70 \times 50 \times 10) \text{ nm}^3$. Essas distâncias são medidas em relação as extremidades das elipses, onde, elas vão de uma extremidade até a outra.

Dimensões (110 x 60 x e) nm^3			
Espessura 5 nm		espessura 10 nm	
Configuração	distância (nm)	Configuração (nm)	Distância (nm)
1	210	1	230
2	210	2	230
3	210	3	230
4	210	4	230
5	210	5	230

Tabela 4.5 – Distância referente ao espaçamento S entre as elipses da matriz, essas distâncias são respectivamente para as configurações de $(110 \times 60 \times 15) \text{ nm}^3$ e $(70 \times 50 \times 20) \text{ nm}^3$. Essas distâncias são medidas em relação as extremidades das elipses, onde, elas vão de uma extremidade até a outra.

Dimensões (110 x 60 x e) nm^3			
Espessura 15 nm		espessura 20 nm	
Configuração	distância (nm)	Configuração (nm)	Distância (nm)
1	230	1	230
2	230	2	230
3	230	3	230
4	230	4	230
5	230	5	230

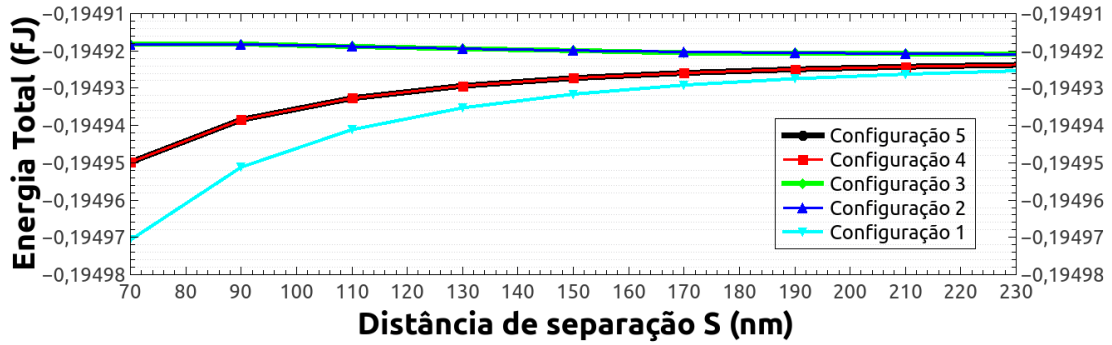
As distâncias S obtidas nas Tabelas 4.2, 4.3, 4.4 e 4.5, garantem que todas as nanoelipses do sistema, tenham o seu estado de monodomínio preservado, pois a interação dipolar se torna fraca a medida em que se afastam as nanoelipses do sistema. Essas distâncias, foram obtidas através da observação. A medida em que se afastava as elipses, foi verificado se a interação

entre as elipses diminuía, para que a partir deste ponto, fosse aplicado o campo magnético.

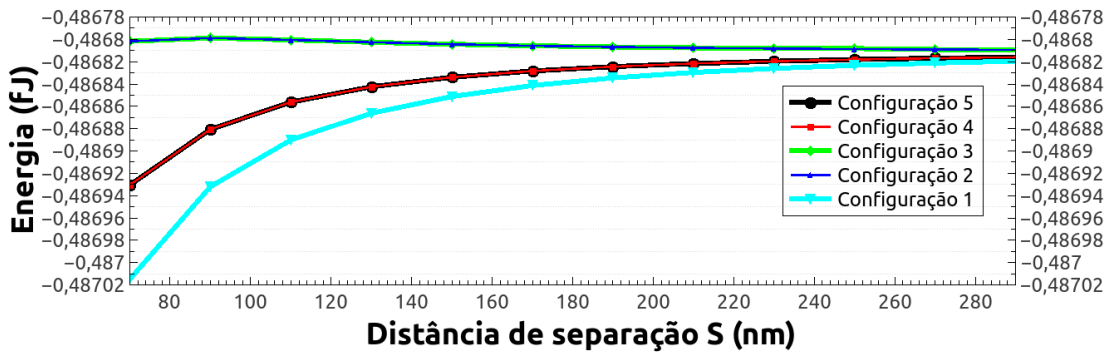
Após determinar a separação S mínima entre as nanoelipses, analisou-se a energia total para o sistema em equilíbrio. Aumentou-se a distância de separação S entre as nanoelipses do sistema. Mais uma vez, este processo foi realizado para as duas razões de aspecto adotadas neste trabalho.

Figura 4.18 – Energia total do sistema de nanoelipses aumentando o espaçamento S entre as nanoelipses com razão de aspecto $q = 1,4$.

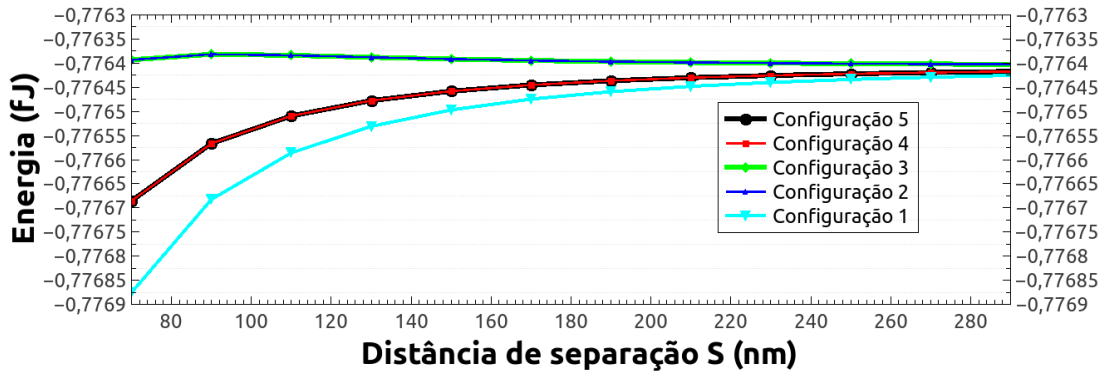
(a) Energia total mínima do sistema para as nanoelipses de dimensões $70 \times 50 \times 5 \text{ nm}^3$.



(b) Energia total mínima do sistema para as nanoelipses de dimensões $70 \times 50 \times 10 \text{ nm}^3$.



(c) Energia total mínima do sistema para as nanoelipses de dimensões $70 \times 50 \times 15 \text{ nm}^3$.



(d) Energia total mínima do sistema para as nanoelipses de dimensões $70 \times 50 \times 20 \text{ nm}^3$.

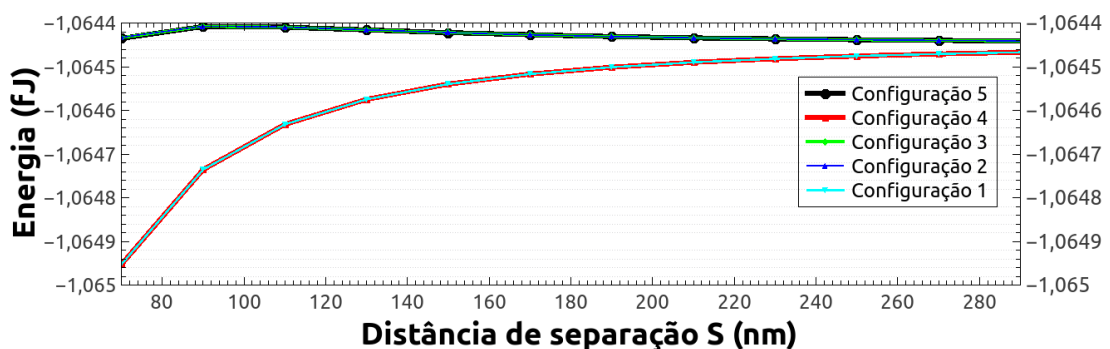
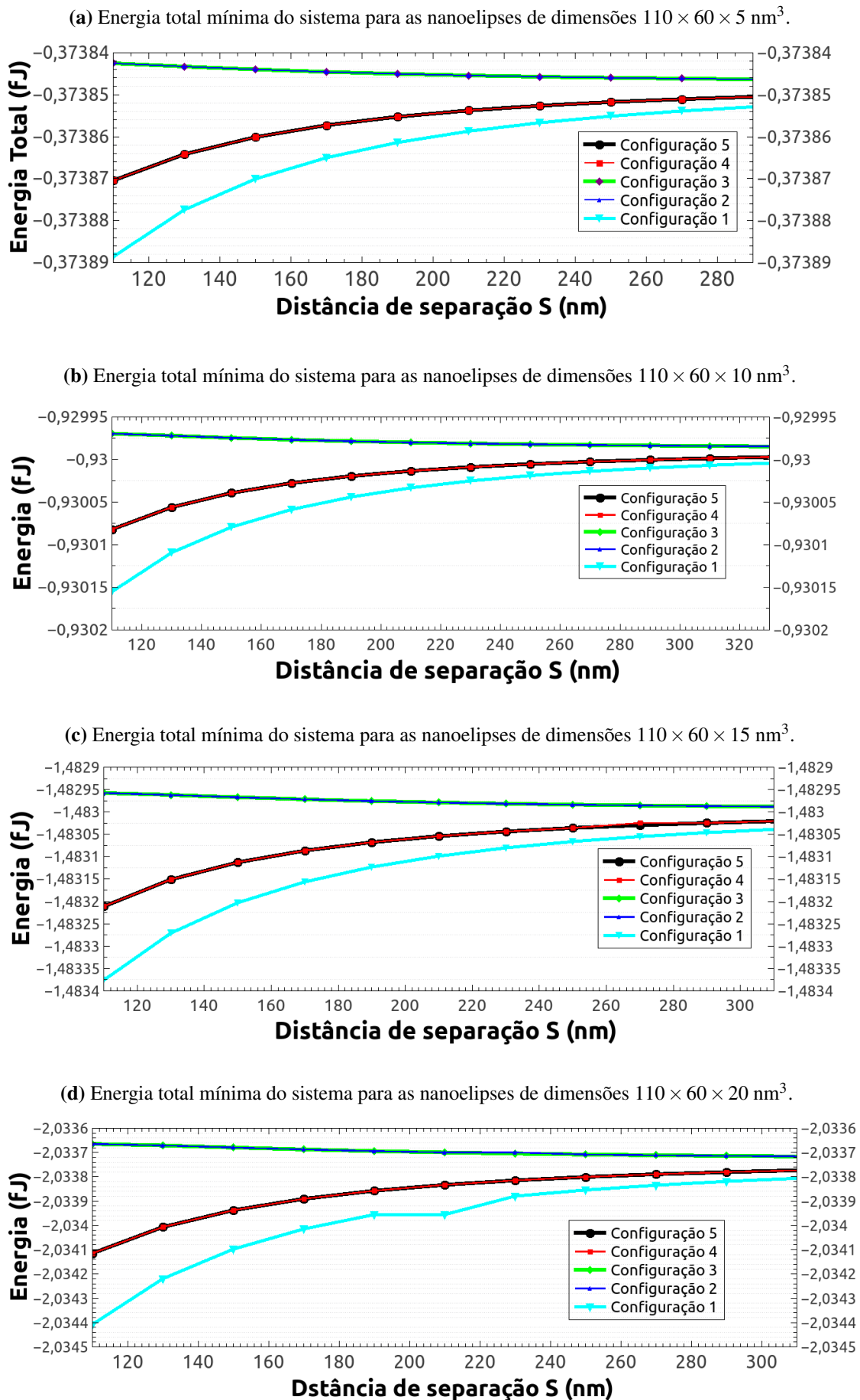


Figura 4.19 – Energia total do sistema de nanoelipses aumentando o espaçamento S entre as nanoelipses com razão de aspecto $q = 1,83$.



Analisando o comportamento da energia nas Figuras 4.18 e 4.19, que mostram o comportamento da energia total mínima do sistema em função da distância de separação S entre as nanoelipses, verifica-se que todas as configurações do sistema convergem para uma mesma energia. Este resultado era esperado, pois, a medida em que as nanoelipses se afastam, a energia de interação dipolar entre elas diminui bastante, uma vez que esta interação decai com o inverso do cubo da distância. Com isso, a medida que estas nanoelipses se afastam, esta interação entre as nanoelipses se torna muito baixa, sobrando apenas a energia de interação de troca em cada nanoelipse e também a interação dipolar entre os momentos magnéticos presentes em cada nanoelipse, que é comum para todas as elipses do sistema, ou seja, a energia final será dado pela soma das energias individuais de cada nanoelipses.

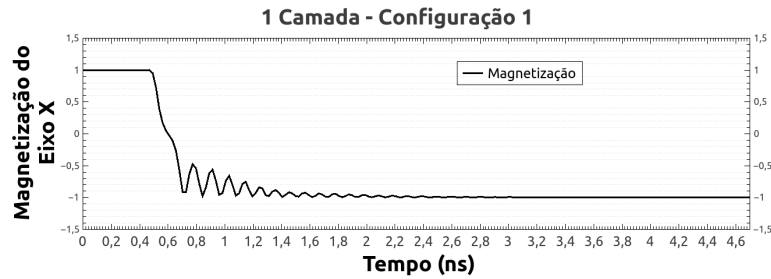
4.3 ESTUDO DA REVERSÃO DA MAGNETIZAÇÃO NUM SISTEMA DE NANOELIPSES FRACAMENTE ACOPLADAS

Após encontrar a distância borda a borda S , com o sistema em equilíbrio, aplicou-se os valores de campo magnético externo, referente a sua respectiva dimensão, ver a Tabela 4.1, na nanoelipse central do sistema para que ocorresse a reversão da magnetização da nanoelipse central. Dessa maneira, os momentos magnéticos das nanoelipses vizinhas quase não são afetadas pela inversão da nanoelipse central. As configurações analisadas foram exatamente as cinco estudadas anteriormente nas Figuras 4.12 e 4.13. Outro detalhe importante é que estas estão separadas pela mesma distância S das suas extremidades tanto em relação ao eixo x quanto ao eixo y como pode ser observado na Figura 4.17. A distância S , que foi obtida para a matriz contendo sete nanoelipses, é a menor possível para que o processo de reversão na magnetização dos momentos magnéticos aconteça de maneira coerente, com um índice de coerência próximo a 1 e provocando à menor perturbação possível em seus primeiros vizinhos. É possível constatar que ocorre a inversão da magnetização da nanoelipse central na presença dos seus primeiros vizinhos para as matrizes de dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$ e $110 \times 60 \times e \text{ nm}^3$ com espessuras e de 5 à 20 nm, isso pode ser verificado através dos gráficos da Figura 4.20, Figura 4.21, Fi-

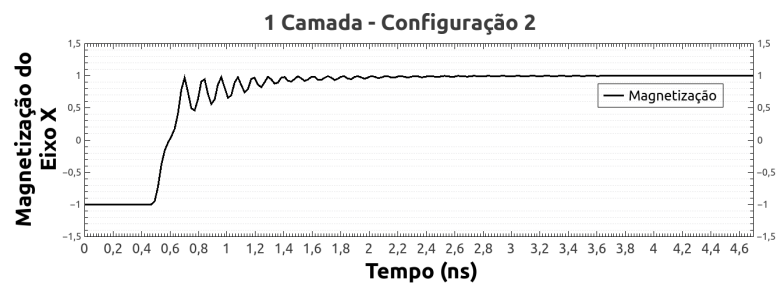
gura 4.22 e Figura 4.23 que são referentes as nanoelipses com razão de aspecto de $q = 1,4$ e pelos gráficos da Figura 4.24, Figura 4.25, Figura 4.26 e Figura 4.27 para as nanopartículas com razão de aspecto $q = 1,83$. Todas essas inversões coerente de precessão da magnetização, foram obtidas utilizando os valores de campo magnético externo da Tabela 4.1.

Figura 4.20 – Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $70 \times 50 \times 5 \text{ nm}^3$. Foram utilizadas as distância de separação S da Tabela 4.2.

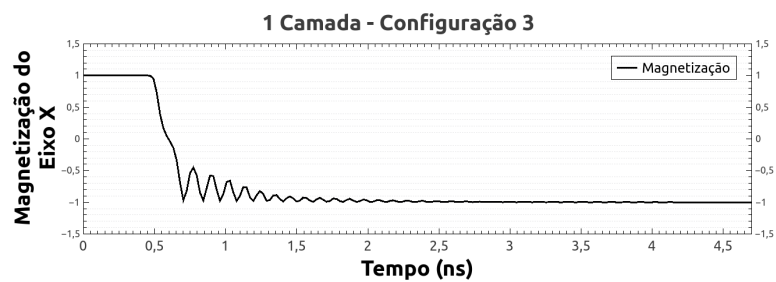
(a) Reversão da magnetização para a configuração 1.



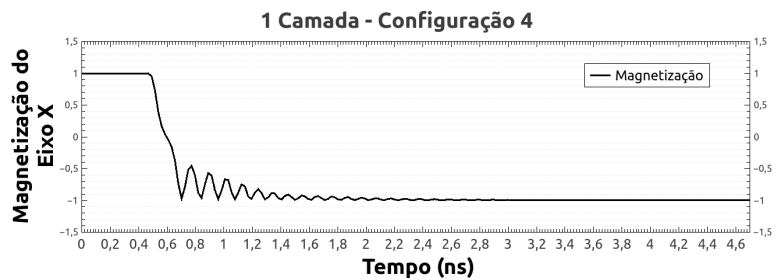
(b) Reversão da magnetização para a configuração 2.



(c) Reversão da magnetização para a configuração 3.



(d) Reversão da magnetização para a configuração 4.



(e) Reversão da magnetização para a configuração 5.

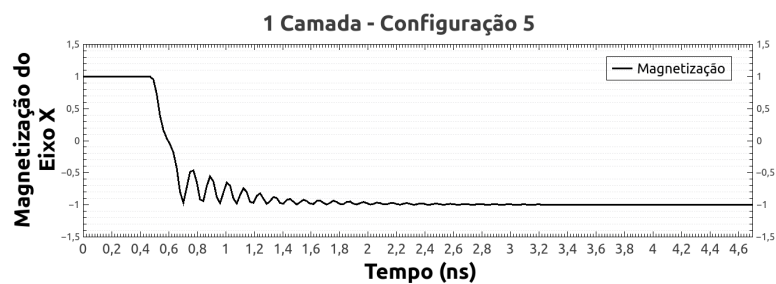
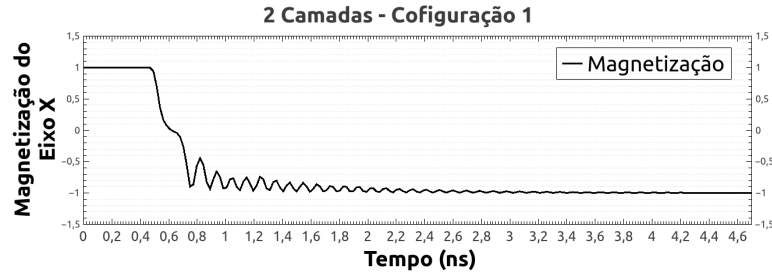
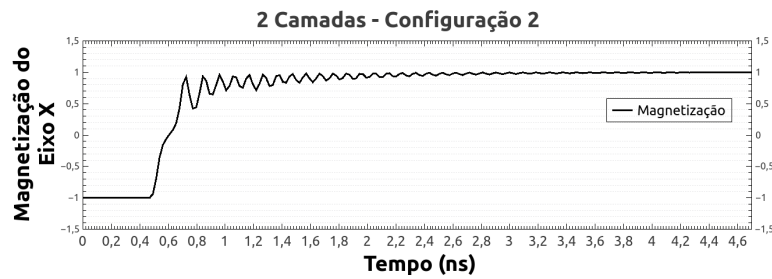


Figura 4.21 – Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $70 \times 50 \times 10 \text{ nm}^3$. Foram utilizadas as distância de separação S da Tabela 4.2.

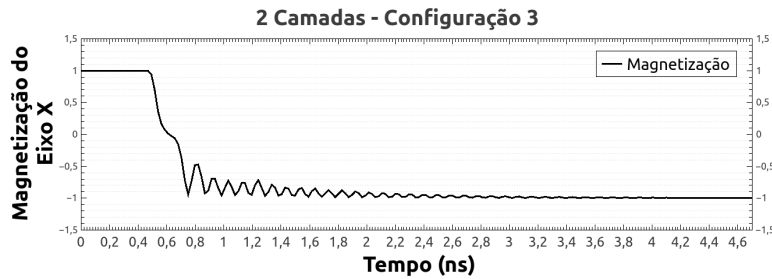
(a) Reversão da magnetização para a configuração 1.



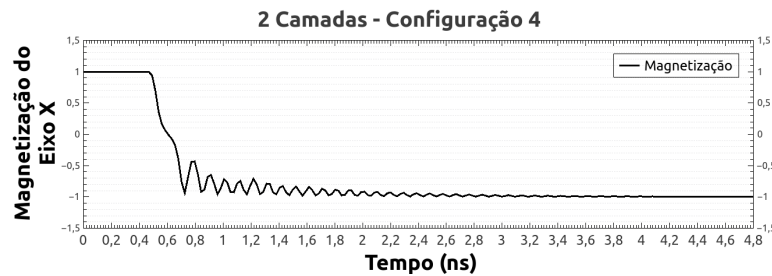
(b) Reversão da magnetização para a configuração 2.



(c) Reversão da magnetização para a configuração 3.



(d) Reversão da magnetização para a configuração 4.



(e) Reversão da magnetização para a configuração 5.

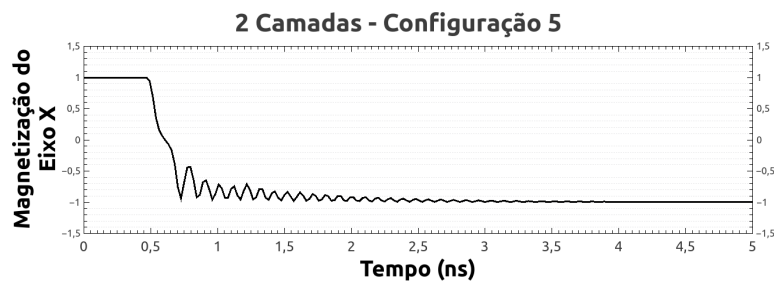
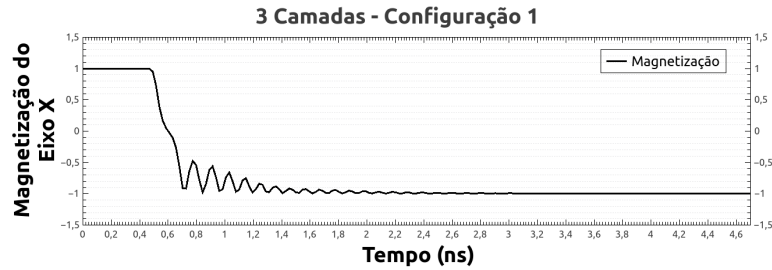
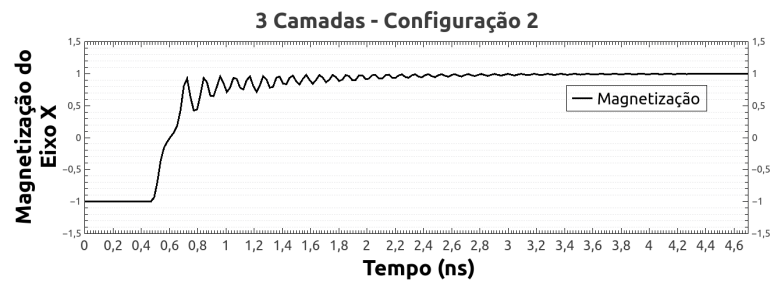


Figura 4.22 – Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $70 \times 50 \times 15 \text{ nm}^3$. Foram utilizadas as distância de separação S da Tabela 4.3.

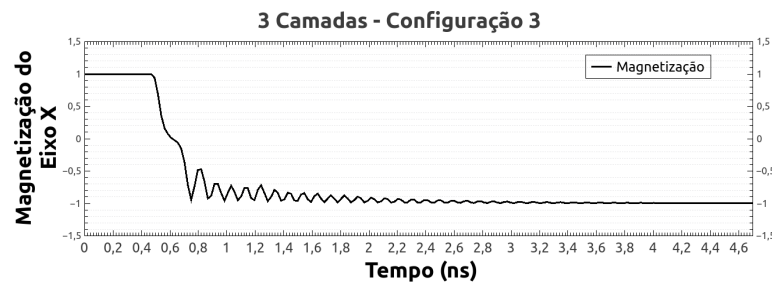
(a) Reversão da magnetização para a configuração 1.



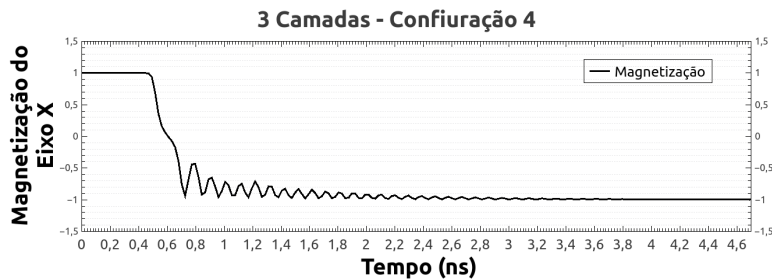
(b) Reversão da magnetização para a configuração 2.



(c) Reversão da magnetização para a configuração 3.



(d) Reversão da magnetização para a configuração 4.



(e) Reversão da magnetização para a configuração 5.

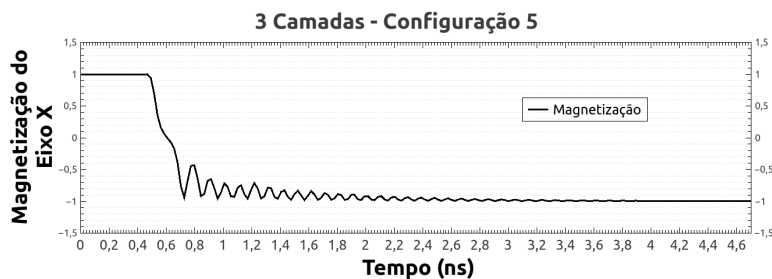
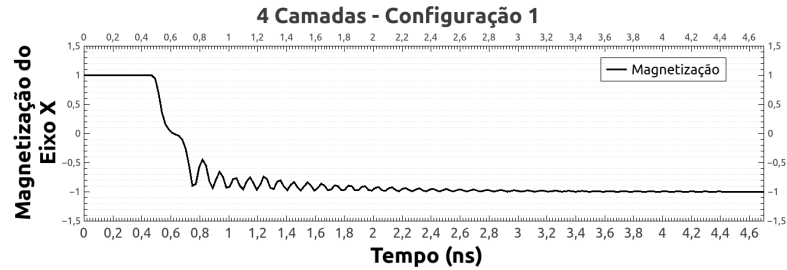
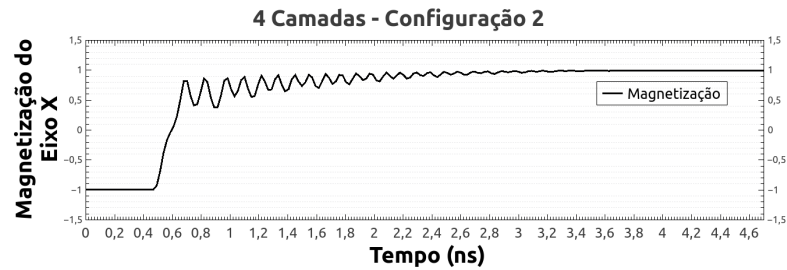


Figura 4.23 – Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $70 \times 50 \times 20 \text{ nm}^3$. Foram utilizadas as distância de separação S da Tabela 4.3.

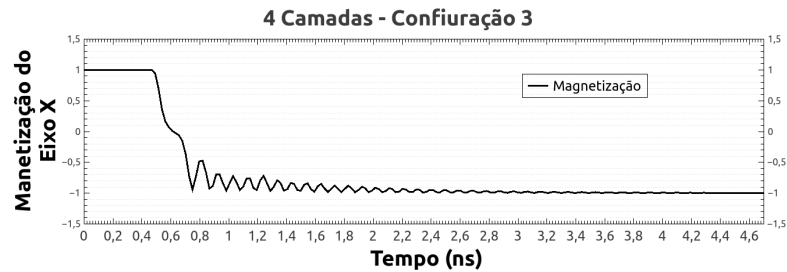
(a) Reversão da magnetização para a configuração 1.



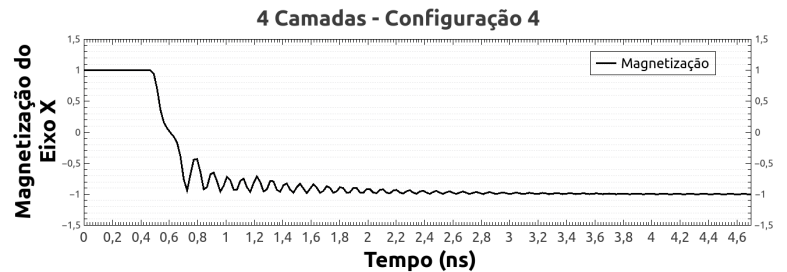
(b) Reversão da magnetização para a configuração 2.



(c) Reversão da magnetização para a configuração 3.



(d) Reversão da magnetização para a configuração 4.



(e) Reversão da magnetização para a configuração 5.

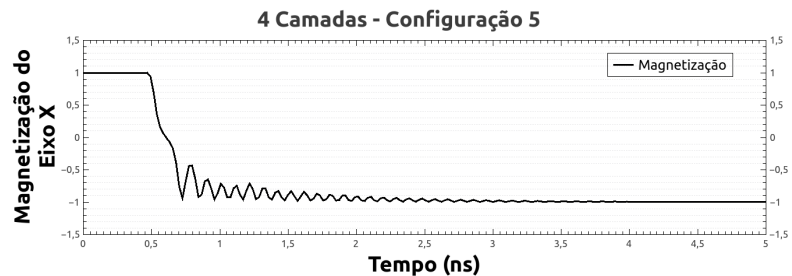
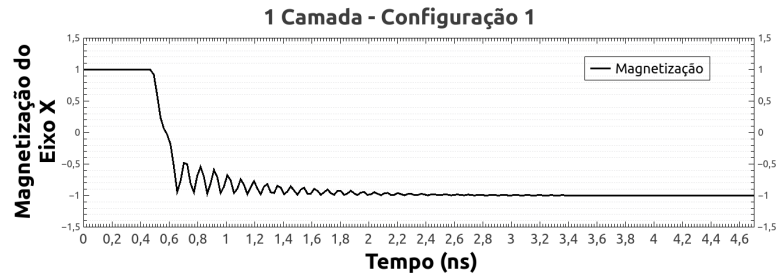
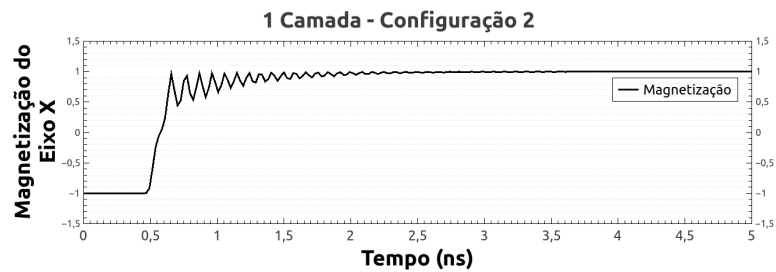


Figura 4.24 – Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $110 \times 60 \times 5 \text{ nm}^3$. Foram utilizados as distância de separação S da Tabela 4.4.

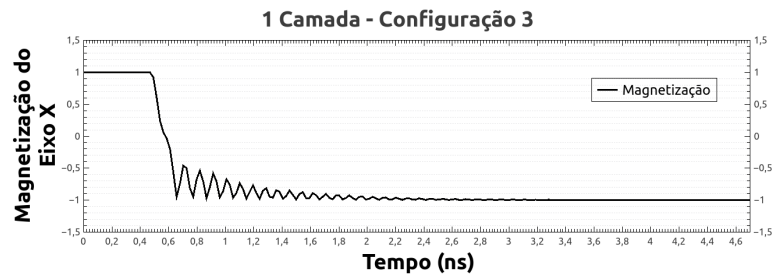
(a) Reversão da magnetização para a configuração 1.



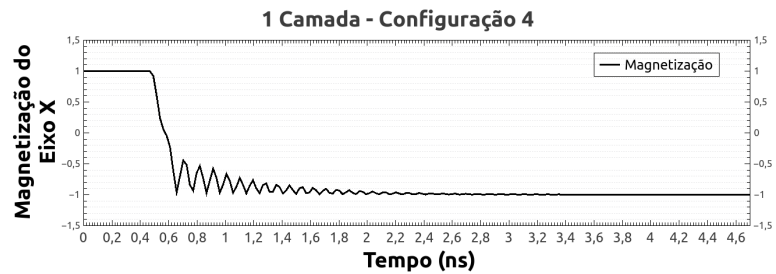
(b) Reversão da magnetização para a configuração 2.



(c) Reversão da magnetização para a configuração 3.



(d) Reversão da magnetização para a configuração 4.



(e) Reversão da magnetização para a configuração 5.

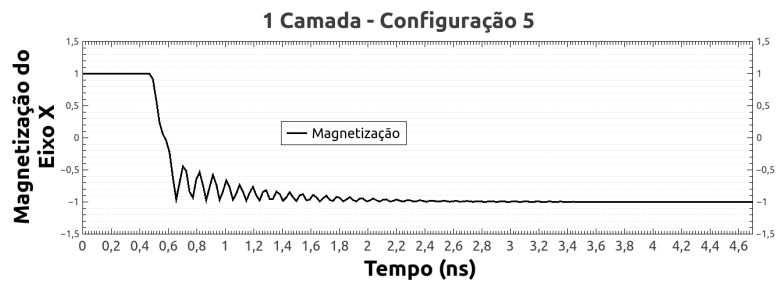
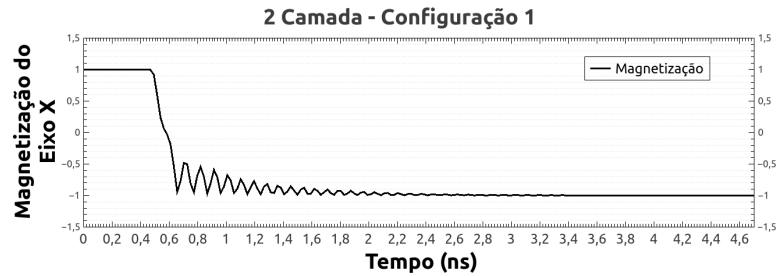
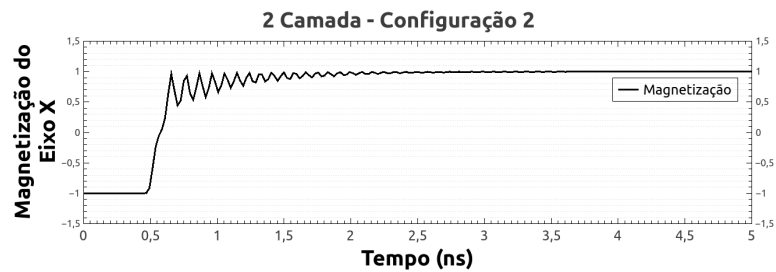


Figura 4.25 – Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $110 \times 60 \times 10 \text{ nm}^3$. Foram utilizados as distância de separação S da Tabela 4.4.

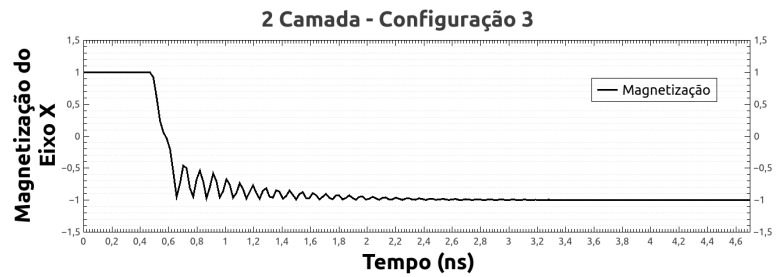
(a) Reversão da magnetização para a configuração 1.



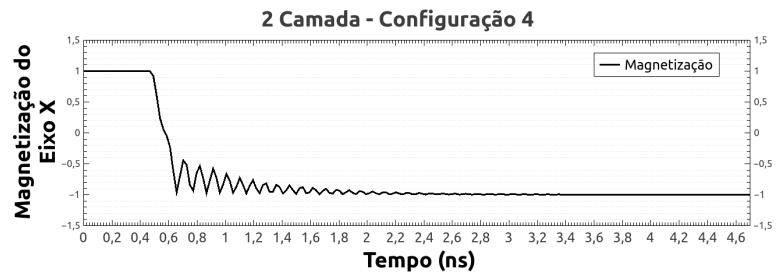
(b) Reversão da magnetização para a configuração 2.



(c) Reversão da magnetização para a configuração 3.



(d) Reversão da magnetização para a configuração 4.



(e) Reversão da magnetização para a configuração 5.

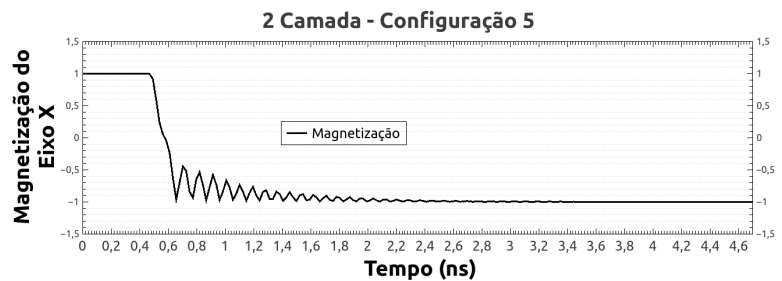
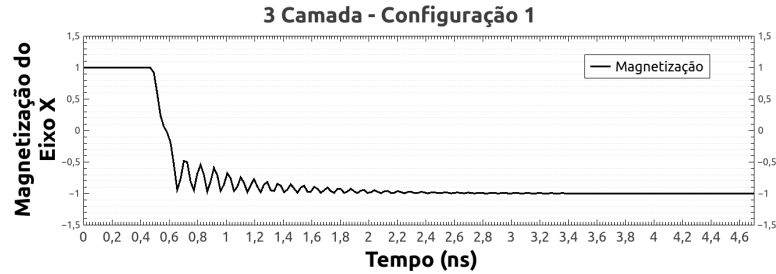
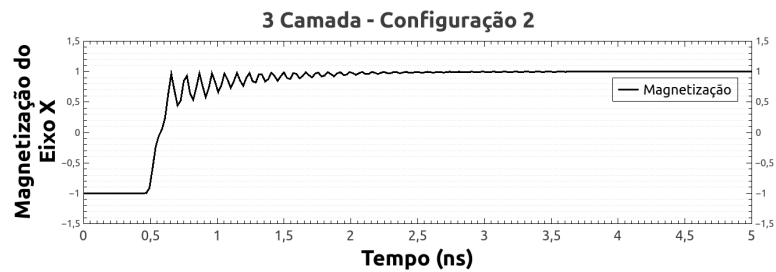


Figura 4.26 – Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $110 \times 60 \times 15 \text{ nm}^3$. Foram utilizados as distância de separação S da Tabela 4.5.

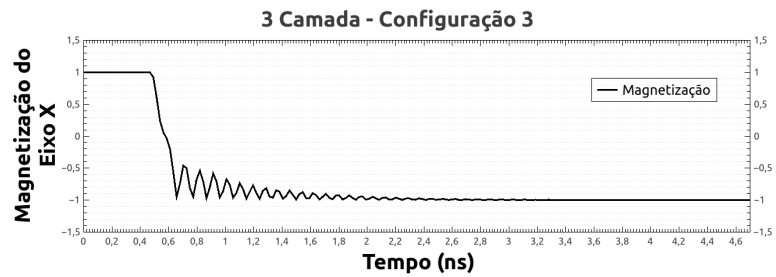
(a) Reversão da magnetização para a configuração 1.



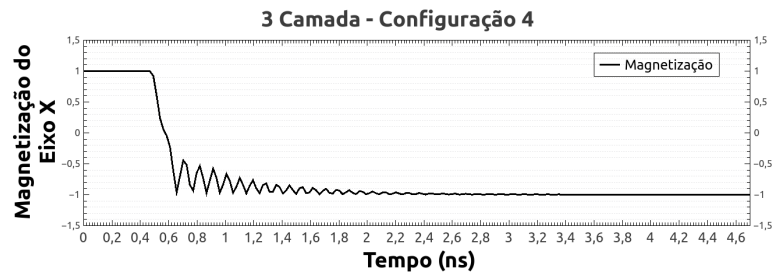
(b) Reversão da magnetização para a configuração 2.



(c) Reversão da magnetização para a configuração 3.



(d) Reversão da magnetização para a configuração 4.



(e) Reversão da magnetização para a configuração 5.

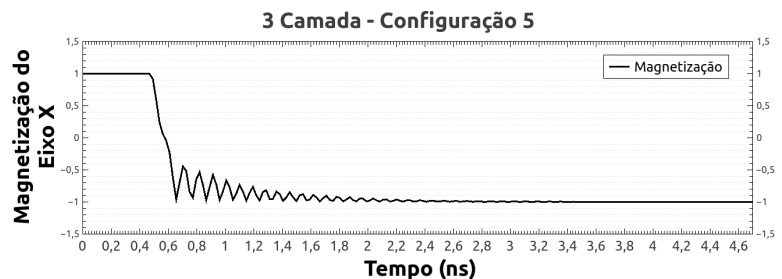
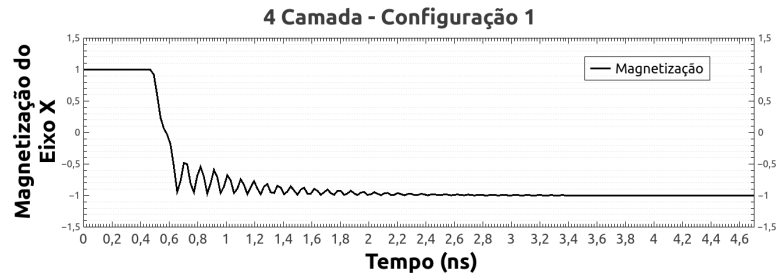
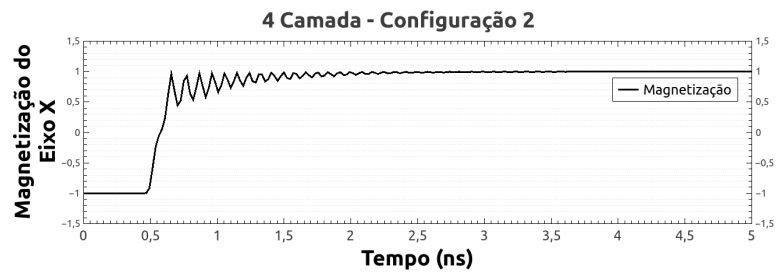


Figura 4.27 – Reversão da magnetização para a matriz composta por sete nanomagnetos de dimensões $110 \times 60 \times 20 \text{ nm}^3$. Foram utilizadas as distância de separação S da Tabela 4.5.

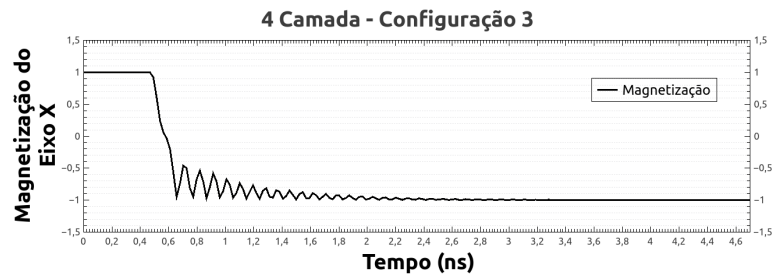
(a) Reversão da magnetização para a configuração 1.



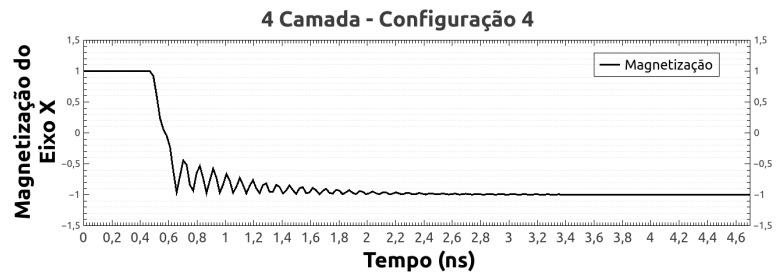
(b) Reversão da magnetização para a configuração 2.



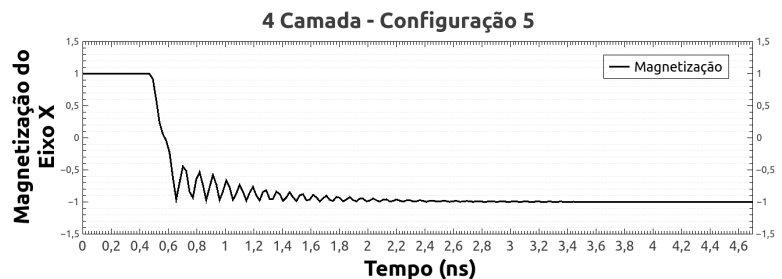
(c) Reversão da magnetização para a configuração 3.



(d) Reversão da magnetização para a configuração 4.



(e) Reversão da magnetização para a configuração 5.

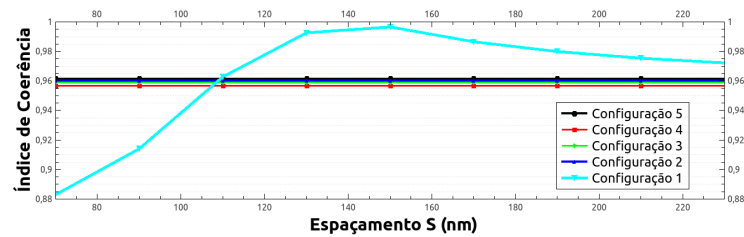


Todos esses gráficos das figuras anteriores, mostram que a inversão da magnetização aconteceu para as cinco configurações, com espessuras de 5 a 20 nm e razão de aspecto de $q = 1,4$ e $1,83$.

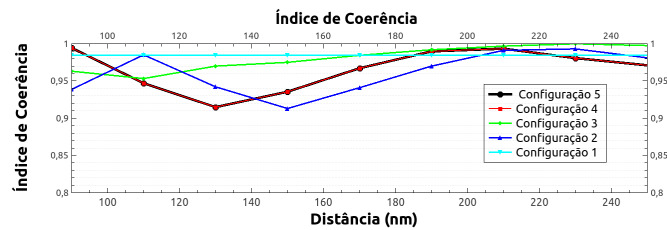
Todos esses processos de inversão da magnetização, aconteceram com índices de coerência superior a 0,8. Foram analisadas os índices de coerência para as duas razões de aspecto $q = 1,4$ e $q = 1,83$ estudando as quatro espessuras 5, 10, 15 e 20 nm. Os valores dos índices de coerência são mostrados nas Figuras 4.28 e 4.29:

Figura 4.28 – Comportamento do índice de coerência em função da distância S entre os nanomagnetos Quando o campo magnético externo é aplicado.

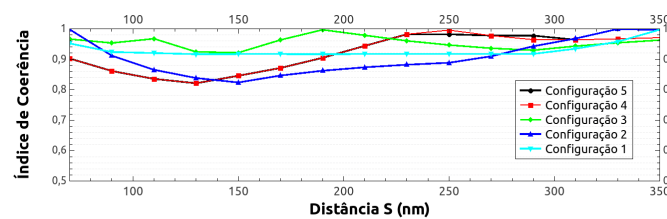
- (a) Representação dos índices de coerência para as configurações 1, 2, 3, 4 e 5 de dimensões $70 \times 50 \times 5 \text{ nm}^3$ sobre a aplicação de um campo magnético de 34 mT.



- (b) Representação dos índices de coerência para as configurações 1, 2, 3, 4 e 5 de dimensões $70 \times 50 \times 10 \text{ nm}^3$ sobre a aplicação de um campo magnético de 49 mT.



- (c) Representação dos índices de coerência para as configurações 1, 2, 3, 4 e 5 de dimensões $70 \times 50 \times 15 \text{ nm}^3$ sobre a aplicação de um campo magnético de 68 mT.



- (d) Representação dos índices de coerência para as configurações 1, 2, 3, 4 e 5 de dimensões $70 \times 50 \times 20 \text{ nm}^3$ sobre a aplicação de um campo magnético de 68 mT.

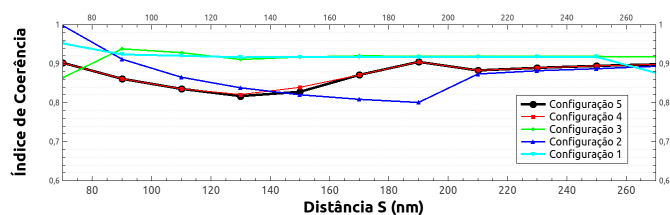
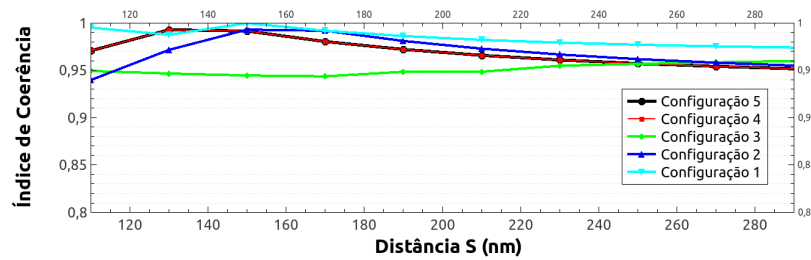
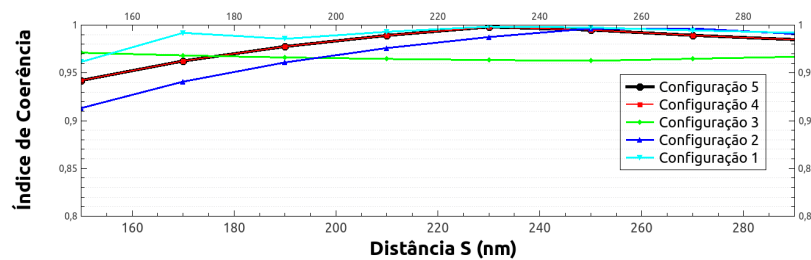


Figura 4.29 – Comportamento do índice de coerência em função da distância S entre os nanomagnetos quando o campo magnético externo é aplicado.

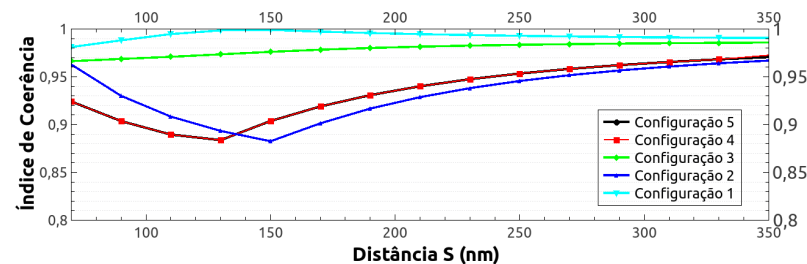
- (a) Representação dos índices de coerência para as configurações 1, 2, 3, 4 e 5 de dimensões $110 \times 60 \times 5 \text{ nm}^3$ sobre a aplicação de um campo magnético de 46 mT.



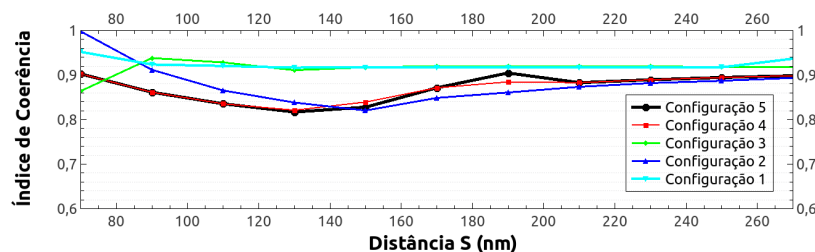
- (b) Representação dos índices de coerência para as configurações 1, 2, 3, 4 e 5 de dimensões $110 \times 60 \times 10 \text{ nm}^3$ sobre a aplicação de um campo magnético de 71 mT.



- (c) Representação dos índices de coerência para as configurações 1, 2, 3, 4 e 5 de dimensões $110 \times 60 \times 15 \text{ nm}^3$ sobre a aplicação de um campo magnético de 91 mT.



- (d) Representação dos índices de coerência para as configurações 1, 2, 3, 4 e 5 de dimensões $110 \times 60 \times 20 \text{ nm}^3$ sobre a aplicação de um campo magnético de 102 mT.



A observação direta dos gráficos das Figuras 4.28 e 4.29, mostram que o campo magnético externo aplicado na nanoelipse central, que se encontra na presença dos seus primeiros vizinhos, provoca uma reversão da magnetização de precessão de forma coerente para as duas razões de aspecto $q = 1,4$ e $q = 1,83$. Nas nanoelipses com razão de aspecto $q = 1,4$, embora o alto grau de coerência, apenas as nanoelipses com espessura de 10 nm, Figura 4.28b, a configuração de gelo de spin não apresentou um índice de coerência maior que as outras configurações, analisando em relação a distância de separação S mínima, no qual não se tem interação entre as elipses. Com relação as nanoelipses com razão de aspecto $q = 1,83$, em todas as espessuras (5, 10, 15 e 20 nm), a configuração de gelo de spin se mostrou mais coerente em relação a distância de separação S entre as nanoelipses, embora as outras configurações também apresentaram alto grau de coerência.

4.4 CONCLUSÕES

Através das simulações numéricas realizadas neste trabalho, foi possível determinar o campo magnético externo mínimo que quando aplicado sob um ângulo de 90° em relação ao eixo fácil de magnetização (eixo longo), provoca a inversão da magnetização de maneira coerente. Esse resultado é bastante interessante, pois mostra que os momentos magnéticos presentes na nanoelipse central, invertem ao mesmo tempo com sincronia, provocando uma rotação coerente da magnetização. Esse campo magnético externo mínimo, foi determinado inicialmente para uma única nanoelipse isolada. Através dos valores de campo magnético obtido para as elipses com razões de aspecto distintas, notou-se que as espessuras desses objetos influencia bastante no valor do campo magnético, de tal forma que, partículas menos espessas, necessitam de campos magnéticos com intensidades menores para inverter sua magnetização. Por outro lado, valores acima deste mesmo campo, acabam provocando uma inversão que do ponto de vista tecnológico não é interessante, uma reversão não controlada em que ocorre múltiplas reversões. Isso não é interessante, pois, esta característica pode impedir, por exemplo, a armazenagem de dados em um dispositivo que é constituído destas nanopartículas.

Nossos resultados mostram que é necessário que a distância mínima borda a borda entre as elipses, seja de no mínimo, 3 vezes o comprimento do semi-eixo maior da nanoelipse para que o estado de monodomínio em cada uma seja preservado.

Os índices de coerência da magnetização durante o processo de inversão da magnetização de precessão, para uma única nanoelipse na ausência de vizinhos, mostrou um resultado que está de acordo com a literatura [6], todos os valores de índice de coerência se encontram com valores bem próximos a 1.

Analisando 5 configurações distintas, com razões de aspecto fixas de $q = 1,4$ ($70 \times 50 \times e$) nm^3 e $q = 1,83$ ($110 \times 60 \times e$) nm^3 , dentre elas, uma no qual a regra do gelo de spin é satisfeita, foi possível verificar e constatar que a configuração de gelo de spin (Configuração 1), se mostrou menos energética em comparação com as outras configurações (configuração 2, 3, 4 e 5), que não obedecem tal regra. Do ponto de vista experimental, essa característica das configurações de gelo de spin, é uma opção interessante para construir matrizes compostas por nanoelipses, por causa do seu caráter menos energético.

Após determinar o valor do campo magnético externo capaz de reverter a magnetização de forma coerente para uma única nanoelipse isolada, e realizar uma análise sobre a energia das configurações da Figura 4.12 e Figura 4.13, foi determinado através da observação dos sistemas simulados, uma distância mínima de separação ($S = S_{min}$) borda a borda entre os nanomagnetos da rede, em que os efeitos da interação dipolar entre as elipses da rede, não alterem o seu estado de monodomínio. Os resultados mostram, que isso acontece, em geral, quando a distância borda a borda entre as nanoelipses é de cerca de 3 vezes o comprimento do semi-eixo maior da nanoelipse, isso garante o estado de monodomínio das nanoelipses. Esse resultado fornece a informação a da interação entre as elipses, cujo o acoplamento dipolar entre as nanoelipses é muito fraco. Estas informações são muito importantes para que se possa construir matrizes de nanoelipses magnéticas não-interagentes, pois, desta forma é possível controlar e manipular individualmente os elementos de monodomínio.

Utilizando a distância de separação S entre as elipses que mantém o seu estado de mo-

nomínio, verificou-se que o mesmo campo magnético externo que provocou a inversão da magnetização de precessão em um único nanomagnet, Tabela 4.1 , consegue também inverter a magnetização da nanoelipse de maneira controlada quando estiver na presença dos seus primeiros vizinhos, com o valor do índice de coerência muito próximo a um.

Ao analisar o comportamento na energia mínima quando o sistema se equilibra para as cinco configurações em função da distância borda a borda entre as nanoelipses, observou-se um comportamento similar para as duas razões de aspecto, independente da espessura delas. Pode-se ver que a medida em que se aumenta o espaçamento S entre as nanoelipses do sistema, todas elas tendem para uma mesma energia em comum.

Analisando o índice de coerência, também foi possível verificar que as configurações de gelo de spin apresentou um índice de coerência maior que as configurações da Figura 4.12(b), 4.12(c), Figura 4.13(d) e Figura 4.13(e). Isso ocorreu para configurações com razão de aspecto $q = 1,4$ apresentados na Figura 4.28a e Figura 4.28b, enquanto que todas as configurações com razão de aspecto $q = 1,83$ apresentaram esse fenômeno. Esse resultado é muito interessante, pois mostra que além das configurações de spin-ice serem menos energéticas, elas ainda são melhores que as outras em relação a inversão coerente da magnetização.

Agora na presença dos seus primeiros vizinhos, em que o mesmo campo magnético externo mínimo da tabela 4.1 é capaz de inverter a magnetização da elipse central da matriz, que não sofre interferência das suas primeiras vizinhas. A análise do índice de coerência destas configurações, mostrou que este processo ocorreu com um índice de coerência que está dentro do padrão aceitável para lhe garantir um estado de monodomínio.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 ABNTEX. **Introdução ao estudo de magnetismo**. Disponível em: <https://fisicamente.blogspot.com/2014/08/introducao-ao-estudo-de-magnetismo.html?view=magazine>. Acesso em: 14 aug. 2014.
- 2 DIENY, B. *et al.* **Spin polarised magnetic device**. [S.l.]: Google Patents, out. 2 2012. US Patent 8,279,666.
- 3 WANG, Y. *et al.* Manipulation of magnetization reversal of ni81fe19 nanoellipse arrays by tuning the shape anisotropy and the magnetostatic interactions. **Journal of Applied Physics**, AIP, v. 111, n. 7, p. 07B909, 2012.
- 4 THIYAGARAJAH, N. *et al.* Effect of inter-bit material on the performance of directly deposited bit patterned media. **Applied Physics Letters**, AIP, v. 101, n. 15, p. 152403, 2012.
- 5 ROSS, C. e. a. *et al.* Magnetic behavior of lithographically patterned particle arrays. **Journal of applied physics**, AIP, v. 91, n. 10, p. 6848–6853, 2002.
- 6 JUNIOR, D. V. *et al.* Study on the coherence degree of magnetization reversal in permalloy single-domain nano-ellipses. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, v. 426, p. 396–404, 2017.
- 7 MARTIN, J. *et al.* Ordered magnetic nanostructures: fabrication and properties. **Journal of magnetism and magnetic materials**, Elsevier, v. 256, n. 1-3, p. 449–501, 2003.
- 8 PIRAMANAYAGAM, S.; SRINIVASAN, K. Recording media research for future hard disk drives. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, v. 321, n. 6, p.485–494, 2009.
- 9 LAUTERBUR, P. C. *et al.* Image formation by induced local interactions: examples employing nuclear magnetic resonance. 1973.
- 10 FRANCISQUINE, E. *et al.* Nanopartículas magnéticas e suas aplicações. **Química Supramolecular e Nanotecnologia**, p. 269, 2014.
- 11 POLLOCK, P. M. *et al.* High frequency of braf mutations in nevi. **Nature genetics**, Nature Publishing Group, v. 33, n. 1, p. 19–20, 2003.
- 12 CHOU, S. Y. *et al.* Imprint lithography with 25-nanometer resolution. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 272, n. 5258, p. 85–87, 1996.
- 13 RIVAS, J. *et al.* Preparation and magnetic behavior of arrays of electrodeposited co nanowires. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, v. 249, n. 1-2, p. 220–227, 2002.

- 14 VAVASSORI, P. *et al.* Magnetization reversal via single and double vortex states in submicron permalloy ellipses. **Physical Review B**, APS, v. 69, n. 21, p.214404, 2004.
- 15 HUBERT, A.; SCHÄFER, R. **Magnetic domains: the analysis of magnetic microstructures**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2008.
- 16 SCHNEIDER, M. *et al.* Lorentz microscopy of circular ferromagnetic permalloy nanodisks. **Applied Physics Letters**, AIP, v. 77, n. 18, p. 2909–2911, 2000.
- 17 COWBURN, R. *et al.* Single-domain circular nanomagnets. **Physical Review Letters**, APS, v. 83, n. 5, p. 1042, 1999.
- 18 SHINJO, T. *et al.* Magnetic vortex core observation in circular dots of permalloy. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 289, n. 5481, p. 930–932, 2000.
- 19 WACHOWIAK, A. *et al.* Direct observation of internal spin structure of magnetic vortex cores. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 298, n. 5593, p. 577–580, 2002.
- 20 LEONEL, S. *et al.* A model for vortex formation in magnetic nanodots. **Journal of Applied Physics**, AIP, v. 102, n. 10, p. 104311, 2007.
- 21 ROCHA, J. *et al.* Diagram for vortex formation in quasi-two-dimensional magnetic dots. **Journal of Applied Physics**, AIP, v. 107, n. 5, p. 053903, 2010.
- 22 ROESSLER, U. K. *et al.* Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 442, n. 7104, p. 797, 2006.
- 23 MUHLBAUER, S. *et al.* Skyrmion lattice in a chiral magnet. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 323, n. 5916, p. 915–919, 2009.
- 24 YU, X. *et al.* Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 465, n. 7300, p. 901, 2010.
- 25 ROMMING, N. *et al.* Writing and deleting single magnetic skyrmions. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 341, n. 6146, p. 636–639, 2013.
- 26 SKLENAR, J. *et al.* Broadband ferromagnetic resonance studies on an artificial square spin-ice island array. **Journal of Applied Physics**, AIP, v. 113, n. 17, p. 17B530, 2013.
- 27 GOMES, J. *et al.* Effect of the dipolar coupling on the precessional magnetization switching in two-dimensional arrays of single-domain nano-ellipses. **AIP Advances**, AIP Publishing, v. 8, n. 9, p. 095017, 2018.
- 28 PIROTA, K. R. *et al.* Influência de anisotropia induzida e magnetostrição na magnetoimpedância e em sua relaxação em fitas amorfas de fecosib. [sn], 1998.
- 29 WANG, J. *et al.* Artificial "spin ice" in a geometrically frustrated lattice of nanoscale ferromagnetic islands. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 439, n. 7074, p. 303–306, 2006.
- 30 GINGRAS, M. J. Observing monopoles in a magnetic analog of ice. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 326, n. 5951, p. 375–376, 2009.

- 31 PAULING, L. The structure and entropy of ice and of other crystals with some randomness of atomic arrangement. **Journal of the American Chemical Society**, ACS Publications, v. 57, n. 12, p. 2680–2684, 1935.
- 32 BERNAL, J.; FOWLER, R. A theory of water and ionic solution, with particular reference to hydrogen and hydroxyl ions. **The Journal of Chemical Physics**, ACS Publications, v. 57, n. 12, p. 2680–2684, 1935.
- 33 BRAMWELL, S. T.; GINGRAS, M. J. Spin ice state in frustrated magnetic pyrochlore materials. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 294, n. 5546, p. 1495–1501, 2001.
- 34 LI, J. *et al.* Comparing artificial frustrated magnets by tuning the symmetry of nanoscale permalloy arrays. **Physical Review B**, APS, v. 81, n. 9, p. 092406, 2010.
- 35 WYSIN, G. *et al.* Order and thermalized dynamics in heisenberg-like square and kagome spin ices. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 27, n. 7, p. 076004, 2015.
- 36 MELLADO, P. *et al.* Dynamics of magnetic charges in artificial spin ice. **Physical review letters**, APS, v. 105, n. 18, p. 187206, 2010.
- 37 RODRIGUES, J. H. **Processo de Desmagnetização e Histerese de um Gelo de Spin Artificial em uma Geometria Triangular**. Tese (Doutorado) — Dissertação de Mestrado, UFV, 2013.
- 38 LADAK, S. *et al.* Direct observation of magnetic monopole defects in an artificial spin-ice system. **Nature Physics**, Nature Publishing Group, v. 6, n. 5, p. 359, 2010.
- 39 MOL, L. *et al.* Magnetic monopole and string excitations in two-dimensional spin ice. **Journal of Applied Physics**, AIP, v. 106, n. 6, p. 063913, 2009.
- 40 CASTELNOVO, C. *et al.* Magnetic monopoles in spin ice. **NATURE**, Nature Publishing Group, v. 451, n. 7174, p. 42, 2008.
- 41 Que es un monopolo magnético en un hielo de espín. Disponível em: <https://francisthemulenews.wordpress.com/2010/04/18/que-es-un-monopolo-magnetico-en-un-hielo-de-espín/>. Acesso em: 18 abril 2010.
- 42 BUSCHOW, K. H. J. *et al.* **Physics of magnetism and magnetic materials**. [S.l.]: Springer, 2003.
- 43 NOLTING, W.; RAMAKANTH, A. **Quantum theory of magnetism**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2009.
- 44 JUNIOR, D. d. S. V. **Estudo via simulação computacional do comportamento da magnetização de nanoilhas ferromagnéticas elípticas**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Juiz de Fora, ICE-Instituto de Ciências Exatas, Juiz de Fora.
- 45 GETZLAFF, M. **Fundamentals of magnetism**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007.
- 46 JACKSON, J. D. **Classical electrodynamics**. [S.l.]: AAPT, 1999.

- 47 ASHCROFT, N.; MERMIN, N. Solid state physics, saunders college, philadelphia, 1976.[4] a. canning, l.-w. wang, a. williamson, a. zunger, parallel empirical pseudopotential electronic structure calculations for million atom systems. **J. Comp. Phys**, v. 160, p. 29–41, 2000.
- 48 TOSCANO, D. **Estudo via Simulação computacional da formação de vórtice e do modo girotrópico em nanodiscos magnéticos**. 137 p. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Juiz de Jora, Juiz de Fora, 2011.
- 49 AHARONI, A. *et al.* **Introduction to the Theory of Ferromagnetism**. [S.l.]: Clarendon Press, 2000.
- 50 SALINAS, S. R. **Introdução a física estatística vol. 09**. [S.l.]: Edusp, 1997.
- 51 TOSCANO, D. Estudo via simulação computacional da dinâmica da magnetização em nanomagnetos contendo uma distribuição de impurezas magnéticas. Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2015.
- 52 REITZ, J. R. *et al.* **Foundations of electromagnetic theory**. [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Company, 2008.
- 53 SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J. **Mecânica Quântica Moderna**. [S.l.]: bookman, 2013.
- 54 LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. In: **Perspectives in Theoretical Physics**. [S.l.]: Elsevier, 1992. p. 51–65.
- 55 GILBERT, T. L. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. **IEEE transactions on magnetics**, IEEE, v. 40, n. 6, p. 3443–3449, 2004.
- 56 ABERT, C. W. Discrete mathematical concepts in micromagnetic computations. 2013.
- 57 WYSIN, G. Vortex-in-nanodot potentials in thin circular magnetic dots. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 22, n. 37, p. 376002, 2010.
- 58 WALOWSKI, J. **Non-local/local gilbert damping in nickel and permalloy thin films**. Tese (Doutorado) — Diplomarbeit, Uni Göttingen, 2007.
- 59 TOSCANO, D. *et al.* Dynamics of the vortex core in magnetic nanodisks with a ring of magnetic impurities. **Applied Physics Letters**, AIP, v. 101, n. 25, p. 252402, 2012.
- 60 FERREIRA, V. *et al.* Transverse domain wall scattering and pinning by magnetic impurities in magnetic nanowires. **Journal of Applied Physics**, AIP, v. 114, n. 1, p. 013907, 2013.
- 61 DIAS, R. *et al.* Molecular dynamics simulation of lorentz force microscopy in magnetic nano-disks. **Applied Physics Letters**, AIP, v. 102, n. 17, p. 172405, 2013.
- 62 TOSCANO, D. *et al.* Position of the transverse domain wall controlled by magnetic impurities in rectangular magnetic nanowires. **Journal of Applied Physics**, AIP, v. 115, n. 16, p. 163906, 2014.
- 63 JUNIOR, D. V. *et al.* Ground state study of the thin ferromagnetic nano-islands for artificial spin ice arrays.

