

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Vanessa Aparecida Ferreira

**ESTUDO DA DINÂMICA DA PAREDE DE DOMÍNIO
TRANSVERSAL EM NANOFIOS MAGNÉTICOS**

Juiz de Fora

18 de dezembro 2013

Vanessa Aparecida Ferreira

ESTUDO DA DINÂMICA DA PAREDE DE DOMÍNIO TRANSVERSAL EM NANOFIOS MAGNÉTICOS

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora, como requisito parcial para obtenção do grau de Doutora.

Orientador: Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel

Co-orientador: Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura

Juiz de Fora

18 de dezembro 2013

*Dedico este trabalho àqueles
que sempre serão meu porto,
meu pai, Carlos, minha mãe, Neuza,
e minha irmã, Kátia.*

AGRADECIMENTOS

Ser uma das 7,2 bilhões de pessoas que ocupam o nosso humilde planeta entre outros 100 bilhões de planetas apenas na Via Láctea é algo que merece minha gratidão ao Criador todos os minutos. Deus é o norte da minha vida e me leva a tarefas grandiosas. Obrigada Senhor, pela bênção de poder trilhar seus caminhos e ter chegado até aqui...

Meu pai Carlos e minha mãe Neuza são os seres responsáveis por minha criação, meu crescimento, minha educação e minha fé. Pais sempre são os propulsores no desenvolvimento de um mundo melhor, mas quase nunca se dão conta da sua grandiosidade. Aos meus pais dotados de tanta sabedoria devo toda a minha vida e meus sucessos. Pai, seu exemplo de conduta me mantém firme. Mãe, seu amor incondicional me transforma. Obrigada a vocês, por simplesmente tudo.

Se hoje concluo um doutorado, minha irmã Kátia (mesmo sem saber) foi a pivô dessa ideia. Em minha vida humilde de estudante não sabia sequer o que era uma faculdade, até o dia em que ela entrou em uma cursando Química. Ora, eu Física, não é um mero acaso, é uma inspiração baseada na luta e olhar de minha irmã sobre o mundo. Essa vitória também é sua minha irmã querida!

Quando terminei o mestrado em Itajubá fiquei muito apreensiva com o futuro incerto, mas um telefonema da professora Maria Cristina me tranquilizou com a oportunidade de um doutorado em Juiz de Fora, a apenas 100 km da minha casa em Barbacena. Me mudei imediatamente, e nesse momento meu amigo Guilherme também vindo da UNIFEI me acolheu e me ajudou a encontrar meu canto em JF. Tio Guilhermes, você não está mais entre nós, está em uma plano superior ao meu, mas saiba que você é muito importante para mim e para tantos outros por aqui.

Me instalei em Juiz de Fora e iniciei as disciplinas sem ainda ter escolhido um orientador. Não conhecia os professores ainda e não queria errar na escolha, e nada melhor do que a escolha bater a sua porta. O Sidiney estava à procura de um orientando de doutorado e disse que se eu tivesse interesse poderia procurá-lo para conversar. Primeiro, fui verificar a sua área de atuação, e fiquei mais confortável de ir falar com ele, pois já havia trabalhado com simulação computacional na iniciação científica em São João del Rei. A parte que ele ainda não sabe, é que fui perguntar sobre ele aos meus colegas formados na UFJF. Meus amigos o qualificaram como

um professor muito acessível, preocupado com o ensino e com boas ideias. Na parte do muito acessível eu já tinha me convencido a ir falar com ele e a partir de então fizemos nossa parceria. O Sidiney foi me situando sobre o tema em foco e me direcionando nos estudos. À medida que o tempo passava nossa relação orientada-orientador foi se tornando cada vez mais produtiva e agradável. Hoje, posso repetir que o Sidiney é mesmo muito acessível, preocupado, com boas ideias e capaz de ensinar/direcionar como alguém que faz parte do processo e não como um ditador dele. Obrigada Sidiney, por sua paciência nas minhas ausências, pela oportunidade de um trabalho investigativo tão interessante e pela dedicação aos seus alunos. Essa tese também é sua!

O professor Sato forneceu uma disciplina que em nenhuma instituição que frequentei ouvi falar de sua existência. Tópicos de Métodos Computacionais aplicados à Física foi uma disciplina base para o meu trabalho de doutorado. Foi sobre o conteúdo aprendido nela que cada tijolinho dos programas foram sendo colocados, e por isso, Sato, essa tese também tem uma grande participação sua. Além disso, a UFJF tem muito a lhe agradecer pela sua dedicação e inovação na nossa área. Os professores Rodrigo e Pablo apesar de não terem lecionado para mim durante esse período foram muito importantes na execução do meu trabalho. O Rodrigo nas dicas sobre o programa, que diga-se de passagem, sempre deram certo, e o Pablo sempre me ajudando a conduzir os resultados ao seu real significado Físico. Vocês também contribuíram para o resultado apresentado nas páginas que se seguem. Além de tudo isso, a convivência com vocês tornou-me uma profissional melhor.

Em meio a tantos que me ajudaram, uma figura se destaca. O Danilo acompanhou o meu trabalho de perto todo esse período sendo co-autor em quase tudo que estudei e fiz. Sempre presente e solícito resolvendo problemas tanto da programação quanto da análise dos resultados. Zandro, sintase doutor junto comigo. A sua garrafa de Whisky está a caminho!

Durante todos os anos, encontrei pessoas que se tornaram grandes amigos aqui em JF. A Luciana foi a primeira a me acolher e me enturmar com o pessoal, e hoje a considero uma amiga que carrego para onde for. O Marreco revelou-se um verdadeiro amigo e também companheiro das farras. Outra figura marcante é o Denilson, assim como a Arlete e as meninas. Meu amigo Denilson sempre falante e cujas ideias eu sempre admirei, você já possui seu lugarzinho cativo em meu coração. Wesley, meu amigo, reencontrar você como colega de estudos foi ótimo. Você sempre representou um porto seguro para mim durante essa jornada. Geraldo, sua disponibilidade em nos ajudar sempre chamou a atenção, e não só isso, nas farras da turma também criamos laços e isso a gente não esquece. Rejane, você também está incluída aqui. Cleber, a sua humildade é comovente, e dividir esse espaço com você foi de um aprendizado grandioso. Obri-

gada por nos dar o que muitos jamais conseguirão entender: simplicidade. Zé Henrique você também tem contribuições nessa tese. Suas dicas, sua atenção para com meus problemas, sua dedicação aos colegas e a mim especificamente fazem de você uma pessoa singular. Para somar esse grupo temos o Alisson, compartilhando nossos momentos de estudos e de lazer, e mesmo sendo obrigado a aguentar as fofocas da nossa sala, nunca reclamou. Poliane, obrigada por nos representar nesse período, obrigada pela alegria e amizade nos momentos que partilhamos.

Em meio a tantos nomes, duas grandes descobertas foram feitas nesse doutorado, os meus amigos Fabiana e Cristiano, que representam bem essa etapa da minha vida. Quanto compartilhamos... O trio fantástico, onde o casal estava me carregava junto a eles. E como foi proveitoso esses momentos. Agora que estão distantes, vejo como Juiz de Fora ficou diferente para mim. Sinto imensamente a falta de vocês...

Não poderia esquecer-me do Dante, que compartilhou tanto comigo durante esse período. Ouviu minhas reclamações, enxugou minhas lágrimas, dividiu gargalhadas e sempre me apoiou. Você faz parte dessa conquista meu amigo. Obrigada por estar presente nessa jornada.

Não posso deixar de citar os amigos distantes, que mesmo longe me incentivaram e me empurraram para frente nessa caminhada: William e Ana Paula vocês sempre serão citados, pois sempre estarão comigo. Também agradeço àquela que cuidou de mim nesses últimos dois anos e acabou se tornando uma amiga querida, Claudinha, você é 10! Transformou minha estadia aqui em momentos muito mais alegres... você é contagiante! Sentirei sua falta! Completando esse time tem a Lu, que além de desfazer meus nós de tensão compartilha comigo conversas infinitamente prazerosas. Lu, você é super!!! Pensando bem, estou rodeada de pessoas alto astral e que sempre completam o meu dia... Wal, você também é uma delas, amo nossas conversas e comungo tanto do seu jeito de viver e de ser... Obrigada pela força nessa reta final!

Durante o doutorado fui aprovada em dois concursos, o primeiro no Colégio Técnico da UFRRJ, em Seropédica, e o segundo, no Instituto Federal do Sudeste de MG em Barbacena, ambos à princípio trariam problemas a minha continuação no doutorado, e de fato trouxeram. Só consegui continuar com as duas tarefas (e mesmo assim à duras penas) devido à ajuda de pessoas muito especiais. Em Seropédica, o diretor Ricardo, as coordenadoras Sandra e Elaine e os professores Cristiane e Anivaldo trocaram o meu horário duas vezes para que eu pudesse fazer a disciplina Quântica IV e ainda redistribuíram algumas de minhas aulas. A vocês muito obrigada pela ajuda, foi um período muito tumultuado e sem vocês eu não conseguiria conciliar trabalho, estudos e adaptação a nova cidade. Depois, em Barbacena, a partir de 2010, onde novamente meus horários foram atendidos, apesar da carga horária máxima inicial de 24 aulas. Só consegui efetivamente conciliar trabalho e doutorado depois que Fernanda e Aquiles me

ajudaram, ficando com uma carga horária acima da minha e quebrando “meus galhos” nas minhas ausências. Sem a ajuda de vocês dois e também da Roseli que prontamente me atendia, esse doutorado ainda estaria se arrastando a passos curtos, portanto Fernanda, Aquiles e Roseli, obrigada pela consideração e ajuda.

Muitos outros participaram dessa conquista: Juzis, Alcides, meu primo Marcelo, Josimar, Leandro Dueli, Ricardo Madureira, Tayarol, obrigada a todos por compartilharem esses anos comigo. Alunos queridos, principalmente aqueles dos 3^o anos de Química e Hospedagem de 2012 valeu mesmo pela torcida! Aqui estou eu!

Ao secretário da pós-graduação, Domingos, agradeço a dedicação e empenho. Nunca vi um funcionário público tão competente quanto você. À UFJF, meu muito obrigada pela oportunidade e estrutura e aos órgãos de fomento FAPEMIG e CAPES, obrigada pelo auxílio financeiro em parte desse trabalho e nos eventos participados.

Enfim, a todos que torceram por mim... MUITO OBRIGADA!!!

RESUMO

O entendimento dos processos que envolvem a magnetização de ferromagnetos torna-se cada vez mais necessário frente às recentes aplicações tecnológicas em mídias magnéticas, cabeças de leitura e escrita e MRAMs. O estudo de nanofios magnéticos revela a presença de paredes de domínios do tipo vórtice ou transversal que podem ser transportadas para diferentes regiões sem deformação, tendo assim um grande potencial para aplicações tecnológicas. A manipulação da parede de domínio no nanofio é feita através da aplicação de campos magnéticos ou correntes de spin-polarizado. Controlar o movimento das paredes de domínio nos nanofios magnéticos é fundamental a sua aplicabilidade em tecnologias de memórias e dispositivos lógicos. Neste trabalho, usando simulações numéricas, apresentamos um estudo da dinâmica da parede de domínio transversal “*head-to-head*” em nanofios magnéticos de Permalloy-79. Em nossas simulações os nanofios são modelados por uma hamiltoniana que leva em consideração a interação de troca e a interação dipolar, e a dinâmica do sistema é regida pelas equações de Landau-Lifshitz-Gilbert. A parede de domínio se move sob a ação de pulsos de campo magnético aplicado na direção do eixo do nanofio. Desta forma, analisamos a influência da espessura e largura do nanofio e da amplitude de campo magnético no valor da velocidade da parede de domínio. Propomos a inclusão de uma impureza magnética pela alteração da constante de troca J para J' entre o sítio com a impureza magnética e seus vizinhos. A impureza magnética pode se comportar como um sítio de aprisionamento da parede de domínio ou como um sítio de espalhamento, dependendo da variação da constante de troca J' em relação ao seu valor de referência J . Este comportamento pode ser de grande interesse no controle da posição da parede de domínio. Estudamos o comportamento do potencial de interação entre a impureza e a parede de domínio. Variando-se a posição da impureza percebemos que a energia de interação aumenta quando ela se encontra próxima ao polo sul da parede de domínio transversal, favorecendo o aprisionamento ou a repulsão da parede. Observamos que a impureza magnética afeta a velocidade da parede de domínio. Realizamos um estudo sobre o campo magnético necessário para a liberação de uma parede de domínio que se encontra aprisionada em uma impureza magnética. Estabelecemos uma relação entre este campo magnético e a largura do nanofio. Observamos também que sob a aplicação de um pulso de campo magnético acima do campo de Walker, a parede de domínio pode inverter sua polaridade ao atingir a impureza e inverter o sentido de sua propagação. Nossos resultados mostram que uma potencial aplicação tecnológica em dispositivos de memória pode ser o uso de impurezas magnéticas inseridas litograficamente em nanofios magnéticos para o controle da posição das paredes de domínio.

Palavras-chave: Nanofios magnéticos, impurezas magnéticas, parede de domínio transversal.

ABSTRACT

The understanding of the processes involving the magnetization of ferromagnets becomes increasingly necessary in the face of recent technological applications in magnetic media, reading and writing heads and MRAMs. The study of magnetic nanowires reveals the presence of vortex domain walls or transverse domain walls that can be transported to different regions without deformation, generating a great potential for technological application. The domain wall manipulation in the nanowire is made by applying a magnetic field or spin-polarized current. Controlling the movement of domain walls in magnetic nanowires is fundamental to its applicability in memory technologies and logic devices. In this work, using numerical simulations, we present a study of the dynamics of the “head-to-head” transverse domain wall in magnetic nanowires made of Permalloy-79. In the simulations the nanowires are modeled by a Hamiltonian that takes into account the exchange interaction and dipolar interaction and the dynamics of the system is governed by Landau-Lifshitz-Gilbert equations. The domain wall moves under the influence of pulses of magnetic field. Thus, we analyzed the influence of the thickness and width of the nanowire and the amplitude of the magnetic field in the domain wall velocity. We propose the inclusion of a magnetic impurity by changing the exchange constant J to J' between a site with impurity and its neighbors. The magnetic impurity can behave like a pinning or scattering site to the domain wall depending on the variation of the exchange constant J' in relation to the value of reference J . This behavior can be of great interest to control the position of the domain wall. We studied the behavior of the interaction potential between impurity and domain wall. Varying the position of the impurity we observed that the interaction energy increases when it is near to the south pole of the domain wall favoring the pinning or scattering of the wall. We observed that the magnetic impurity affects the domain wall velocity. We performed a study of the magnetic field required for depinning the domain wall which is pinned to a magnetic impurity. We established a relation between the depinning magnetic field and the width of the nanowire. We also observed that under the influence of a pulse of magnetic field above the Walker field the domain wall can reverse its polarity when achieving attractive impurity and reverse the direction of propagation. We believe that a potential technological application in memory devices can be the use of magnetic impurities lithographically inserted in magnetic nanowires to control the positions of the domain walls.

Keywords: Magnetics nanowires, magnetic impurities, transverse domain-wall

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Ilustração de um cabeçote indutivo à esquerda e de um cabeçote magnetorre-sistivo à direita.	22
Figura 1.2	Modelo de um dispositivo lógico de ondas de spin que utiliza paredes de do-mínio para codificar os dados. Figura extraída de [4].	23
Figura 1.3	Memória pista ou “ <i>recetrack</i> ” em um nanofio ferromagnético com os dados codificados pelo padrão dos domínios magnéticos. Figura extraída de [6].	24
Figura 1.4	Nanofio em forma de ampulheta com uma parede de domínio transversal de largura Δ . Figura retirada de [9].	25
Figura 1.5	Corte geométrico introduzido no nanofio para gerar um potencial de aprisio-namento da parede de domínio do tipo vórtice. Figura extraída de [30].	26
Figura 1.6	Regiões de confinamento de paredes de domínio criadas no nanofio por apli-cações de campos magnéticos externos em (a), e por uma região de curvatura em (b).	27
Figura 2.1	Estrutura de domínios magnéticos em um material desmagnetizado.	32
Figura 2.2	Origem do campo desmagnetizante \vec{H}_d	34
Figura 3.1	Processo de formação de domínios.	37
Figura 3.2	Tipos de paredes de domínio: (a) PD de 180°. (b) PD de 90°. (c) os dois tipos de PD em uma mesma amostra.	38
Figura 3.3	Parede de domínio de Bloch.	39
Figura 3.4	Parede de domínio de Néel.	39
Figura 3.5	Parede de domínio com estrutura de fechamento.	40
Figura 3.6	Largura δ da parede de domínio.	41
Figura 3.7	Diferentes definições do cálculo da largura da parede de domínio.	44
Figura 3.8	Imagem MFM de um fio de Co de 35 nm de diâmetro para $\vec{H} = 0$ após sa-	

	turação em (a) campo magnético paralelo ao fio, e (b) campo magnético perpendicular ao fio.	46
Figura 3.9	Comprimento L , largura w e espessura t ao longo dos eixos x , y e z respectivamente do nanofio, com $L \gg w > t$	47
Figura 3.10	Configuração de uma PDT e de uma PDV.	48
Figura 3.11	Comparação entre as configurações das paredes de domínios encontradas nos nanofios: a) PDT; b) PDV e c) PDTA. Retirado de [48].	48
Figura 3.12	Estrutura de paredes de domínio em um nanofio de Permalloy de $w = 300$ nm e $t = 5$ nm. Retirado de [50].	49
Figura 3.13	Configurações de paredes de domínio do tipo (a) “ <i>tail-to-tail</i> ” e (b) “ <i>head-to-head</i> ”.	50
Figura 3.14	Diagrama de fase para as estruturas de parede de domínio tipo vórtice e transversal. Retirado de [47].	51
Figura 3.15	Diagrama de fase para as estruturas de parede de domínio tipo vórtice, transversal e transversal assimétrica. Retirado de [48].	51
Figura 3.16	Comparação entre a energia em função da espessura de um nanofio de $w = 300$ nm para os três tipos de PD possíveis.	52
Figura 3.17	Parâmetro de largura da PDT para espessura t do nanofio em função da sua largura. Retirado de [48].	53
Figura 3.18	Movimento da PDT acima do campo de Walker para $\mu_0 H = 2,6$ mT em (a) e $\mu_0 H = 4,0$ mT em (b) em um nanofio de material macio. Retirado de [50].	56
Figura 3.19	Velocidade de uma PDT em um filme fino sob a ação de um campo magnético somado a uma corrente de spin polarizada. Figura retirada de [50].	60
Figura 4.1	Modelo de uma célula de rede FCC.	75
Figura 4.2	Representação do modelo micromagnético. Retirado de [69].	76
Figura 4.3	Esquema representando o modelo de impureza pela mudança de J por J' entre as células vizinhas. Retirado de [70].	84
Figura 5.1	Configurações de spins iniciais dadas aos nanofios.	88
Figura 5.2	Evolução da energia total do sistema (energia de troca somada à energia dipolo-	

	lar) em função do tempo.	88
Figura 5.3	Configurações de spins obtidas para um nanofio no estado fundamental. . .	89
Figura 5.4	Combinação entre a largura e espessura para os 13 nanofios gerados. . . .	90
Figura 5.5	Exemplo do formato do pulso de campo da equação aplicado sobre os nanofios magnéticos.	92
Figura 5.6	Sequência temporal do movimento de uma PDT em um nanofio com $\alpha = 0$ sob a aplicação de um pulso de 1 ns de duração.	93
Figura 5.7	Velocidade da PDT em um nanofio de dimensões $(5 \times 15 \times 1255)$ nm ³ com um campo de amplitude $\mu_0 H_{ap} = 6$ mT.	93
Figura 5.8	Velocidade da PDT em um nanofio de dimensões $(5 \times 20 \times 1255)$ nm sob um campo externo de amplitude 2,0 mT.	94
Figura 5.9	Comparação entre as velocidades da PDT em um nanofio de dimensões $5 \times 30 \times 1255$ nm sob diferentes pulsos de campo magnético.	95
Figura 5.10	Velocidade máxima alcançada pela PDT em função da amplitude de campo magnético $\mu_0 H_{ap}$ para os nanofios de espessura $t = 5$ nm estudados. . .	96
Figura 5.11	Velocidade média da PDT em um nanofio de $t = 5$ nm para diferentes larguras em função da amplitude de campo magnético $\mu_0 H_{ap}$	97
Figura 5.12	Velocidade da PDT em função da amplitude de campo magnético aplicado em nanofios com 10 nm de espessura.	98
Figura 5.13	Velocidade da PDT em função da amplitude de campo magnético aplicado em nanofios com 15 nm de espessura.	98
Figura 5.14	Velocidade da PDT em função da amplitude de campo magnético aplicado em um nanofio de largura $w = 20$ nm para as espessuras $t = 5, 10$ e 15 nm. . .	99
Figura 5.15	Velocidade da PDT em nanofios com amortecimento $\alpha = 0,01$	100
Figura 5.16	Sequência temporal do movimento de uma PDT em um nanofio com $\alpha = 0,01$ sob a aplicação de um pulso de 1 ns de duração.	101
Figura 5.17	Sequência de movimento da PDT em um nanofio sob a aplicação de um campo magnético constante de 25 mT.	103
Figura 5.18	Gráficos de velocidade e posição da PDT em um nanofio de $(5 \times 35 \times 1255)$	

	nm com um campo externo constante de 25,0 mT durante todo o tempo.	104
Figura 5.19	Dinâmica da PDT próxima a uma impureza atrativa ($J' < J$) em um nanofio de $w = 25$ nm.	105
Figura 5.20	Dinâmica da PDT próxima a uma impureza magnética repulsiva ($J' > J$).	106
Figura 5.21	Representação dos eixos x e y em um nanofio magnético.	106
Figura 5.22	Potencial atrativo para a impureza $J'/J = 0,1$ na posição $y/a = -4,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$.	107
Figura 5.23	Potencial atrativo para a impureza $J'/J = 0,1$ na posição $y/a = -0,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$.	108
Figura 5.24	Posição de equilíbrio da PDT no aprisionamento por uma impureza magnética atrativa em $y/a = -0,5$.	109
Figura 5.25	Potencial atrativo para a impureza $J'/J = 0,1$ na posição $y/a = +4,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$.	110
Figura 5.26	Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética $J'/J = 0,1$ em função da posição x/a da impureza para todas as ordenadas y/a possíveis a uma impureza pontual em um nanofio de largura 45 nm.	110
Figura 5.27	Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética $J'/J = 0,1$ em função da posição x/a da impureza para todas as ordenadas y/a possíveis a uma impureza pontual em um nanofio de largura 25 nm.	112
Figura 5.28	Potencial repulsivo para a impureza $J'/J = 2,5$ na posição $y/a = -4,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$.	113
Figura 5.29	Potencial repulsivo para a impureza $J'/J = 2,5$ na posição $y/a = -0,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$.	114
Figura 5.30	Potencial repulsivo para a impureza $J'/J = 2,5$ na posição $y/a = 4,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$.	114
Figura 5.31	Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética $J'/J = 2,5$ em função da posição x/a da impureza para todas as ordenadas y/a possíveis a uma impureza pontual em um nanofio de largura 45 nm.	115
Figura 5.32	Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética $J'/J = 2,5$ em função da posição x/a da impureza para algumas ordenadas y/a onde pode	

	ser inserida uma impureza pontual em um nanofio de largura 25 nm.	116
Figura 5.33	Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética $J'/J = 2,5$ em função da posição x/a da impureza para algumas ordenadas y/a onde pode ser inserida uma impureza pontual em um nanofio de largura 85 nm.	116
Figura 5.34	Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética $J'/J = 0,1$ em função da largura w/a do nanofio.	117
Figura 5.35	Alcance do potencial de interação entre a PDT e a impureza magnética para $w = 25,45$ e 85 nm.	118
Figura 5.36	Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética para os valores de J'/J mostrados em função da posição x/a em um nanofio de largura 25 nm.	119
Figura 5.37	Módulo da energia de interação entre a PDT e a impureza magnética em função dos valores de $ 1 - (J'/J) $	120
Figura 5.38	Energia de interação entre a PDT e o cluster de impureza magnética $J'/J = 0,1$ em função da posição x/a do cluster de impurezas para três posições y/a em um nanofio de largura 45 nm.	121
Figura 5.39	Gráficos da velocidade da PDT em um nanofio de $10 \times 10 \times 1255 \text{ nm}^3$ sem impureza em (a), e com uma impureza atrativa em (b).	123
Figura 5.40	Velocidade da PDT em função do tempo durante o aprisionamento da mesma em uma impureza atrativa sob uma campo magnético de amplitude 1,5 mT.	125
Figura 5.41	Velocidade da PDT em função do tempo para um campo magnético de amplitude 2,0 mT em um nanofio com uma impureza atrativa.	126
Figura 5.42	Velocidade da PDT em função do tempo para um nanofio com uma impureza magnética atrativa, sob a ação de um campo magnético de amplitude 2,5 mT em (a) e, 3,5 mT em (b).	127
Figura 5.43	Velocidade da PDT em função do tempo para um campo magnético de amplitude 2,0 mT.	129
Figura 5.44	Velocidade da PDT em função do tempo para um campo magnético de amplitude 2,5 mT.	130
Figura 5.45	Velocidade da PDT em função do tempo para em um nanofio com uma impureza magnética repulsiva, sob a ação de um campo magnético de amplitude	

	3,0 mT em (a) e, 3,5 mT em (b).	130
Figura 5.46	Gráficos da velocidade da PDT em um nanofio de $10 \times 25 \times 1255 \text{ nm}^3$ com uma impureza atrativa em $y/a = -0,5$ em (a) e em $y/a = 0,5$ em (b). . .	132
Figura 5.47	Velocidade da PDT em função do tempo para um campo magnético de amplitude 2,0 mT e uma impureza magnética repulsiva em $y/a = -1,5$. . .	134
Figura 5.48	Gráficos da velocidade da PDT que se move sob a ação de um campo de 2,0 mT em um nanofio de $10 \times 25 \times 1255 \text{ nm}$ com uma impureza atrativa em $y/a = -0,5$ em (a) e, $y/a = 1,5$ em (b).	135
Figura 5.49	Gráficos da velocidade da PDT em função do tempo sob a ação de um campo magnético de amplitude 1,0 mT.	136
Figura 5.50	Posição escolhida para 4 impurezas magnéticas em um mesmo nanofio. . .	138
Figura 5.51	Velocidade da PDT em função tempo sob a ação de um campo magnético de amplitude 1,0 mT em um nanofio de 25 nm de largura com 4 impurezas locais repulsivas.	139
Figura 5.52	Gráficos da velocidade da PDT em função do tempo em um nanofio de largura 20 nm com 4 impurezas locais repulsivas sob a ação de um campo magnético de amplitude em (a) de 1,0 mT e em (b) de 2,0 mT.	139
Figura 5.53	Gráficos da velocidade da PDT em função do campo sob a aplicação de um campo magnético de amplitude 2,0 mT com uma impureza magnética atrativa de uma única célula em (a) e uma impureza atrativa ocupando 4 células em (b).	142
Figura 5.54	Gráficos da velocidade da PDT em função do tempo sob a aplicação de um campo magnético de amplitude 2,0 mT com uma impureza magnética ocupando uma única célula em (a) e um “ <i>cluster</i> ” de impurezas em (b). . . .	142
Figura 5.55	Campo de “ <i>depinning</i> ” H_{dep} da PDT em uma impureza atrativa $J'/J = 0,5$ na posição $y/a = -w/a$ em função da largura do nanofio.	144
Figura 5.56	Campo de “ <i>depinning</i> ” em função do valor J'/J para uma impureza atrativa em um nanofio de largura 10 nm em (a) e 25 nm em (b) inserida no polo sul da PDT.	145
Figura 5.57	Inversão da polarização da PDT ao atingir uma impureza magnética atrativa. . .	147
Figura 5.58	Sequência do mesmo movimento da PDT mostrado na figura 5.57 sob um	

	ângulo que nos mostra a magnetização em z	149
Figura 5.59	Magnetização do nanofio no eixo y em função do tempo, enquanto a PDT se move devido um pulso magnético de amplitude de 9 mT.	150
Figura A.1	Torque de precessão e torque de amortecimento sobre o momento angular de um elétron em uma região de campo estático \vec{H}	156
Figura A.2	Precessão do momento magnético de um elétron na presença de um campo estático \vec{H} e com um parâmetro de amortecimento positivo. Figura retirada de [73].	158

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1 Menor energia dos 13 nanofios gerados nas configurações PDT e PDV.	91
Tabela 5.2 Variação da velocidade da PDT em m/s ao passar pela impureza atrativa $J'/J = 0,2$ no nanofio de $w = 25$ nm.	124
Tabela 5.3 Variação da velocidade da PDT em m/s ao passar pela impureza repulsiva $J'/J = 2,5$ no nanofio de $w = 25$ nm.	128
Tabela 5.4 Variação da velocidade da PDT em m/s ao passar pela impureza atrativa $J'/J = 0,2$ encontrada nas diferentes posições y/a de um nanofio de 25 nm de largura.	131
Tabela 5.5 Intervalo de tempo de duração da variação da velocidade da PDT em ns ao passar pela impureza atrativa $J'/J = 0,2$ sob a ação de um campo de 2,0 mT encontrada nas diferentes posições y/a de um nanofio de 25 nm de largura.	133
Tabela 5.6 Variação da velocidade da PDT em m/s ao passar pela impureza repulsiva $J'/J = 2,5$ encontrada nas diferentes posições y/a no nanofio de $w = 25$ nm.	133
Tabela 5.7 Variação da velocidade da PDT em m/s ao passar pela impureza atrativa $J'/J = 0,7$	135
Tabela 5.8 Variação da velocidade da PDT na nanofita em m/s ao passar pela impureza $J'/J = 1,5$	137
Tabela 5.9 Variação da velocidade da PDT em m/s sob a ação de um pulso de campo magnético de 2,0 mT em um nanofio de 25 nm para vários J'/J	140

LISTA DE ABREVIACOES

MRAM	Memria de Acesso Aleatrio
RM	Memria Pista
T_c	Temperatura de Curie
PD	Parede de Domnio
S.I.	Sistema Internacional de Medidas
PDT	Parede de Domnio do tipo Transversal
PDV	Parede de Domnio do tipo Vrtice
L.L.G.	Landau-Lifshitz-Gilbert
H_{dep}	Campo de “ <i>depinning</i> ”
H_{ult}	Campo de ultrapassagem

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	21
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA DO MAGNETISMO	29
2.1	MAGNETISMO FUNDAMENTAL	29
2.2	ENERGIA LIVRE MAGNÉTICA	33
3	DOMÍNIOS MAGNÉTICOS	36
3.1	PAREDES DE DOMÍNIO MAGNÉTICO	37
3.1.1	Paredes de 180° e 90°	38
3.1.2	Paredes de Bloch e Néel	38
3.1.3	Paredes de Domínio com Estrutura de Fechamento	39
3.1.4	Largura da Parede de Domínio	40
3.2	NANOFIOS MAGNÉTICOS	45
3.2.1	Paredes de Domínio nos Nanofios Retangulares	46
3.3	MOVIMENTO DAS PAREDES DE DOMÍNIO	53
3.3.1	Movimento da parede de domínio por campos magnéticos	53
3.3.1.1	Movimento da parede de domínio acima do campo de Walker	55
3.3.2	Movimento da parede de domínio por corrente de spin polarizada	57
4	MODELO TEÓRICO PROPOSTO PARA O ESTUDO DOS NANOFIOS MAGNÉTICOS E METODOLOGIA NUMÉRICA	61
4.1	MODELO DE HEISENBERG	61
4.1.1	Energia de Troca	62

4.1.2	Anisotropias magnéticas	63
4.1.3	Energia Zeeman	65
4.2	CAMPO LOCAL EFETIVO	66
4.3	DINÂMICA DE SPINS	67
4.4	O LIMITE CLÁSSICO	71
4.5	AVALIAÇÃO DO NÚMERO TOTAL DE SPINS EM UM SISTEMA DE DIMENSÕES REAIS	74
4.6	SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA	75
4.7	INTEGRAÇÃO DA EQUAÇÃO DE MOVIMENTO	81
4.7.1	Método de Runge Kutta de 4ª Ordem	82
4.7.2	Método Preditor-Corretor de 4ª ordem	83
4.8	O MODELO DE IMPUREZA MAGNÉTICA	84
4.8.1	Determinação da velocidade da parede de domínio transversal no nanofio	85
5	RESULTADOS	87
5.1	GERAÇÃO DOS NANOFIOS MAGNÉTICOS	87
5.2	VELOCIDADE DAS PAREDES DE DOMÍNIO SOB A AÇÃO DE UM CAMPO MAGNÉTICO APLICADO	92
5.2.1	Movimento da parede de domínio sem amortecimento	92
5.2.2	Movimento da parede de domínio com amortecimento	99
5.2.3	Aplicação de um Campo Magnético Constante muito Acima do Campo de Walker	101
5.3	ESTUDO DA INTERAÇÃO ENTRE IMPUREZAS MAGNÉTICAS E A PDT	104
5.3.1	Potencial de interação de uma impureza magnética atrativa	107
5.3.2	Potencial de interação de uma impureza magnética repulsiva	112
5.3.3	Relação entre a impureza magnética e a largura do nanofio	115
5.3.4	Tipo de impureza	118
5.3.5	Inclusão de um “ <i>cluster</i> ” de impurezas	120

5.4	INFLUÊNCIA DAS IMPUREZAS MAGNÉTICAS NA DINÂMICA DA PAREDE DE DOMÍNIO TRANSVERSAL	123
5.4.1	Uma impureza magnética atrativa	124
5.4.2	Uma impureza magnética repulsiva	128
5.4.3	Relação entre a variação da velocidade da parede de domínio e o posicionamento da impureza sobre o eixo y/a	131
5.4.4	Comparando nanofios de larguras diferentes	135
5.4.4.1	Mais de uma impureza sobre o nanofio	138
5.4.5	Variando o tipo de impureza magnética	140
5.4.6	Um “ <i>cluster</i> ” de impurezas de dimensões $10 \times 10 \times 10$ (nm) ³	141
5.4.7	Campo de “ <i>depinning</i> ” da parede de domínio transversal	142
5.4.8	Espalhamento da parede de domínio transversal	145
5.4.9	Inversão da polaridade da PDT por uma impureza magnética atrativa	146
6	CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS	151
	APÊNDICE A -	155
A.1	OPERADORES DE SPIN	155
A.2	EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT	155
	REFERÊNCIAS	160
	ANEXO A – ARTIGO PUBLICADO	165

1 INTRODUÇÃO

Desde a descoberta de magnetos permanentes no século XIV, os fenômenos ligados ao magnetismo vêm sendo amplamente investigados e estendidos a inúmeras aplicações tecnológicas. Com o desenvolvimento da nanotecnologia, nanopartículas magnéticas inseridas em outros meios podem ser aplicadas desde ressonâncias magnéticas para diagnosticar doenças com muita precisão [1], até o uso de polímeros para separar o petróleo da água [2], no caso de um derramamento de óleo. A aplicação mais bem sucedida do nanomagnetismo tem sido a gravação magnética, com acelerada evolução nas últimas décadas. A densidade de bits em área do disco rígido aumentou por um fator de dezenas de milhões desde a introdução desta tecnologia no mercado.

A gravação magnética foi introduzida pela propriedade de um cabeçote de gravação gerar um campo magnético em resposta a uma corrente elétrica. O campo gerado altera a magnetização de um meio magnético próximo, o que permite armazenar nele a informação contida no sinal elétrico. A leitura do sinal gravado se dá pela indução, ou seja, a mídia magnetizada (fita ou disco) em movimento sobre o cabeçote de leitura induz nele uma corrente elétrica que traduz a informação gravada de maneira inversa. O sinal obtido está diretamente relacionado com a velocidade relativa do cabeçote e com o tamanho do bit, que é a região magnetizada ou domínio magnético (figura 1.1). Através da descoberta da magnetorresistência gigante, em uma válvula de spin quando as camadas de fora (camadas ferromagnéticas) estão com alinhamento magnético contrário um ao outro, o dispositivo tem resistência elétrica alta. Entretanto, quando o alinhamento é paralelo, gerado pelo campo magnético externo, a resistência é menor, da ordem de 50 % da configuração anterior. Tal aplicação permite que esse dispositivo seja miniaturizado, mantendo uma ótima sensibilidade, o que leva à leitura de áreas cada vez menores da mídia e, conseqüentemente, um aumento considerável na densidade superficial de bits que podem ser gravados por unidade de área.

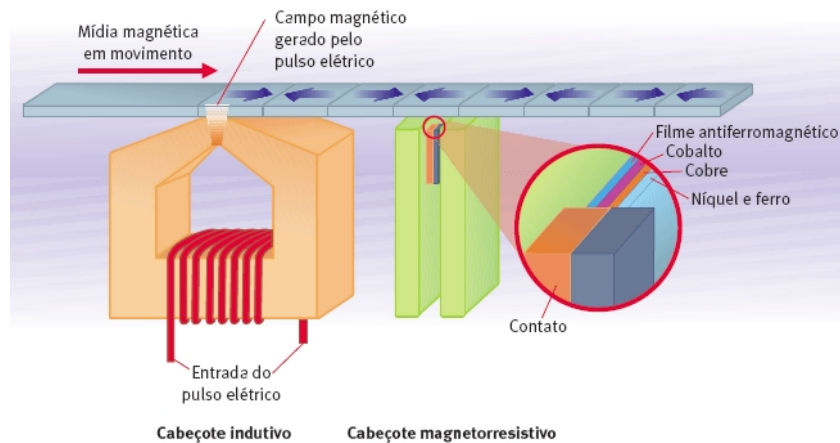


Figura 1.1: Ilustração de um cabeçote indutivo à esquerda e de um cabeçote magnetorresistivo à direita. Para gravar uma informação, ambos os sistemas contêm um cabeçote indutivo, onde um pulso elétrico é transformado em campo magnético, que, por sua vez, altera a magnetização da mídia. No caso convencional, a leitura é feita pelo mesmo cabeçote, transformando em sinais elétricos os campos magnéticos variáveis que são detectados. Já no sistema à direita, existe o segundo cabeçote, baseado no princípio da magnetorresistência, que é muito mais sensível para detectar uma região magnetizada pela alteração de sua resistência elétrica. Figura retirada de [3].

Para atingir densidades de armazenamento cada vez maiores, um grande esforço foi necessário no estudo das propriedades de partículas e filmes magnéticos, os quais são parte constitutiva de discos rígidos e cabeças de leitura magnética. Os nanofios magnéticos, entre outras aplicações, podem armazenar e processar informações através do movimento das paredes de domínio. As paredes de domínio surgem em estruturas magnéticas tanto nano quanto micrométricas e podem ser transportadas para diferentes regiões sem perder a sua forma magnética, tendo assim um grande potencial para aplicação em mídias magnéticas, cabeças de escrita/leitura, MRAM e estrutura similares. Algumas das aplicações incluem a codificação da informação para uma série de domínios magnéticos em nanofios magnéticos. Na prática, a base do armazenamento de dados é que, em uma geometria essencialmente bidimensional, pequenos volumes de material são magnetizados, e uma sequência dessas regiões magneticamente ordenadas correspondem aos dígitos binários, representados por “0” ou “1”. A variação do estado de magnetização desses volumes pode ser identificada por um transdutor e, por conseguinte, os bits gravados podem ser lidos.

Uma das formas de aplicação da magnetização em dispositivos lógicos foi estudada por Nakai *et al.* [4], quando, através de simulação micromagnética, propuseram um dispositivo que realiza operações lógicas através da interação entre ondas de spin e paredes de domínio. Para seu desenvolvimento é necessário um nanofio ferromagnético com magnetização perpendicular à superfície e de baixo amortecimento, compondo um esquema como o apresentado na figura 1.2. Um pulso de correntes de microondas emitido por cada um dos dois geradores colocados

próximos às extremidades opostas do nanofio são os responsáveis pela geração de dois pacotes de ondas de spin que se propagam em sentidos contrários. As duas regiões de largura $w = 10$ nm, na figura 1.2, possuem anisotropia perpendicular capaz de aprisionar uma parede de domínio. Uma área retangular no fio de $0,01 \mu\text{m}^2$ detecta a voltagem de saída induzida pela variação de fluxo magnético quando a onda de spin a atinge.

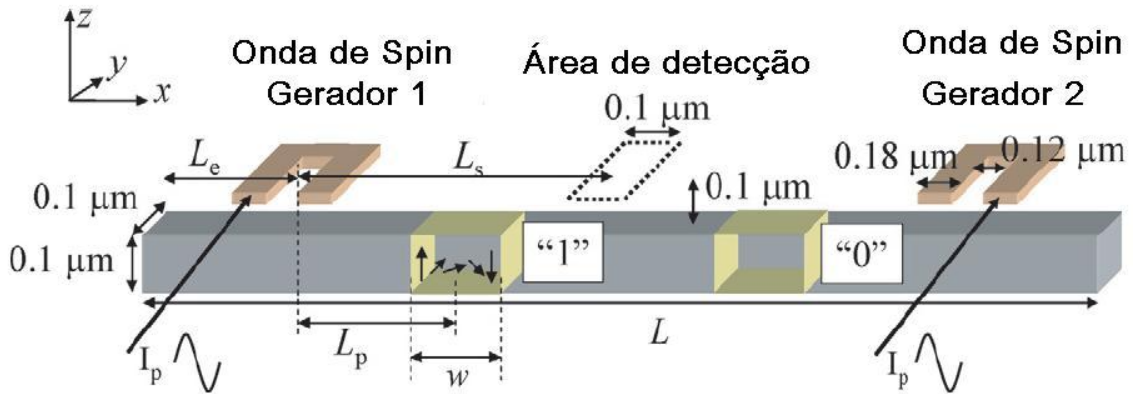


Figura 1.2: Modelo de um dispositivo lógico de ondas de spin que utiliza paredes de domínio para codificar os dados. L , L_e e L_s são respectivamente o comprimento do nanofio, a distância da borda do fio até o gerador 1 e a distância do gerador 1 até o sítio de aprisionamento. I_s é a intensidade da corrente de microondas emitida pelo gerador. Figura extraída de [4].

Quando a onda de spin é gerada e se propaga, o código binário “0” ou “1” indica respectivamente a ausência ou existência da parede de domínio através da medição da voltagem. Quando as duas paredes de domínio estão presentes nos dois locais de aprisionamento, a voltagem de saída medida é menor. Isto ocorre porque quando a onda de spin atravessa a região da parede de domínio, ocorre uma mudança de fase, e então, as duas ondas de spin emitidas pelos geradores se sobrepõem induzindo uma magnetização divergente M_x na área de detecção, o que torna a voltagem medida menor. O mesmo acontece quando não há parede de domínio em nenhuma das regiões de aprisionamento. Porém, se existe apenas uma parede de domínio em um dos sítios, só ocorre a mudança de fase em uma das ondas de spin. Quando elas atingem a área de detecção é percebida uma interferência e a voltagem de saída é acentuada. Para que as medições ocorram dessa forma, as paredes de domínio possuem suas direções de rotação da magnetização diferentes de π . A presença ou ausência das duas paredes de domínio são detectadas respectivamente por voltagens elevadas e convertidas nos códigos “00” e “11”. A presença de apenas uma parede de domínio na região de aprisionamento fornece voltagens baixas e são codificadas como “01” ou “10”.

Outro dispositivo lógico composto por um circuito integrado microeletrônico foi sugerido por D. A. Allwood *et al.* [5] e utiliza fios planares com larguras de até $1,0 \mu\text{m}$. A parede de

domínio em tal dispositivo substitui o transistor em dispositivos semelhantes. As duas regiões de domínios magnéticos são a base para a representação da informação binária e a parede de domínio funciona como a transição do sinal. Os fios são arranjados de forma a conter várias junções e a aplicação de um campo magnético rotacional no tempo move a parede de domínio transversal através delas. As operações lógicas são realizadas através da manipulação das paredes de domínio que atravessam essas junções. A função lógica da parede de domínio é cogitada pela sua grande simplicidade em aplicação e pelo seu baixo custo.

No intuito de utilizar as paredes de domínio também como memória, foi proposto por S. S. Parkin *et al.* [6] uma memória magnética “pista” de paredes de domínio, “*magnetic domain-wall racetrack memory*” (RM), composta por uma matriz de nanofios magnéticos dispostos sobre um chip de silício, como mostra a figura 1.3. Várias paredes de domínio devem ser dispostas sobre o nanofio codificando um padrão de domínios que determinam os bits. Inicialmente, sítios de aprisionamento das paredes de domínio devem ser criados ao longo do nanofio de forma a manter as distâncias entre as paredes de domínio. A aplicação de pulsos de corrente de spin polarizado e campos magnéticos variáveis movimentam as paredes de domínio transversais e mudam os bits de local.

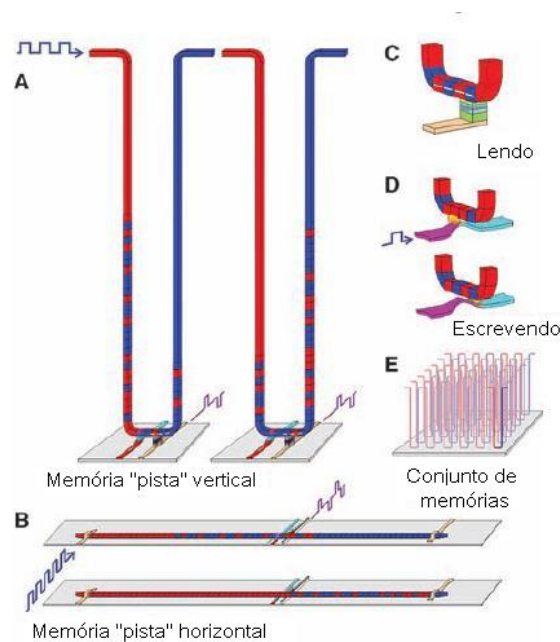


Figura 1.3: Memória pista ou “*racetrack*” em um nanofio ferromagnético com os dados codificados pelo padrão dos domínios magnéticos. Figura extraída de [6].

O dispositivo de memória “*racetrack*” deve interceptar um elemento de leitura [7] ou escrita integrado a ele. O funcionamento da RM se resume a registrar junto a esse elemento o deslocamento da parede de domínio. O nanofio deve ter espessura menor que 100 nm e vários μm de comprimento para acomodar cerca de 10 a 100 paredes de domínio em cada fio. Quanto maior

o número de paredes em cada nanofio menor o custo da memória. Além disso, o comprimento total do nanofio deve ter o dobro da distância entre a primeira e a última parede, de forma que todas possam se mover em ambos os sentidos. Um dispositivo de RM tri-dimensional teria uma densidade de armazenamento de dados altíssima, porém se encontram outras complicações na sua fabricação. Entretanto, uma memória RM bi-dimensional, como mostra a figura 1.3 b, possui uma geometria mais simples e ainda assim possui densidade superior às outras memórias, incluindo a memória “*flash*” [6].

Outro dispositivo de memória que opera registrando deslocamentos de paredes de domínio é proposto experimentalmente por M. Hayashi *et al.* [8]. Geradores conectados ao nanofio geram uma corrente elétrica de spin polarizado que gera uma parede de domínio transversal em uma região previamente definida. Controlando-se o comprimento e a duração do pulso de corrente, pode-se gerar várias paredes de domínio espaçadas entre si e movê-las ao longo do nanofio, e a direção da magnetização é usada para codificar os bits.

Um estudo feito por Tretiakov *et al.* [9] também sugere um dispositivo de memória através da aplicação de um pulso rápido de corrente elétrica em um nanofio no formato de uma ampulheta, como mostra a figura 1.4.

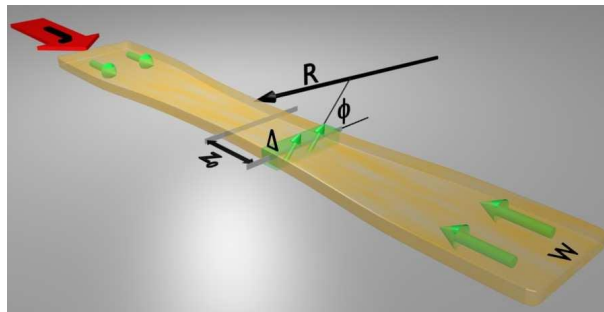


Figura 1.4: Nanofio em forma de ampulheta com uma parede de domínio transversal de largura Δ . A largura w do fio é maior nas extremidades e R representa o raio de curvatura do fio. Com a aplicação de um determinado tipo de corrente elétrica j representada pela seta vermelha, a parede de domínio muda sua magnetização para o sentido oposto, deslocando o ângulo ϕ de 0 a π . Nesse processo, a parede de domínio se desloca uma distância z_0 no comprimento do nanofio. Figura retirada de [9].

A parede de domínio do tipo transversal no centro do nanofio é que atuará como memória. Quando não há corrente sobre o fio, a magnetização da parede de domínio pode apontar para qualquer um dos dois sentidos de equilíbrio no plano do nanofio, para cima ou para baixo e o ângulo ϕ é igual a 0 . A alternância ou “*switching*” entre esses dois sentidos pode ser induzida pelo pulso de uma corrente elétrica de curta duração, o qual move o ângulo de magnetização da parede ϕ de 0 a π . No processo intermediário à mudança de sentido, a parede se desloca da posição z_0 no nanofio, retornando à sua posição original ao final da comutação. A principal perda de energia durante a comutação é devido ao aquecimento ôhmico do nanofio. As duas

direções de magnetização de equilíbrio podem servir como os bits de memória “0” e “1”. Os autores mostram que, com base neste protótipo, é possível conceber um dispositivo de memória não volátil com um tempo de escrita extremamente curto, que é apenas limitado pela frequência da onda de rotação dos spins da parede de domínio. A energia necessária para alternância de magnetização descrita é muito inferior à energia necessária nos dispositivos de memória modernos, sendo cerca de 10^5 mais eficiente energeticamente. Tal energia depende, além de outras constantes, da forma do pulso de corrente, do tempo da própria comutação, da largura da parede de domínio Δ e do raio R de curvatura do fio.

Essas e tantas outras aplicações das paredes de domínio magnéticas estão fundamentadas no entendimento do processo de magnetização dessas estruturas ferromagnéticas, bem como do controle do movimento das paredes de domínio. A manipulação das paredes nos nanofios é feita através de campos magnéticos externos variáveis [10, 11, 12, 13, 14] ou correntes de spin polarizada [15, 16, 17, 18, 19]. Para a aplicabilidade das paredes de domínio, a sua mobilidade deve ser grande e passível de ser controlada. Aplicando-se um campo magnético externo ao longo do eixo de magnetização do nanofio, a parede de domínio se propaga no sentido do campo para minimizar a energia Zeeman. A máxima velocidade atingida pela parede depende do parâmetro de amortecimento do material [15, 20], da intensidade e tipo do campo externo [11, 14, 21] e das dimensões do nanofio [22, 23, 24], e é limitada pelo chamado campo de Walker [25].

O controle da posição da parede de domínio é proposto por diversas formas de aprisionamento [12, 20, 26, 27, 28, 29]. Experimentalmente, defeitos artificiais como constrições, protusões e cortes geométricos em locais definidos do nanofio são usados como sítio de aprisionamento das paredes de domínio como proposto por D. Bedau *et al.* [30] (figura 1.5). A inclusão de um corte alterando a geometria do fio, gera um potencial de aprisionamento da parede de domínio do tipo vórtice e controla o seu movimento impedindo ou permitindo que atinja os demais contatos do nanofio.

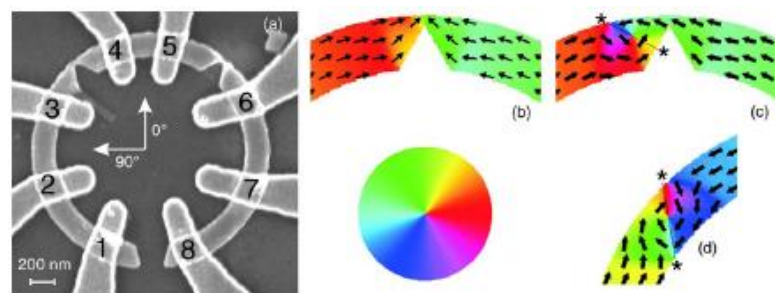


Figura 1.5: Corte geométrico introduzido no nanofio para gerar um potencial de aprisionamento da parede de domínio do tipo vórtice. Figura extraída de [30].

Outro fator muito utilizado para controle da posição da parede de domínio são as regiões curvas dos nanofios magnéticos, que apresentam um potencial local que age como sítio de aprisionamento da parede de domínio [31, 32]. Na figura 1.6, mostramos como esse fato é aplicado aos nanofios magnéticos. Em (a), temos um fio em forma de U de $2\ \mu\text{m}$ de comprimento em que as posições marcadas como I e IV são locais de aprisionamento para paredes de domínio que se movem sobre o nanofio, devido a sua curvatura. Os locais II e III são pontos de aprisionamento por se encontrarem próximos a um defeito topológico no fio (um corte). Os campos magnéticos mostrados na figura como H_{sw} e H_s são os campos aplicados para gerar uma parede de domínio e confiná-la inicialmente no canto do fio. Em (b), uma parede de domínio do tipo vórtice é inserida e confinada na região curva do fio. Na referência [20], os autores alteram a constante de amortecimento através de dopagem de Ho nos nanofios de Permalloy, o que altera o campo de aprisionamento das paredes de domínio e sua velocidade. As simulações micromagnéticas mostram que o aumento da constante de amortecimento, α , torna a estrutura da parede de domínio transversal mais rígida. Na referência [28] a irradiação de íons de cromo em uma amostra de Permalloy induz a formação de pontos magnéticos macios quadrados no nanofio, o que gera sítios de aprisionamento sem a necessidade de modificar a sua geometria.

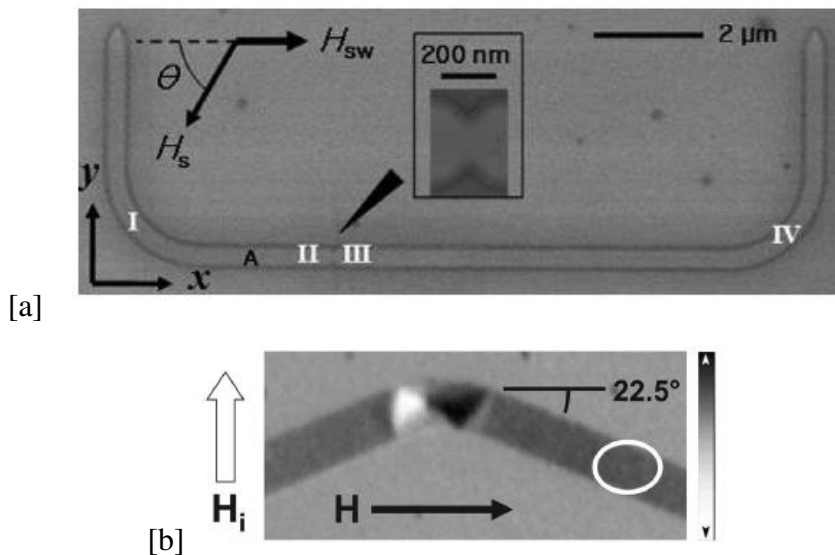


Figura 1.6: (a) Regiões de confinamento de paredes de domínio criadas no nanofio por aplicações de campos magnéticos externos (retirada de [32]); (b) Nanofio de Permalloy apresentando uma parede de domínio aprisionada em sua região de curvatura (retirada de [20]).

O Permalloy ($\text{Ni}_{79}\text{Fe}_{21}$) é uma liga metálica de ferro e níquel com alta permeabilidade magnética e propriedades de coersividade, magnetostricção e magnetoresistência anisotrópica muito baixa. Todas essas propriedades fazem do Permalloy o material ideal para o nosso estudo e cada uma delas será definida nos capítulos que se seguem.

Determinar e compreender o potencial de aprisionamento das paredes de domínios gerado por defeitos intrínsecos ou criados em sua geometria é de suma importância para o completo entendimento e controle da dinâmica das paredes de domínio. Neste trabalho, simulamos, através de dinâmica de spins, nanofios de Permalloy com uma parede de domínio transversal em seu centro e introduzimos impurezas magnéticas em sítios do nanofio variando a constante de troca entre a impureza e os sítios vizinhos. Neste modelo, a impureza pode comportar-se tanto como sítio de aprisionamento quanto como sítio de espalhamento [33]. A partir das impurezas magnéticas introduzidas, estudamos uma forma de controlar o posicionamento e a dinâmica da parede de domínio, o que é intrinsecamente necessário em aplicações tecnológicas. Além do grande potencial de aplicação das paredes de domínio em mídias magnéticas, a compreensão dos mecanismos responsáveis pela dinâmica da magnetização também contribui para um maior entendimento no campo da física básica.

Esta tese se divide em 6 capítulos. No capítulo 2, fazemos uma breve revisão teórica sobre as principais propriedades da magnetização e a energia livre que determina as características dos materiais ferromagnéticos. No capítulo 3, abordamos as paredes de domínio, desde os processos de formação, tipos até a dinâmica envolvida no seu movimento sobre um nanofio magnético. O capítulo 4 revela os métodos e técnicas computacionais utilizados na simulação dos nanofios, impurezas magnéticas e na dinâmica das paredes de domínio. Em seguida, os resultados sobre a movimentação das paredes de domínio sob a aplicação de um campo magnético e a influência das impurezas magnéticas sobre a dinâmica da parede de domínio são apresentados e discutidos no capítulo 5. Por fim, no capítulo 6, encontram-se as conclusões para esse trabalho e suas possíveis perspectivas.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA DO MAGNETISMO

2.1 MAGNETISMO FUNDAMENTAL

O comportamento magnético dos materiais têm sua origem na existência dos momentos magnéticos. O momento magnético total é a soma do momento magnético angular orbital e momento angular de spin dos elétrons e íons que compõem a matéria. Tanto a teoria clássica quanto a teoria quântica prevêm que a origem do momento magnético atômico são os elétrons. Para um átomo com um único elétron desemparelhado, a componente do momento magnético de spin, μ_s , na direção do campo magnético aplicado é:

$$\mu_s = -\frac{em_s\hbar}{m} = \pm \frac{e\hbar}{2m} = \mu_B , \quad (2.1.1)$$

na qual e e m são a carga e a massa do elétron respectivamente, $m_s = \pm \frac{1}{2}$ é o número quântico de spin e $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ é a constante de Planck normalizada. O resultado $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ é o magneton de Bohr, cujo valor em unidades do sistema internacional é $9,27 \times 10^{-24} J.T^{-1}$. A componente do momento magnético orbital de um átomo com um único elétron, na direção do campo magnético aplicado, é:

$$\mu_l = -\frac{em_l\hbar}{2m} = -m_l\mu_B , \quad (2.1.2)$$

e m_l é o número quântico orbital que assume valores entre $+l$ e $-l$ [34]. Extrapolando para átomos de mais elétrons, o momento angular de spin total para todos os elétrons de mesmos números quânticos n, l é dado por:

$$S = \sum m_s , \quad (2.1.3)$$

enquanto o momento angular orbital para os mesmos elétrons são:

$$L = \sum m_l . \quad (2.1.4)$$

As regras de Hund determinam os estados ocupados por elétrons em camadas parcialmente preenchidas e fornecem os números quânticos J , L e S . Em Mecânica Quântica, a relação entre momento magnético atômico $\vec{\mu}$ e momento angular total \vec{J} , é dada por

$$\vec{\mu} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{J} = \gamma \vec{J} , \quad (2.1.5)$$

onde γ é a razão giromagnética, \vec{J} , nessa equação, representa o número quântico e g é o chamado fator de Landé, dado por $g = \frac{3J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$.

As propriedades magnéticas dos materiais são determinadas através de grandezas que podem ser medidas macroscopicamente, como a magnetização \vec{M} , o campo magnético \vec{H} , a indução magnética \vec{B} e a susceptibilidade magnética χ [35]. A magnetização pode ser definida como a soma dos momentos magnéticos dos átomos $\vec{\mu}_i$ em cada sítio i que constituem uma dada porção de material por unidade de volume ΔV :

$$\vec{M}(\vec{r}) = \frac{1}{\Delta V} \sum_i \vec{\mu}_i \quad (2.1.6)$$

sendo uma grandeza vetorial com resultante na direção \vec{r} com unidades de A/m .

O campo magnético \vec{H} é o campo externo aplicado ao material, enquanto a indução magnética \vec{B} é o campo magnético total no interior do material com magnetização \vec{M} . Essas duas grandezas se relacionam através da igualdade:

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) , \quad (2.1.7)$$

em que $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} T \cdot m/A$ é a permeabilidade magnética do vácuo e ambas as unidades de \vec{H} e \vec{M} são dadas em A/m , fazendo com que \vec{B} no S.I. seja dada em Tesla [T].

Quando a magnetização \vec{M} é paralela ao campo magnético externo \vec{H} temos que:

$$\vec{M} = \chi \vec{H} , \quad (2.1.8)$$

onde χ é a susceptibilidade magnética, uma grandeza adimensional que mede a capacidade do material se magnetizar na presença de um campo magnético externo. Através dela, os ma-

teriais magnéticos são classificados, tradicionalmente, como diamagnéticos, paramagnéticos, ferromagnéticos, ferrimagnéticos ou anti-ferromagnéticos.

Existem alguns sólidos que, na presença de um campo magnético, apresentam uma magnetização pequena, mas não nula, no mesmo sentido do campo. Estes materiais são chamados de paramagnéticos e caracterizam-se pelo fato dos átomos conterem momentos de dipolo magnéticos permanentes. Nesses materiais os momentos dipolares magnéticos orbitais e de spin de cada átomo não se cancelam, portanto cada átomo possui um momento dipolar magnético permanente $\vec{\mu}$. Ao colocar um material paramagnético na presença de um campo magnético externo aplicado \vec{H} , os momentos de dipolo magnético orientaram-se paralelamente ao campo externo. Se o campo \vec{H} for não uniforme, o material paramagnético é atraído da região onde o campo magnético é menos intenso para a região onde o campo magnético é mais intenso. A energia é minimizada quando o momento se orienta paralelamente ao campo aplicado, por isso essa orientação é preferida em detrimento da antiparalela. Isso provoca um campo de indução que se soma ao campo aplicado, assim a susceptibilidade magnética é positiva, $\chi > 0$, todavia bem reduzida. O paramagnetismo só deve ser observado em substâncias cujos átomos têm subcamadas parcialmente preenchidas. Nesses materiais a orientação espacial do momento dipolar magnético total pode variar sem mudar as configurações eletrônicas de seus átomos.

O diamagnetismo é caracterizado por uma susceptibilidade pequena e negativa, $\chi < 0$, fato associado à diminuição do efeito do campo magnético dentro do material. Cada elétron produz uma corrente microscópica no material e, ao aplicar-se um campo magnético sobre ele, o fluxo do campo magnético total através da área de cada corrente microscópica é aumentado. Pela lei de Lenz, surge uma corrente microscópica induzida criando um campo magnético contrário ao campo aplicado, se opondo à variação inicial de fluxo magnético. Assim, o material apresenta uma magnetização não nula e com sentido oposto ao do campo aplicado. O diamagnetismo está presente em todos os tipos de materiais, porém o fenômeno é mascarado por um comportamento paramagnético ou ferromagnético mais intenso que frequentemente ocorre simultaneamente no material.

Materiais que apresentam uma magnetização não nula, e portanto uma susceptibilidade magnética significativa mesmo na ausência de campo aplicado, são conhecidos como ferromagnéticos. Neles, existe uma forte interação entre os átomos próximos que mantém os seus momentos de dipolo magnético alinhados. Os únicos elementos puros ferromagnéticos são o ferro, cobalto, níquel, gadolínio e disprosio. A teoria quântica do ferromagnetismo mostra que a magnetização é devida a spins “paralelos” e não a momentos de dipolo magnético orbitais, porque este último não seria forte o suficiente para manter o ordenamento espontâneo dos fer-

romagnetos. Portanto, os elétrons $3d$ das subcamadas de um átomo de ferro se orientam de maneira que seus spins sejam paralelos, reduzindo assim a energia do átomo. Ou seja, dois elétrons $3d$ se encontram mais afastados em média, se seus spins forem “paralelos” em vez de “antiparalelos” devido ao princípio de exclusão de Pauli, e uma vez mais afastados, a energia de repulsão coulombiana mútua é menor. Esse alinhamento entre os íons vizinhos dá origem a uma interação de troca, proposta por Heisenberg, à qual está associada a uma energia de troca. Essa interação de troca pode levar o sistema a um estado de menor energia de três formas: quando os spins de pares adjacentes de átomos forem “paralelos” (ferromagnetismo); quando eles forem “antiparalelos (antiferromagnetismo); ou quando eles forem antiparalelos, porém com magnetização não nula (ferrimagnetismo). A magnetização de saturação espontânea em materiais ferromagnéticos varia conforme a temperatura, diminuindo seu valor à zero em T_c , chamada de temperatura de Curie ferromagnética. Sob temperaturas superiores a T_c , esses materiais se tornam paramagnéticos.

Um material ferromagnético não tem todo seu volume magnetizado na mesma direção, mas tem muitas pequenas regiões de direção de magnetização uniforme, denominadas de domínios magnéticos, que podem estar orientadas ao acaso umas em relação às outras, como mostra a figura 2.1.

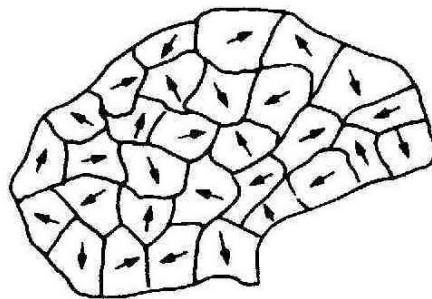


Figura 2.1: Estrutura de domínios magnéticos em um material desmagnetizado.

Existem materiais ferromagnéticos que, mesmo estando abaixo da temperatura de Curie, apresentam uma magnetização muito inferior à esperada pelo alinhamento dos momentos magnéticos, ou até mesmo nula. Este fato foi explicado por Pierre Weiss [36], que considerou que para a minimização da energia livre magnética os materiais ferromagnéticos apresentam uma distribuição da magnetização, ou seja, o material é dividido em domínios magnéticos, nos quais a magnetização é igual à magnetização de saturação M_s . No estado desmagnetizado, os domínios estão orientados de tal maneira que o material, como um todo, tem magnetização nula. Dentro de cada domínio, os momentos magnéticos atômicos têm um sentido comum, mas este sentido varia de domínio para domínio. A figura 2.1 mostra estruturas de domínios na qual a

magnetização resultante do material é zero.

A estrutura de domínios de um material ferromagnético é determinada pela minimização da energia livre magnética, a qual é o resultado da soma da energia de troca entre os momentos magnéticos vizinhos, da energia de anisotropia, para a qual contribuem a anisotropia magneto-cristalina, anisotropia magnetoelástica, anisotropia de forma ou magnetostática, e da energia de Zeeman. A contribuição de cada uma dessas energias é apresentada a seguir.

2.2 ENERGIA LIVRE MAGNÉTICA

Um modelo bastante utilizado para descrever a magnetização é o modelo de Heisenberg, que propõe que os elétrons de condução não são os responsáveis pelo magnetismo de um corpo. Os momentos dos elétrons fixos em um sítio interagem através da energia de troca. O trabalho de Heisenberg porém, só foi completado através da contribuição de L. Landau e E. Lifshitz [37], que descreveram a evolução temporal da magnetização.

A energia magnética livre é composta pela soma da energia de troca, energia dipolar, energia de anisotropia e energia de Zeeman. Daremos uma visão geral sobre cada um desses termos de energia para abordarmos em seguida os domínios magnéticos. Uma abordagem detalhada sobre as energias de troca, dipolar e Zeeman será refeita no capítulo 4.

A **energia de troca** ou “*exchange energy*” é a responsável pelo alinhamento entre os momentos magnéticos adjacentes, sendo portanto, minimizada com o alinhamento ferromagnético ou antiferromagnético entre os momentos vizinhos. O operador Hamiltoniano que corresponde à interação de troca, H_{tr} , pode ser escrito como,

$$H_{tr} = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.2.1)$$

em que S_i é o operador de spin do íon localizado no sítio i , e possui dimensão de momento angular \hbar . J_{ij} é a constante de acoplamento de troca entre os sítios i e j que possui dimensão de energia e, é denominada integral de troca e se origina nas relações entre a função de onda espacial do elétron. A interação de troca é de curto alcance, se estendendo apenas a sítios bem próximos.

A energia magnética de uma amostra também depende da direção relativa da magnetização em relação aos eixos estruturais. No caso mais simples, existe um eixo ao longo do qual a

energia é reduzida ao mínimo. Esta anisotropia magnética pode ser de origem cristalina, ou devido à forma do material, ou ainda, devido a pressões sob a amostra. Tais características dão origem a termos de energia de anisotropia.

Certos tipos de materiais sofrem uma deformação em seu comprimento quando submetidos a um campo externo. Este fenômeno é chamado de magnetostricção. A **energia magnetoelástica** está diretamente associada à magnetostricção. O movimento de paredes de domínio (amplamente discutido no capítulo 3), a rotação da magnetização, a nucleação e aniquilação de domínios produzem mudanças dimensionais que também podem contribuir para a energia magnetoelástica. Também podemos citar aqui a deformação da rede devido a uma tensão mecânica externa que altere os domínios da amostra. No caso de materiais como o Permalloy ($\text{Ni}_{79}\text{Fe}_{21}$) a energia magnetoelástica é praticamente zero, visto que sua magnetostricção é aproximadamente zero.

A forma de um material também pode gerar um tipo de anisotropia. A origem da **anisotropia de forma** reside na **energia magnetostática**, cuja principal contribuição está na forma geométrica da amostra que gera um campo desmagnetizante dentro do material, no sentido contrário à magnetização, um resultado de cargas magnéticas na sua superfície. A energia magnetostática será tratada qualitativamente no capítulo 4 como sendo a **energia dipolar**.

Em um material magnético a orientação da magnetização \vec{M} gera uma polarização magnética das cargas, produzindo pequenos dipolos magnéticos, como mostra a figura 2.2 a. No interior da amostra os polos se cancelam, porém, nas bordas do material eles não são compensados como é mostrado em (b), o que dá origem a um campo desmagnetizante \vec{H}_d no sentido contrário à \vec{M} .

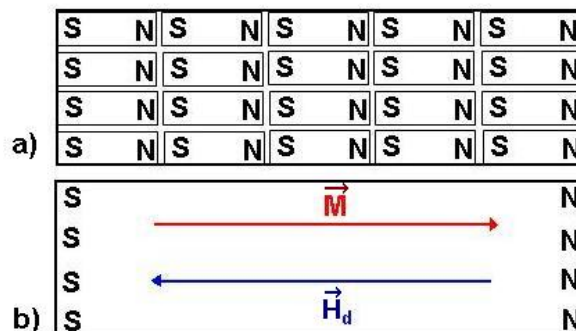


Figura 2.2: Origem do campo desmagnetizante \vec{H}_d . Em (a) os momentos magnéticos são alinhados no sentido de um campo externo na direção da magnetização. Os polos magnéticos são cancelados no interior da amostra. Em (b) os polos magnéticos nas bordas da amostra não são compensados gerando um campo desmagnetizante na direção inversa à \vec{M} . Retirado e modificado de [38]

O campo desmagnetizante depende da forma da amostra e da estrutura de domínios magnéticos, mas podemos considerar como aproximação para um domínio magnético qualquer que,

$$\vec{H}_d = -N_d \vec{M} , \quad (2.2.2)$$

onde, N_d é o fator desmagnetizante que no S.I. varia de 0 a 1. A energia magnetostática ou energia desmagnetizante E_d , é então, escrita como,

$$E_d = -\frac{1}{2} \mu_0 \vec{H}_d \cdot \vec{M} = \frac{1}{2} \mu_0 N_d M^2 . \quad (2.2.3)$$

O fator $1/2$ na energia magnetostática decorre do fato que ela está relacionada a uma interação dipolo-dipolo e nesta interação, cada dipolo interage com o dipolo anterior e também com o posterior. Assim, ele é contado duas vezes. A energia magnetostática ou dipolar é anisotrópica em relação à forma externa da amostra, a qual determina a separação dos pólos de superfície para diferentes orientações de M . Este efeito é chamado de **anisotropia de forma**. Este termo de energia é o principal responsável pelo aparecimento da estrutura de domínios nos materiais ferromagnéticos.

A **energia Zeeman** surge quando se aplica um campo magnético externo, \vec{B}^{ext} , sobre o material fazendo com que a sua magnetização sofra modificações. O campo externo interage com a magnetização e a energia Zeeman é minimizada quando os momentos magnéticos se alinham na direção do campo externo.

Uma vez descrita, a energia livre magnética de um sistema, podemos entender o processo de formação de domínios e sua dinâmica.

3 DOMÍNIOS MAGNÉTICOS

Embora o conceito de domínio tenha sido introduzido em 1907 [39], só em 1931 foram de fato observados domínios magnéticos. Para tal, foi usado o método de Bitter [40], que consiste em polvilhar a superfície do material ferromagnético com limalha de ferro, que é atraída para as divisões entre os domínios e assim desenham um “mapa” sobre a superfície do material. Outra técnica experimental utilizada na investigação, consistiu em fazer incidir luz polarizada na superfície do ferromagneto, técnica conhecida como efeito KERR. Em cada domínio, a magnetização faz rodar o plano de polarização da luz refletida de um ângulo que depende da direção de magnetização, gerando assim uma imagem das regiões de domínios.

A existência de domínios magnéticos surge do efeito de várias interações presentes em materiais ferromagnéticos, principalmente da energia de troca, da presença de anisotropias e da energia dipolar. As nanopartículas magnéticas podem ter dimensões tais que a configuração magnética de um único domínio seja energeticamente mais favorável. À medida que o tamanho destas partículas aumenta, acima de um determinado valor crítico, a configuração de menor energia desloca-se para uma forma com mais de um domínio magnético. A estrutura de domínios magnéticos é diferente para cada amostra e depende da forma da amostra, temperatura, estrutura cristalográfica e valor do campo no qual a amostra está submetida. Entretanto, a energia magnetostática é a principal responsável pelo surgimento das estruturas de domínios nos materiais ferromagnéticos [41]. A figura 3.1 mostra o mecanismo responsável pela formação dos domínios. Na parte (a) da figura, temos uma ferromagneto apresentando um monodomínio, ou seja, a magnetização está orientada em uma única direção. Nesse caso, temos um ímã, o qual produz polos magnéticos na superfície do material criando um campo magnético não só na amostra como também um campo desmagnetizante fora dela. Essa situação corresponde a uma elevada energia magnetostática dada por $\frac{1}{2}\mu_0 N_d M_s^2$, em que N_d é o fator de desmagnetização, que no S.I. varia de 0 a 1, e depende da geometria da estrutura de domínios e a forma da amostra. Na figura 3.1 (b), a amostra é dividida em dois domínios com magnetizações opostas, o que implica em uma redução à metade na energia magnetostática. À medida que a amostra se

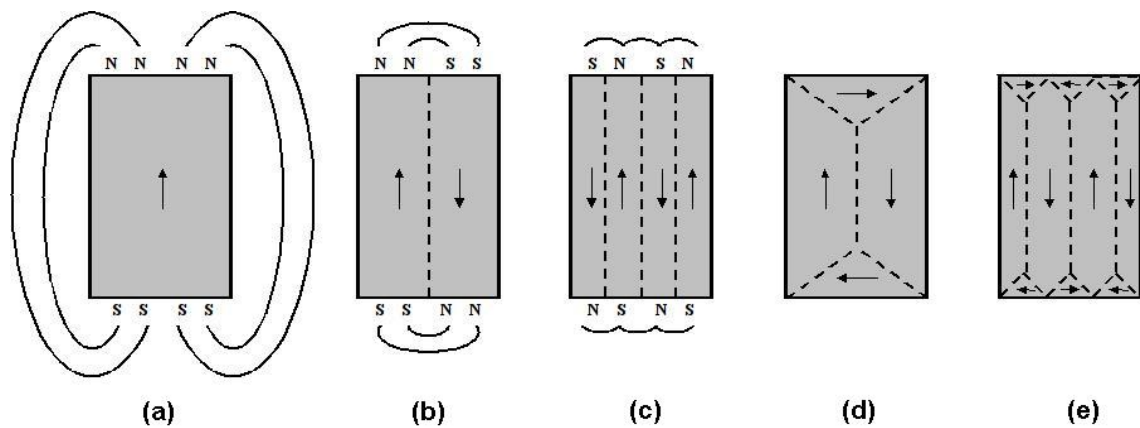


Figura 3.1: Processo de formação de domínios. Em (a) o magneto encontra-se uniformemente magnetizado (monodomínio); em (b) formação de dois domínios em direções opostas; em (c) formação de quatro domínios diminuindo o campo desmagnetizante; em (d) e (e) domínios com estrutura de fechamento diminuindo ainda mais o campo desmagnetizante. Figura retirada de [41].

divide em novos domínios, como em (c), ocorre a redução espacial do campo magnético. Logo, com N domínios, a energia dipolar reduzirá a aproximadamente $1/N$ da energia magnetostática da configuração inicial dada em (a). No entanto, o processo de divisão não pode ocorrer indefinidamente, uma vez que entre dois domínios adjacentes há uma região onde a direção dos momentos magnéticos é uma transição entre a direção dos domínios, as chamadas paredes de domínio, as quais contribuem para o aumento da energia. Logo, as divisões ocorrem até que a energia necessária para estabelecer uma parede adicional, separando dois domínios de magnetização oposta, seja maior do que a redução da energia magnetostática associada com mais uma divisão. Em alguns casos, acontece o arranjo de domínios como mostrado em (d) e (e), no qual essa estrutura de fechamento possibilita uma energia magnetostática zero [38]. É importante lembrar que embora a formação de uma determinada estrutura de domínios seja sempre o resultado da minimização da energia, a diversidade dos domínios observados nos materiais ferromagnéticos é enorme, e há muitas estruturas cujas energias são metaestáveis. A descrição acima da formação dos domínios não explica os tipos mais complexos de domínios existentes. Uma forma de entender o ponto fundamental dessa teoria é estudando as paredes de domínio magnéticas, que podem ser descritas de forma simples e têm uma abordagem mais geral [42].

3.1 PAREDES DE DOMÍNIO MAGNÉTICO

As paredes de domínio, “*domain wall*”, correspondem à região de transição entre domínios magnéticos. Introduzimos nessa tese a sigla PD para nos referirmos às paredes de domínio.

Nas paredes, a magnetização afasta-se da orientação da magnetização de um domínio e, gradualmente, aproxima-se da orientação do domínio adjacente. As paredes de domínio podem ser classificadas quanto ao ângulo da magnetização entre dois domínios vizinhos com a parede (seção 3.1.1); quanto ao ângulo entre os vetores magnetização dentro da parede de domínio (seção 3.1.2); ou quanto a estrutura da amostra em que se encontra (seção 3.2.1) [35]. Veremos os tipos de paredes de domínio mais abordados.

3.1.1 Paredes de 180° e 90°

A parede de domínio de 180° representa a fronteira entre os dois domínios com magnetização oposta, como mostra a figura 3.2 (a), enquanto a PD de 90° representa o limite entre dois domínios com magnetização sendo perpendiculares entre si (figura 3.2 (b)). A ocorrência de diferentes tipos de paredes de domínio depende do arranjo cristalográfico do ferromagneto. Em uma mesma amostra podem ocorrer paredes de domínio dos dois tipos, como mostrado na figura 3.2 (c).

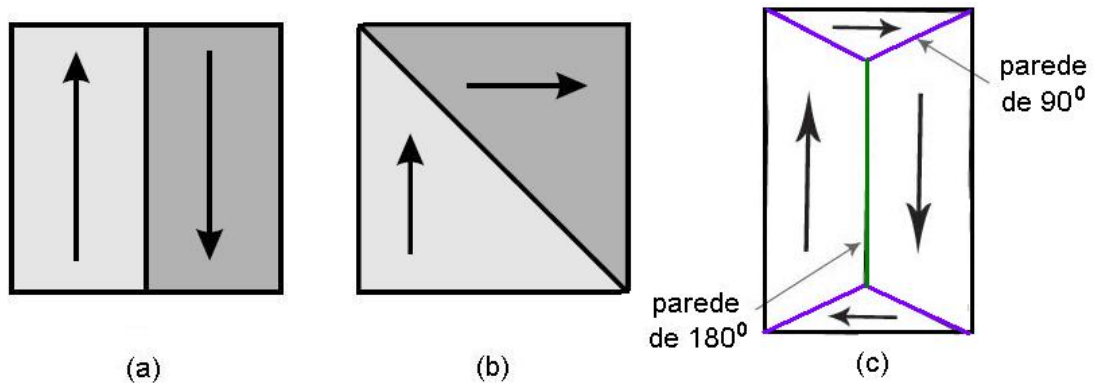


Figura 3.2: (a) Parede de domínio de 180° . (b) Parede de domínio de 90° . (c) Os dois tipos de PD em uma mesma amostra, caracterizando uma estrutura de domínio de fechamento.

3.1.2 Paredes de Bloch e Néel

As paredes de domínio também podem ser classificadas quanto à direção de rotação da magnetização dos momentos que a compõem. Existem dois tipos de classificação, a PD de Bloch (figura 3.3) e a PD de Néel (figura 3.4). Na parede de Bloch a rotação da magnetização ocorre fora do plano dos domínios adjacentes, enquanto na parede de Néel, a rotação do vetor

de magnetização está no mesmo plano dos domínios. A parede de Néel tem uma energia por unidade de área maior do que a de Bloch, devido à energia de desmagnetização adicional introduzida pela produção de pólos livres na superfície da parede [35]. Esse acréscimo de energia na parede de Néel, ocorre pela dificuldade do material em manter pólos magnéticos opostos separados por uma distância muito pequena. Ou seja, a parede de domínio deveria, nesse caso, ter uma largura não muito pequena. No entanto, se as dimensões da amostra se tornam comparáveis à largura da parede, tal como ocorre em filmes finos de materiais magnéticos, a situação pode inverter-se, e a parede de Néel pode ser energeticamente mais favorável. Na seção 3.1.4 veremos quais fatores influenciam na predominância do tipo de PD e na sua largura dentro da amostra.

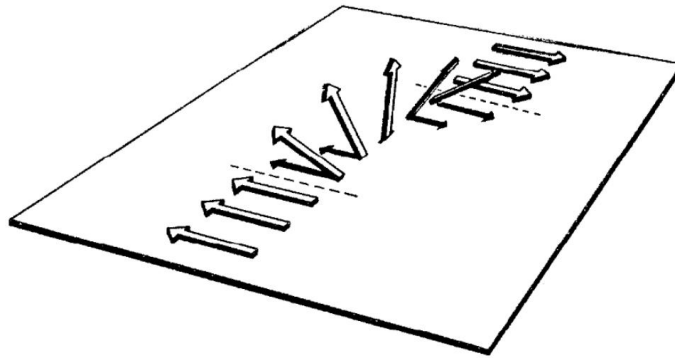


Figura 3.3: Na parede de domínio de Bloch, a rotação da magnetização ocorre fora do plano dos domínios adjacentes. Figura retirada de [38].

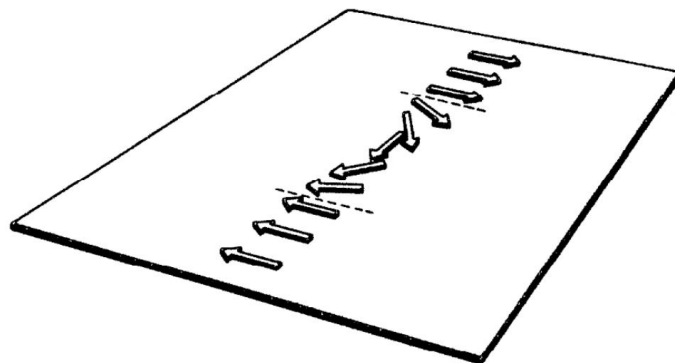


Figura 3.4: Na parede de domínio de Néel, a rotação da magnetização ocorre no plano dos domínios adjacentes. Figura retirada de [38].

3.1.3 Paredes de Domínio com Estrutura de Fechamento

Em um cristal magnético tridimensional, encontramos paredes de Bloch e paredes que exibem um campo desmagnetizante local, “*stray field*”, o que reduz a simetria na superfície do cristal. Geralmente, o sistema tende a minimizar a energia, que é dada pela soma da energia da

parede de Bloch e a energia do campo desmagnetizante, transformando o padrão de domínio em uma estrutura de fechamento, como por exemplo, observamos na figura 3.5. Em cristais que exibem uma anisotropia uniaxial baixa, para se evitar a criação dos campos desmagnetizantes, as paredes de domínio são geradas em regiões cuja magnetização não está alinhada ao longo do eixo fácil. Em cristais que possuem anisotropia não-uniaxial, é importante primeiro identificar a direção do(s) eixo(s) fácil(eis) para obter detalhes dos domínios. Surgem aqui estruturas mais complexas como paredes do tipo “cross-tie” e paredes zig-zag. Tais estruturas não serão abordadas nesse trabalho e para um estudo mais completo é sugerida a bibliografia [35, 42, 43].

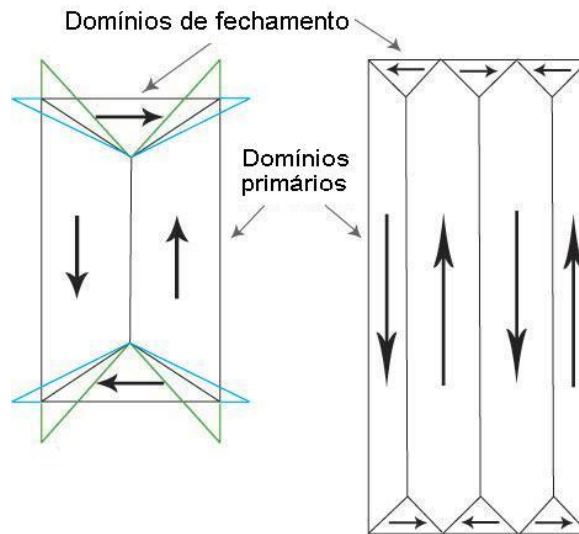


Figura 3.5: Os domínios em estrutura de fechamento são formados para diminuir a energia magnetostática através da diminuição do campo desmagnetizante.

Os tipos de parede de domínio encontrados nos nanofios magnéticos retangulares serão discutidos na seção 3.2.1.

3.1.4 Largura da Parede de Domínio

A mudança da magnetização entre domínios magnéticos não ocorre em apenas um passo descontínuo sobre um único plano atômico, mas sim através de uma transição gradual, sobre muitos planos atômicos, a partir da orientação de um domínio para o outro. Assim, pode-se dizer que a parede de domínio tem uma largura finita, δ , e possui uma estrutura interna. Essa mudança gradual está relacionada à energia associada à formação da parede. A largura da parede de domínio magnético pode ser calculada de uma forma aproximada levando-se em conta apenas a energia de troca entre os momentos e a energia de anisotropia efetiva, cuja constante de anisotropia pode ter contribuições de origem nas energias magnetocristalina, magnetostática e magnetoelástica.

Consideremos dois domínios adjacentes e em sentidos opostos separados por uma parede de domínio de 180° , como mostra a figura 3.6. Considere os momentos do primeiro domínio apontando na direção $+z$, e o segundo, na direção $-z$. Quanto mais próximos ao paralelismo os momentos magnéticos da parede estiverem dos momentos do domínio mais próximo, menor a energia de troca entre eles, o que favorece uma parede de domínio mais larga. Por outro lado, quanto menor for o número de momentos na parede (PD mais estreita), menor será a energia de anisotropia, uma vez que cada momento magnético que não aponta na direção z contribui para o aumento desta energia. Ou seja, enquanto a energia de troca atua no sentido de deixar a largura da parede a maior possível, a energia de anisotropia atua de modo a deixar a largura da parede a menor possível. O equilíbrio entre a energia de troca e a de anisotropia é que define a configuração da parede de domínio [44].

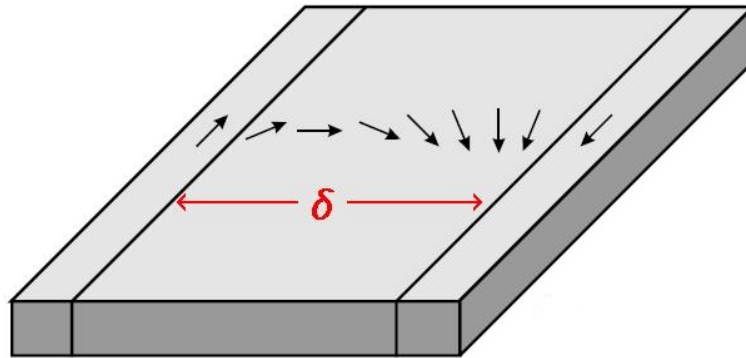


Figura 3.6: A largura da parede de domínio, δ , é resultado das energias de troca e de anisotropia. Em filmes finos de espessura t muito pequenas, há o predomínio das paredes de Néel.

A energia de dois momentos paralelos é dada por:

$$E = -2JS^2 . \quad (3.1.1)$$

Para dois momentos não paralelos \vec{S}_1 e \vec{S}_2 , que apresentam um ângulo φ entre eles, a energia passa a ser:

$$E = -2J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = -2JS^2 \cos \varphi , \quad (3.1.2)$$

sendo que, para pequenos valores de φ , podemos escrever $\cos \varphi = 1 - \varphi^2/2$, de modo que a energia torna-se:

$$E = -2JS^2 + JS^2 \varphi^2 . \quad (3.1.3)$$

Na PD de Bloch a rotação de 180° acontece sobre os N momentos que compõem a parede. O ângulo de rotação entre dois momentos adjacentes é então $\varphi = \pi/N$, fazendo com que a energia total sobre todos os eixos de rotação dos spins da parede com um ângulo φ entre si seja dada por:

$$E = NJS^2\varphi^2 = \pi^2 JS^2/N . \quad (3.1.4)$$

Sendo a a constante de rede do material ou separação entre os átomos, uma unidade de comprimento da PD é atravessada por uma linha de $1/a$ átomos, então uma unidade de área da PD de Bloch é atravessada por $1/a^2$ linhas de átomos. A energia de troca da parede de Bloch por unidade de área é então:

$$E_{tr}^{Bl} = JS^2 \cdot \frac{\pi^2}{Na^2} . \quad (3.1.5)$$

Assim, podemos perceber que a parede de domínio tende a ter um comprimento infinito ($N \rightarrow \infty$) de forma a minimizar a energia de troca. Mas a energia de anisotropia efetiva tende a ser minimizada com uma parede de domínio estreita, competindo com a energia de troca. O caso aqui apresentado se refere a amostras maiores, onde ocorre o aparecimento de vários domínios, e a contribuição da energia de forma é pouco significativa. A energia de anisotropia magnetocristalina por unidade de volume, onde K é a constante de anisotropia efetiva, é dada por

$$E_{ef} = K\text{sen}^2\varphi , \quad (3.1.6)$$

com $K > 0$, favorecendo, portanto, o alinhamento paralelo ou antiparalelo dos momentos nos dois domínios com a parede de Bloch entre eles. O somatório de todas as contribuições dos N momentos da energia por unidade de área Na da parede, pode ser aproximado por:

$$\sum_{i=1}^N K\text{sen}^2\varphi_i \approx \frac{1}{2}NaK , \quad (3.1.7)$$

e reescrevendo [44],

$$E_{ef}^{Bl} = \frac{1}{2}NaK . \quad (3.1.8)$$

Logo, a energia total para uma parede de domínio de Bloch será a soma da energia de troca, eq. 3.1.5, com a energia magnetocristalina, eq. 3.1.8,

$$E^{Bl} = JS^2 \frac{\pi^2}{a^2} \cdot \frac{1}{N} + \frac{1}{2} NaK . \quad (3.1.9)$$

O primeiro termo favorece a presença de um grande número de momentos na PD o que a tornaria mais larga, enquanto o segundo termo favorece a presença de um pequeno número de momentos, estreitando a PD. A energia mínima é obtida igualando a derivada da função em relação a N a zero,

$$\frac{dE^{Bl}}{dN} = 0 = \frac{1}{2} aK - JS^2 \frac{\pi^2}{a^2} \cdot \frac{1}{N^2} , \quad (3.1.10)$$

o que resulta em,

$$N = \pi S \sqrt{\frac{2J}{a^3 K}} . \quad (3.1.11)$$

A constante

$$A = \frac{2JS^2}{a} , \quad (3.1.12)$$

representa a medida da rigidez do vetor magnetização, que mede a dificuldade de um dado spin de desviar da direção do campo de troca que tende a favorecer o alinhamento paralelo entre os momentos. A constante A é proporcional à constante de acoplamento de troca J e é medida no S.I. em J/m. A largura da parede de domínio de Bloch é definida como,

$$\delta = Na \quad (3.1.13)$$

que através das equações 3.1.11 e 3.1.12 é

$$\delta = \pi \sqrt{A/K} . \quad (3.1.14)$$

A largura δ da parede de domínio de Bloch é definida como sendo a largura da região em torno de $x = 0$, onde a magnetização gira π em relação aos domínios (ver Fig.3.6). Vê-se diretamente que um valor elevado de A favorece uma grande largura na parede de domínio, enquanto uma grande magnitude da constante de anisotropia tende a reduzir essa largura. Os valores aproximados da espessura da parede de Bloch, são 40, 100 e 15 nm, para o Fe, Ni e Co, respectivamente [36]. O parâmetro de largura da parede de domínio, $\Delta = \delta/\pi$, é definido por:

$$\Delta = \sqrt{A/K}. \quad (3.1.15)$$

As paredes de domínio exibem uma contínua rotação do vetor magnetização entre os dois domínios. Entretanto a definição da largura da PD não é consenso entre diferentes pesquisadores. A definição dada por 3.1.15, Δ , está graficamente representada por W_L (largura da parede de domínio de Lilley) na figura 3.7. O gráfico mostra as três curvas para a variação do ângulo φ de magnetização ao redor do centro da parede de domínio de Bloch, $\varphi(x)$, $\text{sen } \varphi(x)$, $\text{cos } \varphi(x)$, onde x representa a direção perpendicular à parede de domínio (comprimento da amostra). A linha vermelha no gráfico representa a inclinação da componente $\text{sen } \varphi$ da magnetização na origem da parede em 0 e essa extrapolação linear é outra forma de se calcular a largura da parede, designada por W_m e fornecendo um valor de $\delta = 2\sqrt{A/K}$. Uma terceira forma de definição se baseia na largura sobre o fluxo total da parede, o que leva a $\int_{-\infty}^{+\infty} \text{cos } \varphi(x) dx$, a qual está representada por W_F no mesmo gráfico da figura 3.7.

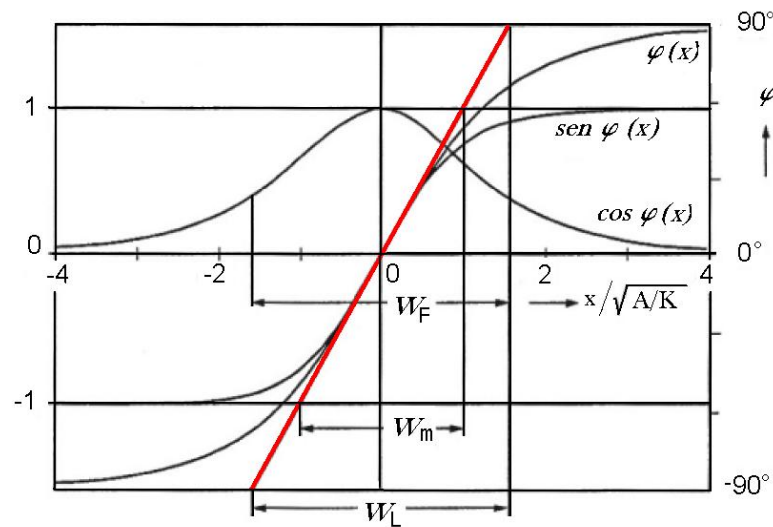


Figura 3.7: Cálculo para o perfil da parede de domínio de 180° de Bloch e diferentes definições de largura da parede dadas no texto. Figura retirado de [42].

Para a parede de Néel, no entanto, como a direção de magnetização da parede pertence ao plano dos domínios magnéticos, a energia magnetostática é mais relevante, uma vez que as cargas magnéticas se somam ao longo do plano dos domínios. A energia magnetostática para uma PD de Néel é

$$E_{mag}^{Né} = \frac{1}{2} \mu_0 M_s^2 \cos \theta \quad (3.1.16)$$

em que θ é o ângulo entre a direção da magnetização e o eixo de simetria da PD. A minimização

da energia permite a derivação dos parâmetros que caracterizam a parede de domínio de Néel [45]. A largura da parede de domínio de Néel é dada por

$$\delta^{Né} = \pi \sqrt{\frac{A}{K + \frac{1}{2}\mu_0 M_s^2}} . \quad (3.1.17)$$

Podemos verificar a importância da energia magnetostática na parede de Néel, e vemos que o resultado contrasta com a largura da parede de Bloch (eq. 3.1.14), que não depende da magnetização de saturação M_s . No caso de filmes finos, no limite em que a espessura do filme, t , é muito menor que a largura da parede de Néel $\delta^{Né}$, a largura da parede de domínio pode ser escrita como [42]

$$\delta^{Né} = \pi \sqrt{\frac{2A}{K}} . \quad (3.1.18)$$

A expressão acima define a largura da parede de Néel em materiais que apresentam vários domínios e possuem anisotropias. Para um nanofio magnético de Permalloy, com espessura muito reduzida e cuja anisotropia magnetocristalina é desprezível, os tipos e larguras das paredes de domínio que aparecem são diferentes daqueles mencionados até agora. Um fio fino, da espessura que simulamos nesse trabalho, apresenta uma parede de domínio em repouso de Néel, cujas características dependem de novos parâmetros, tais como as dimensões do nanofio. Abordaremos essas características na próxima seção.

3.2 NANOFIOS MAGNÉTICOS

Um nanofio magnético é um sistema quase unidimensional com comprimento da ordem de micrometros que pode ser preparado experimentalmente por deposição de materiais magnéticos em superfícies cristalinas, por litografia de um filme magnético, ou por deposição eletroquímica [46]. Devido à anisotropia de forma, a geometria do nanofio favorece o alinhamento da magnetização ao longo do seu comprimento. No entanto, dependendo da intensidade da anisotropia cristalina do material, a anisotropia resultante pode apontar para uma outra direção, por exemplo, perpendicularmente ao eixo. No caso de nanofios de cobalto, por exemplo, as condições de preparação podem favorecer um sentido diferente para a anisotropia final. Este fato pode ser observado na figura 3.8, onde a direção do campo magnético de saturação aplicado na amostra

determina diferentes configurações da magnetização. Em (a) após o campo de saturação na direção paralela ao fio ser removido, o nanofio apresenta uma estrutura de monodomínio. Em (b) após a aplicação de um campo de saturação perpendicular ao plano do fio, vários domínios com sentido de magnetização oposta são formados. Os círculos brancos e pretos na figura representam as cargas magnéticas opostas.

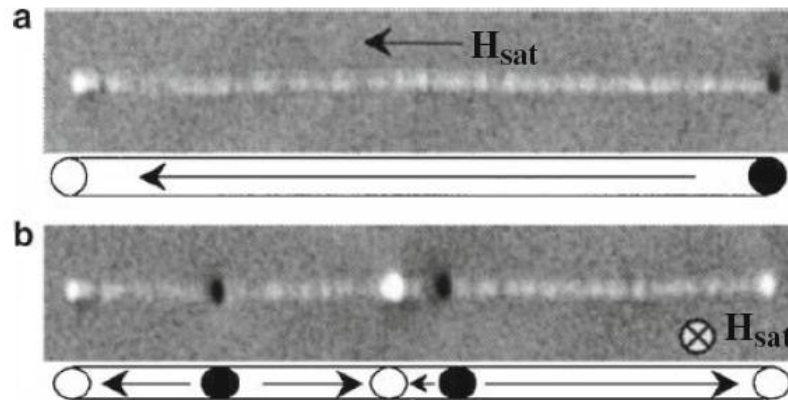


Figura 3.8: Imagem MFM (microscopia de força magnética) de um fio de Co de 35 nm de diâmetro para $\vec{H} = 0$ após saturação em (a) campo magnético paralelo ao fio e (b) campo magnético perpendicular ao fio. Os desenhos abaixo das imagens mostram as estruturas de domínios magnéticos de Bloch. Figura extraída de [44].

Os nanofios de *Fe* com diâmetros de 10 a 100 nm e comprimentos de 0,1 a 1,0 μm em condições normais possuem o eixo fácil da magnetização ao longo do comprimento do fio. A coercividade é cerca de 2300 Oe (230 mT) para medidas ao longo do eixo do fio [44]. Um outro tipo de nanofio que adquiriu uma grande importância no desenvolvimento de nanotecnologias são os nanofios retangulares, que serão abordados no próximo tópico.

3.2.1 Paredes de Domínio nos Nanofios Retangulares

Os nanofios retangulares ou nanofitas são estruturas em forma de um paralelepípedo longo de comprimento L , largura w e espessura t , tais que $L \gg w > t$ como pode ser visto na figura 3.9.

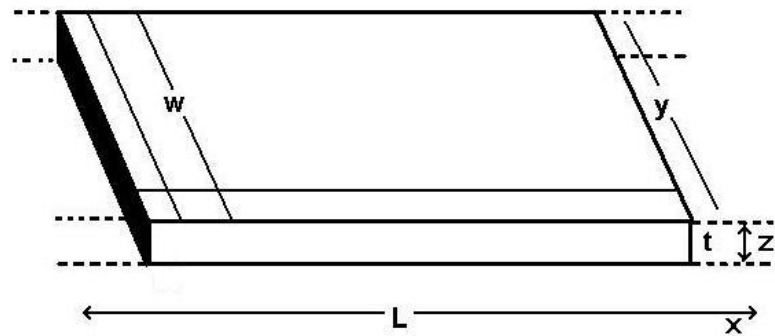


Figura 3.9: Comprimento L , largura w e espessura t ao longo dos eixos x , y e z respectivamente do nanofio, com $L \gg w > t$.

Em um nanofio magnético retangular, o rearranjo dos spins ocorre de forma a minimizar a energia livre do sistema como um todo. Uma configuração de baixa energia para nanofios de material magneticamente macio é obtida quando a magnetização é uniforme e paralela ao comprimento do nanofio¹. Como a energia anisotrópica é muito baixa nos filmes de Permalloy, ao aumentarmos as dimensões dos sistemas, as bordas colaboram para o surgimento das PDs, pois a magnetização tende a ser paralela às bordas da amostra.

Entretanto, um equilíbrio entre a energia de troca e a energia magnetostática minimizam a energia livre através do surgimento de paredes de domínio. O número de PDs depende das dimensões do nanofio, entretanto para as dimensões utilizadas nesse trabalho, surge apenas uma parede de domínio transversal (PDT) de 180° no centro do nanofio separando dois domínios de sentidos opostos de magnetização. Dois tipos de parede de domínio são mais comuns nesses nanofios, a parede de domínio tipo transversal e a parede de domínio tipo vórtice (PDV), ambas com rotação tipo Néel devido à simetria e dimensões do material. Tais configurações de paredes de domínio podem ser vistas na figura 3.10. Em nanofios mais largos com uma PDT vê-se uma assimetria na forma da parede entre as extremidades superior e inferior do fio, adquirindo uma configuração parecida com um “V” [47]. Esta característica pode ser vista na parede transversal mostrada na figura 3.10. Existe ainda, porém em menor escala, uma parede de domínio transversal assimétrica (PDTA), em que a parede se encontra mais inclinada em relação a um dos domínios [48]. A comparação entre as configurações dos três tipos de paredes de domínios dos nanofios pode ser vista na figura 3.11.

Nas paredes de domínio do tipo transversal, o momento magnético médio está orientado ao longo do eixo transversal ao nanofio, nos casos apresentados, o eixo y , onde está direcionada a magnetização da PDT. Para quantificar os momentos da PDT, define-se:

¹A partir de agora sempre que escrevermos nanofio estaremos nos referindo aos nanofios retangulares.

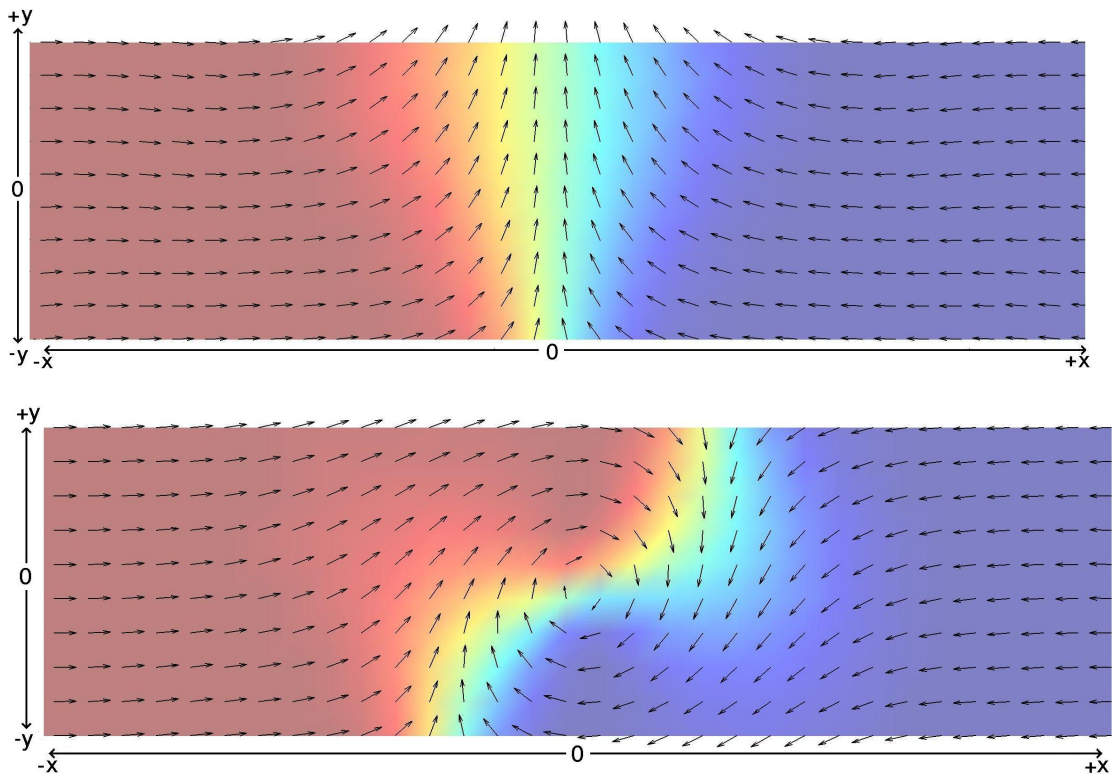


Figura 3.10: A figura superior representa uma parede de domínio do tipo transversal (PDT) e a figura inferior representa uma parede de domínio do tipo vórtice (PDV). As cores vermelho e azul representam as direções da magnetização dos domínios opostos.

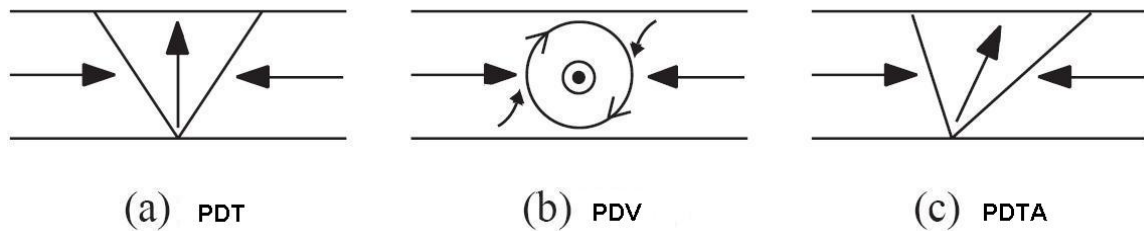


Figura 3.11: Comparação entre as configurações das paredes de domínios encontradas nos nanofios: a) PDT; b) PDV e c) PDTA. Retirado de [48].

$$\xi_i = \frac{1}{\pi S} \int m_i d^3\vec{r} \quad , \quad (3.2.1)$$

que tem a dimensão de comprimento, $m_i = 1/\cosh(x/a)$ e obtêm-se $\xi_i = \Delta$, que é o parâmetro de largura da parede de domínio. $S = w \cdot t$ é a área da seção transversal do nanofio. Como a seção transversal S é muito plana ($w > t$), os momentos magnéticos estão orientados no plano do nanofio magnético. No âmbito da teoria de domínio, as cargas magnéticas dentro do nanofio devem de fato, levar a uma inclinação de 45° nos limites entre os domínios e a parede. A estrutura é também caracterizada por dois objetos topológicos, localizados nas extremidades do nanofio, conforme ilustrado pelo esquema incluído na figura 3.12. Vemos, na parte superior da

figura, as configurações das magnetizações no plano xy e em seguida no eixo z , e verificamos que apenas a PDV apresenta componente no eixo z no núcleo do vórtice. Observando o esquema na parte inferior da figura, percebe-se que no vértice do triângulo formado pela PDT, um meio antivórtice está presente. Um antivórtice completo (inteiramente contido dentro da amostra) teria uma magnetização perpendicular ao plano do nanofio no seu núcleo. No entanto, na PDT em repouso não há magnetização perpendicular ao plano do nanofio. Devido à presença do meio antivórtice no plano da magnetização, a carga topológica (número de voltas da magnetização no plano) deste tipo de amostra é $q = -1/2$ [49]. Vemos ainda que, na borda superior do nanofio, encontra-se uma configuração semelhante a um meio vórtice sem núcleo, o que confere uma carga topológica $q = +1/2$. A estrutura da PDV também pode ser analisada a partir da presença de dois meio antivórtices nas extremidades superior e inferior do nanofio e, como previsto, um vórtice no centro da parede.

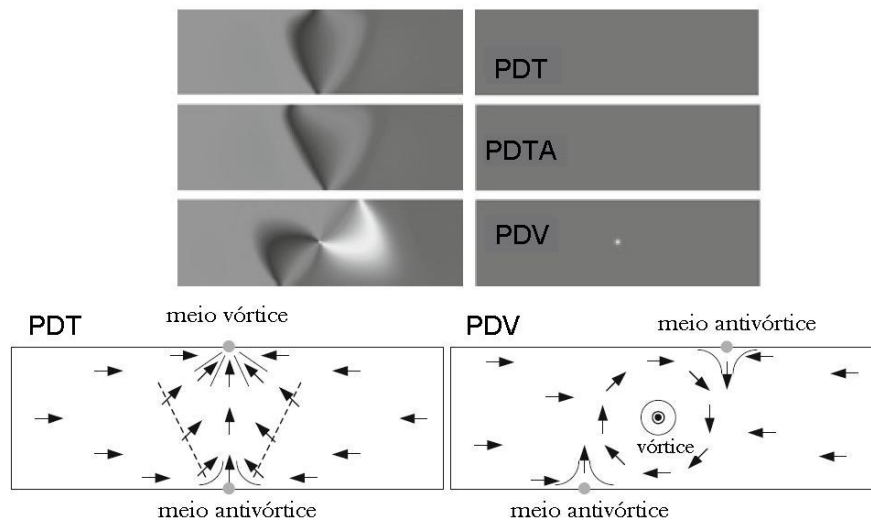


Figura 3.12: Estrutura de paredes de domínio em um nanofio de Permalloy de $w = 300$ nm e $t = 5$ nm. A parte superior apresenta a configuração da magnetização nos plano xy (à esquerda) e no eixo z (à direita) para os três tipos de paredes de domínio, PDT, PDTA e PDV. O esquema na parte inferior da figura mostra as estruturas topológicas encontradas nas paredes de domínio do tipo transversal e vórtice. Retirado de [50].

Na parede de domínio do tipo vórtice, não existe qualquer componente magnética transversal, no entanto devido à presença do núcleo do vórtice, forma-se uma componente local, pequena, da magnetização perpendicular ao plano do fio. Topologicamente, a estrutura consiste em um vórtice $q = +1$, com dois meio antivórtices, um em cada borda do nanofio como mostra o desenho da figura 3.12. Em termos de cargas magnéticas, a PDV proporciona um espalhamento maior da carga sobre o fio, o que reduz a energia magnetostática, aumentando a energia de troca.

Há ainda uma parede de domínio transversal assimétrica, que é uma variação da parede transversal que se torna mais estável em espessuras t maiores e determinadas larguras do filme.

Nela, o meio vórtice não fica alinhado com o meio antivórtice.

Há duas formas das paredes de domínio se manifestarem nos nanofios de acordo com o sentido dos domínios magnéticos. Mostramos essas duas maneiras para uma PDT na figura 3.13. A PDT em (a) é chamada de “tail-to-tail” devido aos domínios magnéticos apontarem para as extremidades do nanofio, saindo da parede de domínio. A outra configuração possível é a chamada PDT “head-to-head”, mostrada na mesma figura em (b), em que o sentido da magnetização dos domínios estão apontando para a parede. Ambas as configurações apresentam a mesma configuração energética.

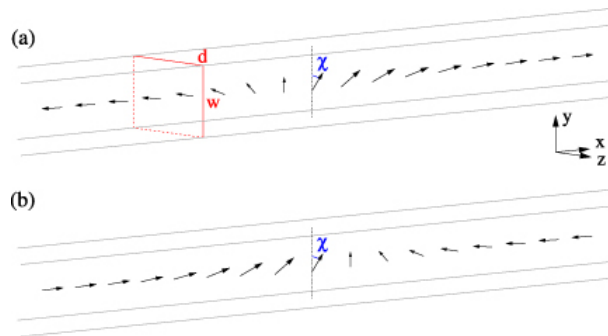


Figura 3.13: Configurações possíveis para os domínios em um nanofio com magnetização no sentido do comprimento do fio: em (a) uma PDT “tail-to-tail” e em (b) uma PDT “head-to-head”. O símbolo χ representa o centro da PDT.

A energia associada aos três tipos de paredes de domínio, PDT, PDTA e PDV, tem contribuição predominantemente da energia magnetostática, porém nas PDV a contribuição da energia de troca é mais significativa. Nas paredes de domínio transversais, o surgimento de cargas magnéticas nas extremidades superior e inferior no centro do nanofio minimiza a energia de troca. Para nanofios de largura e espessura menores, a energia livre é minimizada pela formação de uma parede tipo transversal e, à medida que a espessura do fio aumenta a energia magnetostática também aumenta devido ao número excessivo de cargas magnéticas livres, o que favorece a formação de uma estrutura de fechamento, característica da parede tipo vórtice. Ao comparar a energia magnetostática da PDT e a energia de troca associada a PDV, McMichael *et al.* [47] chegaram a um diagrama de fase (figura 3.14) que relaciona as dimensões w versus t do nanofio da seguinte forma: $w \cdot t \approx C\lambda_{ex}^2$, em que λ_{ex} é o comprimento de troca do material e C é uma constante que depende do material, sendo que para o Permalloy é igual a 128. Nakatani *et al.* [48] refinaram esse estudo e estabeleceram um diagrama de fase que separa as três paredes de domínio em função de w e t , como mostra a figura 3.15. Este diagrama de fase foi confirmado por experimentos em que a estrutura mais estável da parede foi obtida por tratamento térmico [51].

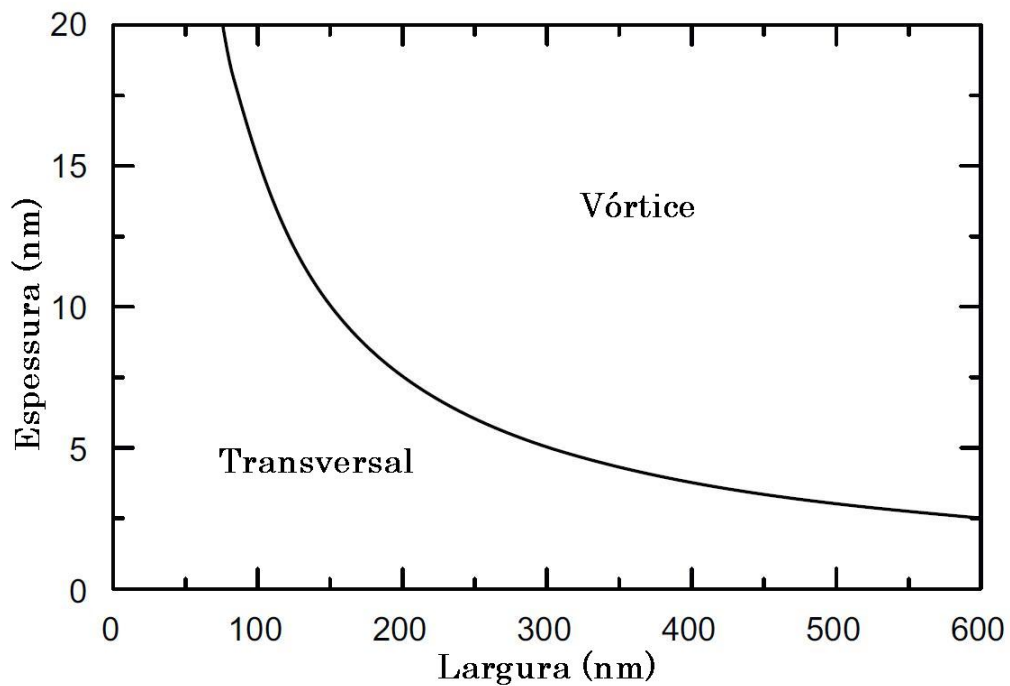


Figura 3.14: Diagrama de fase para as estruturas de parede de domínio tipo vórtice e transversal. Retirado de [47].

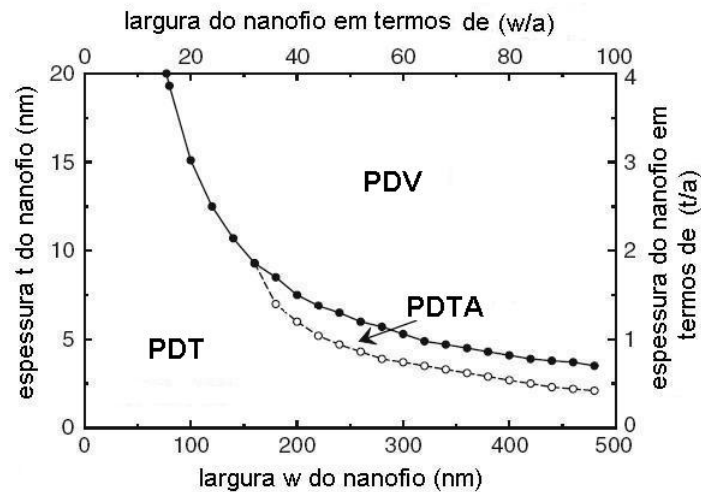


Figura 3.15: Diagrama de fase para as estruturas de parede de domínio tipo vórtice, transversal e transversal assimétrica. Retirado de [48].

Essa curva que une os pontos no diagrama trata-se, no entanto, de uma posição metaestável. Ao transformar uma PDV em uma PDT, o vórtice deve ser expulso para uma das bordas do nanofio, abandonando o centro da parede, onde sua energia é menor. De maneira análoga, para se transformar uma PDT em uma PDV, o meio vórtice deve deixar a borda do nanofio criando um núcleo de vórtice com magnetização perpendicular ao plano aumentando a energia do vórtice [50]. A transição da PDT para a parede transversal assimétrica pode ser feita deslocando-se o

centro da PDT ao longo do comprimento do nanofio, variando sua posição sobre a largura do nanofio.

A variação da energia das três paredes de domínio em relação à espessura do nanofio é mostrada na figura 3.16 para um fio de largura fixa $w = 300$ nm. As PDT e PDV possuem energias muito próximas na espessura de $t = 5$ nm. Devido à sua assimetria a PDTA pode ser obtida acima das espessuras em que ocorrem a transição de PDT para PDV, porém é um estado instável. A diferença de energia em valor absoluto entre a PDV e PDT é comparada com a energia térmica à temperatura ambiente (no eixo da direita em escala logarítmica).

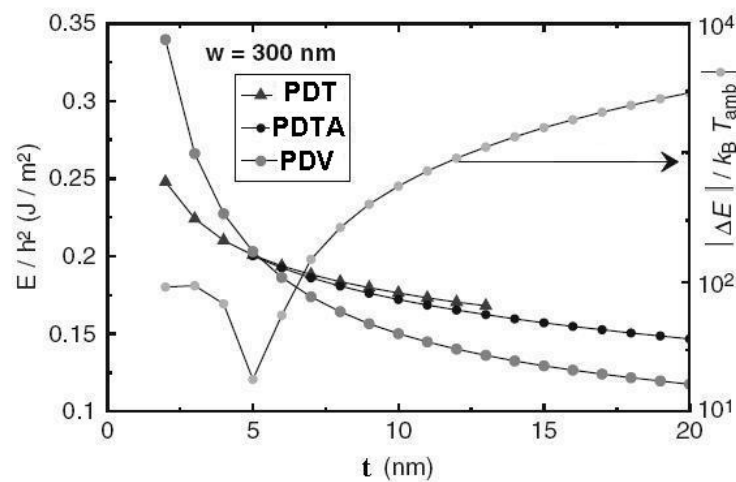


Figura 3.16: Comparação entre a energia em função da espessura de um nanofio de $w = 300$ nm para os três tipos de PD possíveis. A energia é medida em termos da constante de Planck h e uma comparação com a energia térmica $K_B T_{amb}$ é feita, em que K_B é a constante de Boltzman e T_{amb} é a temperatura ambiente. Retirado e modificado de [50].

Para nanofios cujas dimensões são muito grandes, principalmente com espessuras muito maiores, começam a surgir estruturas mais complexas de parede de domínio, as quais não serão abordadas nesse trabalho.

Em nanofios de Permalloy, como praticamente não há anisotropias, a largura da parede de domínio não possui a dependência mostrada na equação 3.1.18, e a espessura e largura do nanofio passam a ter um papel predominante. Como nos nanofios mais finos predomina-se a PDT de Néel, o parâmetro de largura da parede, Δ , aumenta com o aumento da largura do nanofio [48]. Para a PDT o parâmetro de largura é aproximadamente

$$\Delta = \frac{w}{\pi}, \quad (3.2.2)$$

enquanto para a PDV obtêm-se,

$$\Delta = \frac{3w}{4}. \quad (3.2.3)$$

Para ambos os tipos de parede de domínio a espessura do nanofio tem uma influência muito pequena, enquanto para a PDTA, Δ aumenta tanto com o aumento da largura w como com o aumento da espessura t do nanofio. O gráfico da figura 3.17 mostra essas dependências.

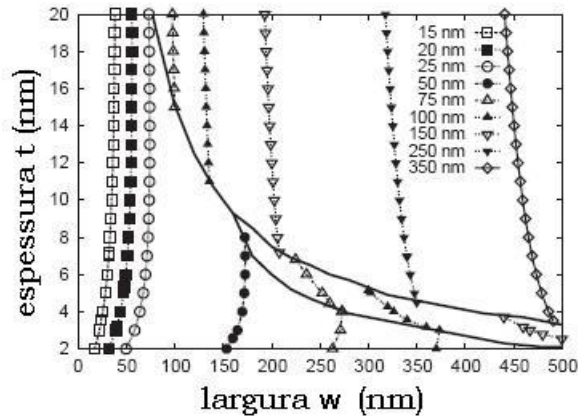


Figura 3.17: Parâmetro de largura da PDT para espessura t do nanofio em função da sua largura. A linha contínua representa o diagrama de fase para os três tipos de PDTs. Retirado de [48].

3.3 MOVIMENTO DAS PAREDES DE DOMÍNIO

Para a aplicabilidade das paredes de domínios em estruturas tecnológicas, como discutido na Introdução desse trabalho, é necessário movê-las ao longo do nanofio e controlar esse movimento. Campos magnéticos variáveis ou correntes de spin polarizadas são as formas de se induzir as PDs ao movimento, e ambas serão estudadas em detalhes.

3.3.1 Movimento da parede de domínio por campos magnéticos

Se aplicarmos um campo magnético \vec{H}_{ap} ao longo do eixo x (direção da magnetização dos domínios no nanofio), não haverá nenhum torque entre o momento \vec{m} dos domínios e o \vec{H}_{ap} , uma vez que eles são colineares, de modo que a magnetização dos domínios não muda. Este efeito é válido apenas para campos magnéticos pequenos, pois em amostras reais, pode haver

uma ondulação na magnetização em campos maiores. Os momentos da parede de domínio, porém, sofrem um torque responsável pelo deslocamento da PD do centro do fio. Para campos magnéticos baixos aplicados, é observado que a velocidade da PD segue um comportamento de lei de potência, mostrando que a dinâmica da PD obedece um regime adiabático [50, 52].

Grande parte dos estudos comparam a parede de domínio a uma estrutura com massa inercial fixa, que não altera sua forma enquanto se move [53]. Essa analogia é feita devido ao movimento da PD sob o nanofio manter suas características de magnetização. Para todas as estruturas de PD, um primeiro regime, começando no valor de campo zero, mostra uma relação linear (ou ligeiramente curva diminuindo a inclinação) de aumento de velocidade com o campo magnético. Este comportamento deve ser esperado devido ao fornecimento de energia ao sistema pelo campo e, também, devido ao amortecimento natural do material. Se considerarmos a largura da PD em movimento igual ao seu valor em repouso, a curva de velocidade em função do campo seria perfeitamente linear. Na verdade, Thiele [54] demonstrou que, para um movimento onde a estrutura da PD não se altera enquanto se move, a velocidade da PD obedece a relação de Walker [25]:

$$v = \frac{\gamma \Delta_T}{\alpha} H_{ap} \quad , \quad (3.3.1)$$

em que Δ_T é a largura da parede de domínio definida por Thiele como a integral sobre o movimento da estrutura m_0 da PD:

$$\frac{2}{\Delta_T} = \frac{1}{S} \int \left(\frac{\partial \vec{m}_0}{\partial x} \right)^2 d^3\vec{r} \quad , \text{ onde}$$

m_0 é a forma da PDT em repouso. (3.3.2)

Essa definição seria a largura da parede de domínio quando ela se encontra em movimento. Na verdade, ao se aplicar um campo magnético na direção do comprimento do nanofio, a PD atinge uma estrutura de forma constante ligeiramente diferente da estrutura original em repouso após alguns nanosegundos. A equação 3.3.1 é válida até um valor de campo máximo H_{ap} e nela, o termo $s = \frac{\gamma \Delta_T}{\alpha}$ é chamado de mobilidade da parede. Quando campos magnéticos maiores são aplicados abruptamente, ocorre uma ligeira deformação da estrutura da PD, devido a precessão da magnetização na componente m_z para a PDT e na componente m_y para a PDV. Ocorre uma ligeira diminuição da largura da PD no movimento, comparado à sua largura no repouso, o que sugere um aumento da energia da PD na dinâmica. A PDT no movimento pode passar a ter o formato de uma PDT assimétrica, dependendo da amplitude do campo magnético aplicado

abruptamente, enquanto a PDV desloca o núcleo do vórtice na direção do eixo y do fio. A medida que o campo magnético aumenta, a velocidade da PDV também vai aumentando, até um determinado valor em que o vórtice desloque tanto na direção y que é expelido do nanofio, transformando assim, a PDV em uma PDT [50].

A descrição desses fenômenos foi feita por Walker para uma PDT de Bloch unidimensional em uma amostra infinita de um fio com anisotropia uniaxial [25]. O regime de movimento descrito acima, em que a velocidade da PD tem uma dependência linear com o campo aplicado, ocorre até um limite de campo magnético, chamado de campo de Walker (H_W). Este limite é obtido por:

$$H_W = 2\alpha \frac{K}{\mu_0 M_s} \quad (3.3.3)$$

e estabelece o limite para a velocidade máxima da parede de domínio.

3.3.1.1 Movimento da parede de domínio acima do campo de Walker

Quando o campo de Walker é atingido, a velocidade média da PD cai abruptamente, e esta queda é chamada de colapso de Walker (“*Walker breakdown*”). Isso ocorre quando, tanto as componentes de magnetização, quanto a largura e velocidade da PD, oscilam. Podemos ver na figura 3.18 (a) a PDT se movendo acima do campo de Walker, apresentando amplitudes diferentes na oscilação da magnetização, o que difere do previsto para o modelo unidimensional. Na figura 3.18 temos paredes transversais que se movem sob um nanofio de dimensões $t = 5$ nm e $w = 300$ nm. Nas imagens da direita, vemos a componente da magnetização no plano, nas imagens do centro temos a magnetização fora do plano e, à esquerda, temos as figuras do divergente da magnetização. Em (a), um campo de $\mu_0 H = 2,6$ mT desloca a PT e sua estrutura muda através da contínua injeção de um antivórtice em uma das bordas do nanofio, o qual atravessa toda a dimensão de largura da amostra e desaparece na outra borda. Nesse momento, ocorre a injeção de um outro antivórtice com polaridade invertida se movendo no sentido da borda original. Esse fenômeno é visto na figura da seguinte forma: em 18 ns, surge um antivórtice na borda inferior do nanofio, o qual desaparece em 24 ns. Outro antivórtice com polaridade invertida surge nesse momento na borda superior do nanofio e se desloca para a borda inferior do nanofio, onde o ciclo irá se repetir. Em campos ainda maiores, a regularidade da variação deixa de existir, como podemos verificar na Fig. 3.18 (b) para um campo de $\mu_0 H = 4,0$ mT. Nesse caso, o antivórtice é aniquilado por um vórtice de polaridade oposta que é injetado

antes deste atingir a borda oposta do nanofio. Nas imagens do meio, vemos mais claramente o momento do surgimento do vórtice que aniquila o antivórtice em 24.8 ns ou 29.4 ns, mudando a magnetização da PDT. As imagens da esquerda intensificam as variações nas cores, de forma que podemos notar nitidamente a oscilação da magnetização da PDT enquanto se move sobre o nanofio. No caso analisado na figura em (b), no movimento da PDT em um valor de campo bem acima do campo de Walker, o cálculo de uma velocidade média torna-se mais complicado. A velocidade da PD sob um determinado campo magnético aplicado difere para a PDT e a PDV. Simulações mostram que a PDV se move mais rápido que a PDT [55].

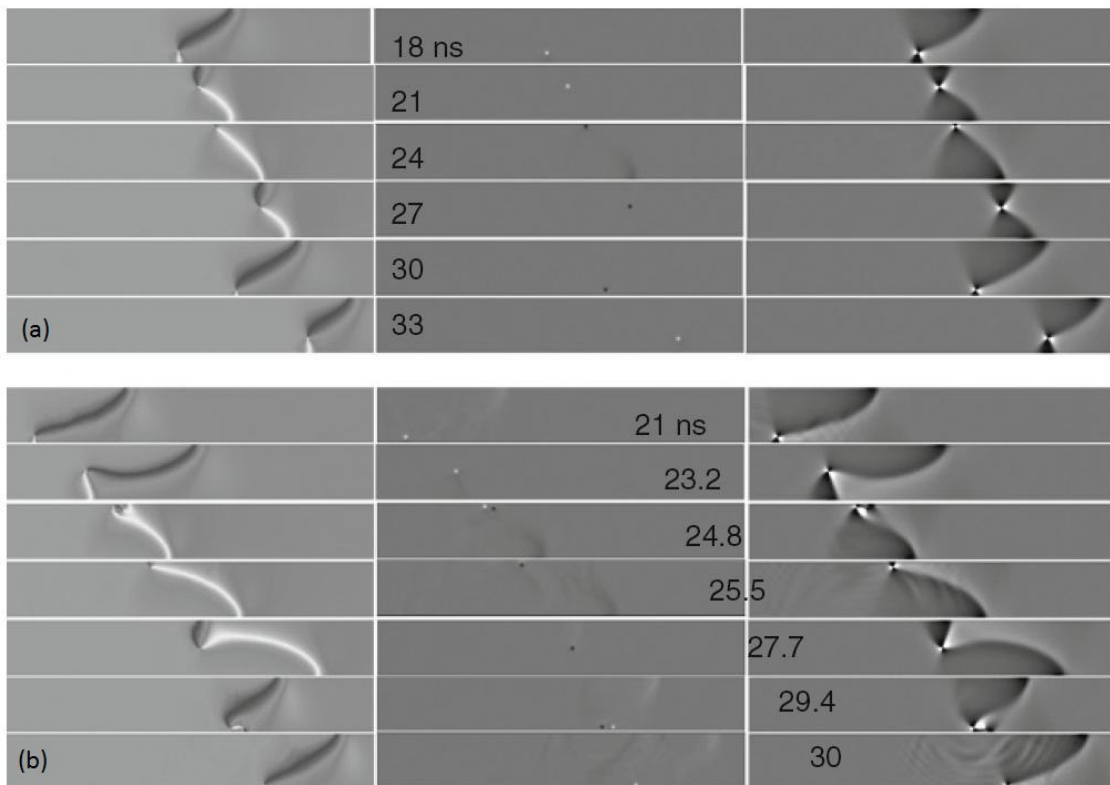


Figura 3.18: Movimento da PDT acima do campo de Walker para $\mu_0H = 2,6$ mT em (a) e $\mu_0H = 4,0$ mT em (b) em um nanofio de material macio. À direita temos a magnetização no plano xy , ao centro à magnetização no eixo z e à esquerda o divergente da magnetização. As linhas horizontais separam as configurações nos instantes de tempo em ns mostrados na figura. Retirado de [50].

Uma característica importante da dinâmica da PD em amostras perfeitas é a existência de um regime linear em pequenos campos aplicados, até mesmo valores de campo muito próximos de zero. Em amostras reais, no entanto, onde defeitos e imperfeições fazem parte da amostra, um valor de campo mínimo deve ser aplicado, a fim de deslocar a PD existente. Este campo mínimo é chamado de campo de propagação H_p e pode ser medido por magnetometria [50]. O campo de propagação pode ter origem a partir de muitos tipos de defeitos, de modo que a sua modelagem micromagnética é muito difícil. O tipo de defeito de maior importância,

nesse caso, para nanofios é a rugosidade da borda [56], mas a variação local dos parâmetros micromagnéticos (A , M_s ou até t), também pode ser considerada. O efeito de borda, no entanto, desempenha um papel importante e torna o campo de propagação maior que o campo coercivo ($H_p > H_c$). Isto também é consistente com a observação experimental de que o H_p aumenta à medida que a largura do nanofio diminui. Um exemplo de valor de campo de propagação é $H_p \approx 1.5$ a 100 Oe ou $\mu_0 H_p = 0.15$ a 10 mT, enquanto o campo coercivo para um nanofio de NiFe é $H_c \approx 0.1$ mT [57]. Quando as rugosidades se referem a nanocristais dentro da amostra com dimensões maiores que a de comprimento de troca, a PD pode sofrer um aprisionamento ou diminuir sua velocidade ao passar por ela [58]. No entanto, para valores pequenos de campo, o movimento da PD é excitado termicamente, e os potenciais de aprisionamento existentes são superados. A velocidade da PD é proporcional ao campo aplicado, até que este atinja o campo de Walker. Os defeitos e rugosidades provocam um aumento no valor do campo de Walker.

No caso de fios com imperfeições, a dissipação de energia na borda (final do comprimento) do nanofio, ocorre sob a forma de emissões de ondas de spin, impedindo o surgimento de estruturas como vórtice e antivórtice ao final do fio.

Experimentos comprovam que a dinâmica da PD depende do campo de Walker [59, 60]. O colapso de Walker foi observado experimentalmente em amostras de um único material, e, nos casos em que o campo de propagação foi muito baixo, de $0,15$ a $0,5$ mT, o campo de Walker ocorreu em $0,6$ e $1,0$ mT respectivamente [61, 62]. Além disso, a oscilação no tempo da estrutura da PDT e da sua velocidade também foram detectadas para campos magnéticos elevados [63].

Uma concordância significativa entre as previsões micromagnéticas e os resultados experimentais depende de um modelo apropriado para as PDs nos nanofios que aborde os defeitos e imperfeições e um correto valor para o amortecimento α . É importante notar, que para aplicações que requerem um rápido movimento da PD, o controle do campo de Walker se torna essencial.

3.3.2 Movimento da parede de domínio por corrente de spin polarizada

Uma corrente de spin polarizada pode originar o deslocamento de uma PD através do fenômeno conhecido como movimento da parede de domínio por uma corrente induzida (“*current-induced domain wall motion - CIDM*”), para uma revisão detalhada sobre o assunto veja [17, 50, 64]. Quando a corrente elétrica de spin polarizada flui sob o nanofio, a velocidade da PD

pode ser aumentada ou diminuída, dependendo da direção da corrente [65]. O efeito da corrente também varia dependendo da intensidade do campo magnético aplicado, se esse existir. Para a corrente induzida, ao contrário do campo magnético externo, a princípio, as PDT e PDV se movem com a mesma velocidade [64]. Entretanto, a PDV pode mover-se mais facilmente com uma corrente do que a PDT na presença de imperfeições da borda da amostra [66]. A possível razão para este comportamento é que o núcleo de vórtice, região com o maior gradiente de magnetização, se encontra longe das bordas do nanofio. Para defeitos do tipo buracos na amostra, o resultado é o oposto, ou seja, a PDT se move mais facilmente do que a PDV [67].

Para um nanofio que apresenta várias PDT de 180° , a aplicação de um campo magnético move as paredes “*head-to-head*” e “*tail-to tail*” em sentidos opostos, uma vez que o campo sempre tende a aumentar as dimensões dos domínios paralelos, e desta forma, duas PDTs se aniquilam e o nanofio passa a ter um monodomínio. No caso de uma corrente de spin polarizada no fio, todas as PDTs se movem no mesmo sentido, o que é mais interessante para o uso dos domínios como dispositivo de memória.

Há dois mecanismos de interação dos elétrons de condução com a parede de domínio [68]. O primeiro é a produção de um efeito proporcional à carga elétrica da corrente, e é importante apenas em paredes de domínio estreitas, onde há uma transferência da quantidade de movimento resultante da reflexão dos elétrons na PD. O outro mecanismo surge a partir do torque exercido pelos spins dos elétrons de condução sobre os spins dos átomos da parede de domínio. Em paredes mais “grossas” é atingido o limite adiabático, visto que os spins dos elétrons de condução podem seguir adiabaticamente os momentos magnéticos da parede de domínio, ou seja, o spin do elétron fica alinhado com a direção da magnetização.

Para explicar quantitativamente o efeito da corrente de spin polarizada no movimento da parede de domínio, é necessário introduzir nas equações de movimento da parede dois termos adicionais. O primeiro termo u , com dimensão de velocidade, depende da polarização do elétron de condução p e da densidade de corrente \vec{j} ; o segundo termo $(\beta/\alpha)u$, onde o parâmetro β mede como ocorre o efeito da corrente no movimento da parede de domínio de forma não adiabática, e α é o parâmetro de amortecimento do material. O termo u é definido da seguinte forma:

$$u = -\frac{g\mu_B p}{2eM_s} \vec{j}, \quad (3.3.4)$$

em que os termos g e e são, respectivamente, o fator- g do elétron e a carga do elétron. A forma analítica de introduzir tais grandezas na equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (L.L.G.) pode ser vista em detalhes em [44]. Para a liga NiFe, o fator $\frac{g|\mu_B|}{2eM_s}$ é numericamente igual a 7×10^{-11} m³/C. Então uma densidade de corrente típica de $j = 10^{12}$ A/m² e $p = 0,7$ correspondem a

$u = 50$ m/s. Esse resultado é coerente para casos adiabáticos de corrente elétrica aplicada no plano do fio.

A razão β/α pode adquirir vários valores. O parâmetro não adiabático β não é bem definido, havendo ainda controvérsias a respeito do seu significado físico, mas pode ser obtido experimentalmente. Uma análise do movimento de PD em um nanofio de $\text{Ni}_{20}\text{Fe}_{80}$, com 20 nm de espessura por 600 nm de largura, leva à relação $\alpha/\beta \approx 1$.

Um dos problemas que surgem na aplicação de uma corrente de spin polarizada é que apenas altas correntes levam a velocidades maiores comparadas a correntes de baixa intensidade, porém, podem provocar o efeito Joule na amostra, o que implica em uma redução da eficiência do método, ou até mesmo a desmagnetização do nanofio [17].

No limite em que consideramos que a PDT não apresenta uma variação interna da direção da magnetização (regime linear), e com uma combinação de corrente de spin polarizada com um campo magnético externo abaixo do campo de Walker, a velocidade da PDT pode ser obtida por:

$$v = \frac{\gamma_0 \Delta_T}{\alpha} H + \frac{\beta}{\alpha} u , \quad (3.3.5)$$

em que H está na direção da magnetização dos domínios e $\gamma_0 = \mu_0 \gamma$ é a razão giromagnética. Esta relação derivada inicialmente do modelo unidimensional para a parede transversal é válida somente no regime linear de movimento, para qualquer estrutura de PD no nanofio.

Para valores de campo acima do campo de Walker, a velocidade diminui abruptamente, similarmente ao que ocorre na dinâmica por campo magnético apenas. A figura 3.19 mostra os resultados de simulação computacional que revelam a queda da velocidade da PDT acima do campo de Walker, em um nanofio de 300 nm de comprimento e 5 nm tanto na largura quanto na espessura, para vários valores dos parâmetros adiabático u e não adiabático β da corrente de spin polarizada. Na região onde a curva $v(H)$ é praticamente plana, a velocidade v independe do valor de β , e se o campo aumenta novamente, essa dependência volta a acontecer. A velocidade da PDT, para valores onde a precessão da magnetização está presente torna-se

$$v = \alpha \gamma_0 \Delta_T H + u . \quad (3.3.6)$$

Notemos que a velocidade da PDT ainda depende de Δ_T , porém passa a ser diretamente proporcional à constante de amortecimento α .

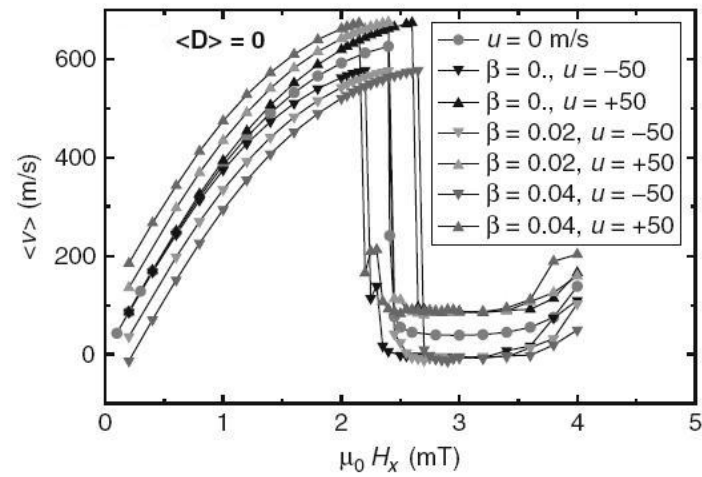


Figura 3.19: Velocidade de uma PDT em um filme fino sob um campo magnético somado a uma corrente de spin polarizada com os termos adiabático u e não adiabático β explicitado. Para cada valor de β mostrado, dois valores opostos de corrente, $u = \pm 50$ m/s são injetados. Aqui H_x é o campo H na direção do eixo x e $\langle D \rangle = 0$ significa ausência de defeitos. Figura retirada de [50].

4 MODELO TEÓRICO PROPOSTO PARA O ESTUDO DOS NANOFIOS MAGNÉTICOS E METODOLOGIA NUMÉRICA

Os nanofios estudados são compostos de uma quantidade muito grande de momentos magnéticos que interagem entre si e com o campo magnético externo. Estudar esses sistemas computacionalmente requer um tratamento matemático complicado de modo a reproduzir com a máxima concordância o comportamento observado em experimentos. Começaremos a descrição dos nossos estudos pelo modelo de Heisenberg que explica o comportamento magnético através das interações entre os momentos magnéticos localizados. Em seguida, descrevemos a Dinâmica de Spins e o tratamento Micromagnético, que são as técnicas computacionais que nos ajudarão a compreender e simular os processos magnéticos envolvidos na formação dos domínios. Os métodos utilizados nesta tese são muito semelhantes aqueles utilizados nas dissertações de mestrado desenvolvida pelo grupo de pesquisa de Matéria Condensada da UFJF em D. Toscano [69] e J.H. Silva [70].

4.1 MODELO DE HEISENBERG

O modelo de Heisenberg estabelece que a interação entre os momentos magnéticos fixos nos sítios de uma rede acontece através da energia de troca. O comportamento é bem explicado pelo modelo para materiais ferro e antiferromagnéticos abaixo da temperatura de Curie.

4.1.1 Energia de Troca

A **energia de troca** ou “*exchange energy*” é a responsável pelo alinhamento entre os momentos magnéticos adjacentes, sendo portanto, minimizada com o alinhamento ferromagnético ou antiferromagnético entre os momentos vizinhos. Como escrito na equação 2.2.1, o operador Hamiltoniano que corresponde à interação de troca é

$$H_{tr} = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (4.1.1)$$

onde relembramos que \vec{S}_i é o operador de spin do íon localizado no sítio i e J_{ij} é a constante de acoplamento de troca entre os sítios i e j . Essa interação decai rapidamente com a distância entre os sítios, portanto a sua contribuição é significativa apenas se os sítios i e j forem adjacentes e o somatório se estende somente aos primeiros vizinhos. Em redes com simetria cúbica, temos que:

$$J_{ij} = J_{ji} = \begin{cases} J, & i, j \text{ vizinhos} \\ 0, & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (4.1.2)$$

O Hamiltoniano 4.1.1 pode ser reescrito como:

$$H_{tr} = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (4.1.3)$$

em que o fator 1/2 é introduzido pois no somatório conta-se a mesma interação duas vezes e o símbolo $\langle i, j \rangle$ indica que o somatório ocorre sobre os pares de vizinhos mais próximos. A relação entre o momento magnético atômico e o momento angular de spin é

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{S} \quad (4.1.4)$$

e a partir dela, a Hamiltoniana da energia de troca 4.1.3 pode ser reescrita como:

$$H_{tr} = -\frac{J}{2\hbar^2 \gamma^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j, \quad (4.1.5)$$

Se tivermos uma constante de acoplamento $J > 0$, o alinhamento ferromagnético será favorecido, uma vez que a energia do sistema é minimizada por $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = +1$. Se, no entanto, $J < 0$ o alinhamento antiferromagnético é que irá minimizar a energia de troca, uma vez que $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -1$ para antiferromagnetos.

Por fim, observando-se a expressão 4.1.5, verifica-se que uma mudança abrupta na direção

dos momentos vizinhos, acarreta em um grande aumento na energia de troca.

4.1.2 Anisotropias magnéticas

A **anisotropia cristalina ou magnetocristalina** insere contribuições na energia magnética que dependem da orientação da magnetização com relação aos eixos do cristal. Isso significa que as propriedades magnéticas apresentadas pelo material dependerão da direção em que ele está sendo magnetizado. É uma anisotropia intrínseca do material. A energia de anisotropia magnetocristalina atua de tal maneira que a magnetização tende a se direcionar ao longo de certos eixos cristalográficos, que são chamados de direções de fácil magnetização, enquanto que as direções que são mais difíceis de serem magnetizadas são chamadas de direções duras. Podemos acrescentar ao hamiltoniano 4.1.3 uma contribuição que leva em conta a existência de uma direção fácil ou difícil para os momentos magnéticos se alinharem, dada por

$$H_{tr} = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \lambda S_i^z S_j^z \right), \quad (4.1.6)$$

em que λ é o parâmetro de anisotropia e z indica a direção escolhida.

Para $0 < \lambda < 1$, dizemos que a anisotropia é de plano fácil, na qual os momentos se alinham paralelamente a um plano. Para $\lambda < 0$, temos o modelo de eixo-fácil, caracterizado pela preferência dos momentos se alinharem perpendicularmente a um plano, é o caso dos materiais magnéticos duros. Quando há apenas um eixo fácil, dizemos que a anisotropia é uniaxial.

Certos tipos de materiais sofrem uma deformação em seu comprimento quando submetido a um campo magnético externo. Este fenômeno é chamado de magnetostricção. A **energia magnetoelástica** está diretamente associada à magnetostricção. O movimento de paredes de domínio de 90° , a rotação da magnetização, a nucleação e aniquilação de domínios produzem mudanças dimensionais que também podem contribuir para a energia magnetoelástica. Também podemos citar aqui a deformação da rede devido a uma tensão mecânica externa que altere os domínios da amostra. No caso de materiais como o Permalloy ($\text{Ni}_{79}\text{Fe}_{21}$) a energia magnetoelástica é praticamente zero, pois o seu valor $\lambda_s \sim 0$

De uma forma mais geral, podemos discretizar a energia dipolar em termos do hamiltoniano dipolar, substituindo assim, nas equações de energia, o campo desmagnetizante. Lembremos que a energia de interação dipolo-dipolo entre $\vec{\mu}_i$ e $\vec{\mu}_j$, separados por uma distância r_{ij} , com

aproximação para o primeiro termo, é dada por [35]:

$$H_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{\mu}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right]. \quad (4.1.7)$$

Lembrando que o versor $\hat{r}_{ij} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}$, podemos reescrever 4.1.7 como

$$H_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \right]. \quad (4.1.8)$$

Estendendo a interação dipolar para N dipolos, podemos reescrever o hamiltoniano para a interação dipolar como

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \right], \quad (4.1.9)$$

no qual o somatório mais interno representa a interação dipolar para qualquer dipolo do sistema e o somatório mais externo representa a soma de todas as interações dipolares do sistema, representando assim a energia dipolar do sistema como um todo. O fator 1/2 foi introduzido para se evitar o problema de dupla contagem, e ainda o caso de $i = j$ deve ser excluído do somatório, para não contabilizarmos a interação de um momento magnético com ele mesmo. Lembrando que todas as distâncias relativas entre os sítios podem ser escritas em função do parâmetro de rede do material, a_0 , podemos reescrever a equação 4.1.9 como

$$H_{dip} = \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{a_0^3}{r_{ij}^3} \left[\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \right] \quad (4.1.10)$$

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

O primeiro termo do somatório se refere a interação anti-ferromagnética, favorecendo o alinhamento antiparalelo entre os momentos magnéticos, enquanto o segundo termo, tende a alinhar os momentos ao longo da direção que os une, favorecendo o paralelismo entre os momentos e as bordas do material (anisotropia de forma). A energia dipolar decai com o cubo da distância entre os momentos, sendo assim, uma interação de longo alcance, e também por isso, é a principal responsável pela formação dos domínios magnéticos.

4.1.3 Energia Zeeman

Quando se aplica um campo magnético sobre o material, ocorrem modificações nas direções dos momentos magnéticos e na estrutura de domínios, de forma a minimizar a energia livre magnética. Associando a interação do campo magnético externo \vec{B}^{ext} com a magnetização do material \vec{M} , define-se o termo de energia Zeeman, dado por:

$$E_z = -\mu_0 \vec{M} \cdot \vec{B}^{ext} . \quad (4.1.11)$$

Os valores observados para essa energia são da ordem de 1 a 10^8 J/m³. O Hamiltoniano que representa a energia Zeeman é dado por,

$$H_z = - \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}^{ext} . \quad (4.1.12)$$

Substituindo a relação entre momento magnético atômico e momento angular, obtem-se:

$$H_z = -\gamma \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{B}^{ext} . \quad (4.1.13)$$

Podemos perceber que a energia Zeeman é minimizada quando os momentos magnéticos se encontram alinhados na direção do campo magnético aplicado. O modo como o material se comporta na presença do campo magnético depende das anisotropias magnéticas do material. Logo, a direção em que o campo magnético está sendo aplicado em relação à amostra interfere na energia Zeeman.

A energia livre magnética que descreve um sistema magnético é a soma de energia de troca, energias de anisotropias e energia Zeeman.

Para descrever o nanofio magnético de Permalloy-79, nosso objeto de estudo, levamos em conta as energias de troca, a energia anisotrópica de forma ou dipolar e a energia Zeeman. Tanto a energia magnetocristalina quanto a energia magnetoelástica são desprezíveis para o Permalloy, ou seja $\lambda \approx 0$ na equação 4.1.6. Através das energias que constituem o material, podemos determinar o campo efetivo local, que é a soma dos campos magnéticos interno e externo em cada sítio.

4.2 CAMPO LOCAL EFETIVO

O Hamiltoniano que descreve o nanofio de Permalloy é composto pelos termos de troca (eq. 4.1.5), dipolar (eq. 4.1.10) e Zeeman (eq. 4.1.12), $H = H_{tr} + H_{dip} + H_z$, sendo dado por:

$$H = -\frac{J}{2\gamma^2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j + \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}^{ext} \quad (4.2.1)$$

Para se estudar computacionalmente a dinâmica dos momentos magnéticos em nanofios, precisamos obter o campo local efetivo. O campo efetivo é o resultado de todas as contribuições de campo em cada sítio, que é resultado da interação com todos os momentos magnéticos do nanofio, e depende da posição de cada sítio na rede. Separando as interações de troca e dipolar no Hamiltoniano acima e escrevendo-o semelhante à forma de interação Zeeman, temos:

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \gamma \vec{S}_i \cdot \left\{ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j \right\} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \gamma \vec{S}_i \cdot \left\{ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij} - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \right\} + H_z \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_i^{tr} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_i^{dip} - \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} . \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

Se fizermos a derivada do Hamiltoniano da energia Zeeman (4.1.12) em relação a $\vec{\mu}_n$, encontramos o campo magnético externo que atua no sítio n , ou seja, o negativo do gradiente nas variáveis $\vec{\mu}_n$, nos fornece o campo magnético externo local:

$$\vec{B}_n^{ext} = -\frac{\partial H_z}{\partial \vec{\mu}_n} = -\vec{\nabla}_n H_z \quad (4.2.3)$$

Do mesmo modo, obtemos os campos locais de troca e dipolar derivando-se as parcelas correspondentes a cada um na equação 4.2.1 em relação a $\vec{\mu}_n$, de acordo com a equação 4.2.3. Logo, a equação geral para o campo magnético efetivo local, incluindo os campos externo e internos, é:

$$\vec{B}_n = -\frac{\partial H}{\partial \vec{\mu}_n} = -\vec{\nabla}_n H \quad (4.2.4)$$

O campo efetivo no sítio i , como foi mostrado anteriormente, é uma combinação do campo de troca com o campo dipolar acrescido do campo de interação Zeeman. Logo, o campo efetivo local total é dado por:

$$\vec{B}_i^{ef} = \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j + 2 \mathbf{B}^{ext} , \quad (4.2.5)$$

em que o fator 2 no campo externo é acrescentado de forma a anular o $\frac{1}{2}$ da dupla contagem.

Assim como existe um campo externo \vec{B}^{ext} na Hamiltoniana de Zeeman, vimos acima a existência de campos análogos de troca, \vec{B}^{tr} , e campo dipolar, \vec{B}^{dip} , no cálculo das energias de troca e dipolar em cada sítio i . Uma vez calculados os campos internos e externo em cada sítio, o modelo de Heisenberg incluindo o acoplamento entre os momentos magnéticos, suas interações com os campos internos gerados pelos outros dipolos e o campo externo, nos fornece a Hamiltoniana do sistema. Ou, de outra forma, considerando-se as Hamiltonianas de troca (eq. 4.1.3), dipolar (eq. 4.1.10) e de Zeeman (eq. 4.1.13) e utilizando-se da igualdade 4.1.4, obtemos a mesma Hamiltoniana que descreve o sistema, que é dada por

$$H = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{\mu_0 \gamma^2}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \gamma \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{B}^{ext} . \quad (4.2.6)$$

Essa Hamiltoniana será usada para descrever a dinâmica da magnetização nos nanofios de Permalloy.

4.3 DINÂMICA DE SPINS

No problema abordado neste trabalho, temos um nanofio magnético modelado em uma rede cúbica, que define o caráter cristalino, na qual a cada sítio está associado um operador \vec{S} . A evolução temporal do sistema é governada pela equação de movimento de Heisenberg [71]

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_n}{dt} = [\vec{S}_n, H] \quad (4.3.1)$$

em que i é a unidade imaginária, \vec{S}_n é o operador momento angular no sítio n e H é a Hamiltoniana que descreve o sistema, dada pela equação 4.2.6 e reescrita abaixo,

$$H = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{\mu_0 \gamma^2}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \gamma \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{B}^{ext} ,$$

e $[S_n^a, H]$ é o comutador de uma das componentes do momento angular com o Hamiltoniano. O índice a é uma das componentes x, y ou z . Cada sítio n da rede possui um campo efetivo local, o que sugere que, para encontrar a configuração do nanofio no passo seguinte, teremos n equações de movimento para resolver. O comutador na equação 4.3.1 é $[S_n^a, H] = S_n^a H - H S_n^a$. Utilizamos as propriedades dos comutadores de spin expressas no Apêndice A.1 para resolvermos a equação de movimento para cada spin. A equação 4.3.1 em termos de suas componentes, torna-se,

$$\begin{aligned} \frac{dS_n^a}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} [S_n^a, H] &= -\frac{i}{\hbar} [S_n^a, (H_{tr} + H_{dip} + H_z)] \\ & &= i\hbar \frac{dS_n^a}{dt} = [S_n^a, H_{tr}] + [S_n^a, H_{dip}] + [S_n^a, H_z] \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

em que os hamiltonianos H_{tr} , H_{dip} e H_z foram encontrados respectivamente nas equações, 4.1.3, 4.1.10 e 4.1.13. Utilizando as regras de comutação, o primeiro termo da parcela acima é resolvido da seguinte forma:

$$[S_n^a, H_{tr}] = \left[S_n^a, -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right] = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} [S_n^a, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j] \quad (4.3.3)$$

Resolvendo a equação para $a = x$ temos,

$$\begin{aligned}
[S_n^x, H_{tr}] &= -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} [S_n^x, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j] \\
&= -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} [S_n^x, S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z] \\
&= -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left([S_n^x, S_i^x S_j^x] + [S_n^x, S_i^y S_j^y] + [S_n^x, S_i^z S_j^z] \right) \\
&= -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S_i^y [S_n^x, S_j^y] + [S_n^x, S_i^y] S_j^y + S_i^z [S_n^x, S_j^z] + [S_n^x, S_i^z] S_j^z \right) \\
&= -\frac{iJ}{2\hbar} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\delta_{nj} S_i^y S_j^z + \delta_{ni} S_i^z S_j^y - \delta_{nj} S_i^z S_j^y - \delta_{ni} S_i^y S_j^z \right) \\
&= -\frac{iJ}{2\hbar} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{nj} \left(S_i^y S_j^z - S_i^z S_j^y \right) - \frac{iJ}{2\hbar} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{ni} \left(S_i^z S_j^y - S_i^y S_j^z \right) \\
&= -\frac{iJ}{2\hbar} \sum_i \left(S_i^y S_n^z - S_i^z S_n^y \right) - \frac{iJ}{2\hbar} \sum_j \left(S_n^z S_j^y - S_n^y S_j^z \right) \tag{4.3.4}
\end{aligned}$$

Substituindo-se os índices i e j por um índice geral k ,

$$\begin{aligned}
[S_n^x, H_{tr}] &= -\frac{iJ}{2\hbar} \sum_k (S_k^y S_n^z - S_k^z S_n^y) - \frac{iJ}{2\hbar} \sum_k (S_n^z S_k^y - S_n^y S_k^z) \\
&= -\frac{iJ}{2\hbar} \sum_k (S_k^y S_n^z - S_k^z S_n^y + S_n^z S_k^y - S_n^y S_k^z) \\
&= -\frac{iJ}{2\hbar} \sum_k (S_k^y S_n^z + S_n^z S_k^y) + \frac{iJ}{2\hbar} \sum_k (S_k^z S_n^y + S_n^y S_k^z) . \tag{4.3.5}
\end{aligned}$$

Nos parênteses acima temos anti-comutadores, nos quais aplicando-se a regra $\{A, B\} = AB + BA = \{B, A\}$ temos,

$$[S_n^x, H_{tr}] = \frac{iJ}{2\hbar} \sum_{\substack{k \\ k \neq n}}^N (\{S_n^y, S_k^z\} - \{S_n^z, S_k^y\}) . \tag{4.3.6}$$

O resultado acima pode ser generaliado para as demais componentes, através do símbolo ϵ^{abc} de Levi-Civita,

$$[S_n^x, H_{tr}] = \frac{iJ}{2\hbar} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \epsilon^{abc} \{S_n^b, S_k^c\} . \tag{4.3.7}$$

Pela regra de comutação A.1.1, com $K \neq n$ temos que $[S_n^b, S_k^c] = 0$, então $S_n^b S_k^c - S_k^c S_n^b = 0$, logo, $S_n^b S_k^c = S_k^c S_n^b$. Portanto, pela regra de anti-comutadores, temos:

$$\{S_n^b, S_k^c\} = S_n^b S_k^c + S_k^c S_n^b = 2S_n^b S_k^c. \quad (4.3.8)$$

Então a equação 4.3.7 pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} [S_n^x, H_{tr}] &= \frac{iJ}{2\hbar} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \epsilon^{abc} 2S_n^b S_k^c \\ &= \frac{iJ}{\hbar} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \epsilon^{abc} S_n^b S_k^c \\ &= i\hbar \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \epsilon^{abc} \gamma S_n^b \left\{ \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \frac{J}{\gamma \hbar^2} S_k^c \right\}, \end{aligned} \quad (4.3.9)$$

ou ainda, na forma vetorial,

$$[\vec{S}_n, H_{tr}] = i\hbar \gamma \vec{S}_n \times \left\{ \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \frac{J}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_k \right\}. \quad (4.3.10)$$

Comparando-se o termo entre chaves da equação acima com o primeiro termo da equação 4.2.2, percebemos que se trata do campo de troca gerado pelos spins vizinhos do sítio n , o que nos permite escrever,

$$[\vec{S}_n, H_{tr}] = i\hbar \gamma \vec{S}_n \times \vec{B}_n^{tr}. \quad (4.3.11)$$

Procedendo analogamente para o hamiltoniano da interação Zeeman e o hamiltoniano da interação dipolar, obtemos,

$$[\vec{S}_n, H_z] = i\hbar \gamma \vec{S}_n \times \vec{B}_n^{ext} \quad (4.3.12)$$

e

$$[\vec{S}_n, H_{dip}] = i\hbar\gamma \vec{S}_n \times \vec{B}_n^{dip} . \quad (4.3.13)$$

Substituindo as equações 4.3.11, 4.3.12 e 4.3.13 na equação de Heisenberg 4.3.1 obtemos,

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_n}{dt} = [\vec{S}_n, H] = i\hbar\gamma \vec{S}_n \times (\vec{B}_n^{tr} + \vec{B}_n^{dip} + \vec{B}_n^{ext}) , \quad (4.3.14)$$

ou seja,

$$\frac{d\vec{S}_n}{dt} = \gamma \vec{S}_n \times \vec{B}_n . \quad (4.3.15)$$

A expressão acima é uma generalização dos operadores de momento angular na representação de Heisenberg, que na equação clássica descreve a precessão de Larmor. Vemos que o momento angular varia no tempo precessando em torno do campo efetivo local \vec{B} , incluindo os campos locais de troca, dipolar e externo, com uma determinada frequência angular.

4.4 O LIMITE CLÁSSICO

O magnetismo só pode ser efetivamente descrito por uma teoria quântica, porém nos sistemas em que há a predominância de muitos números quânticos, o número de estados discretos possíveis ao momento angular é tão grande que podemos considerar que, no limite clássico, os operadores de spin apresentam um contínuo de estados. Esta consideração facilita muito o tratamento de alguns sistemas magnéticos. Nos spins, assumidos como vetores tridimensionais, podemos então, conhecer as suas três componentes simultaneamente, desprezando-se o Princípio de Incerteza de Heisenberg. Dessa forma, representamos os spins como vetores e podemos simular computacionalmente uma condição inicial para os nanofios magnéticos e acompanhar a sua evolução temporal através da dinâmica de spins. Esse processo de estudo computacional é bem aceito na comunidade científica e possui ótima concordância com vários resultados experimentais [18, 20, 28, 72].

Representaremos, a partir de agora, os operadores de spin, que possuem dimensão de momento angular, \hbar , por vetores com a mesma dimensão e módulo $\hbar S$, através da seguinte transformação:

$$\vec{S}_n \longrightarrow \hbar S \hat{S}_n \quad (4.4.1)$$

onde S é adimensional e \hat{S}_n são versores que obedecem o vínculo $|\hat{S}_n|^2 = \hat{S}_n \cdot \hat{S}_n = 1$ e $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2$.

Fazendo essa transformação na equação que determina o campo efetivo em uma determinada configuração i , equação 4.2.5, temos o campo efetivo clássico que atua em cada sítio

$$\vec{B}_i^{ef} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij} S}{\gamma \hbar} \hat{S}_j + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0 \gamma \hbar S}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij}) \hat{r}_{ij} - \hat{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \vec{B}_i^{ext} \quad , \quad (4.4.2)$$

e a equação 4.3.15 é reescrita como,

$$\frac{d\hat{S}_n}{dt} = \gamma \hat{S}_n \times \vec{B}_n \quad . \quad (4.4.3)$$

No limite clássico, o Hamiltoniano da equação 4.2.6 é definido da seguinte forma

$$\begin{aligned} H &= -\frac{JS^2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + \frac{\mu_0 \gamma^2 \hbar^2 S^2}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - 3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \gamma \hbar S \sum_{i=1}^N \hat{S}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} \\ &= -\frac{JS^2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + \frac{\mu_0 (\gamma \hbar S)^2}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - 3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \gamma \hbar S \sum_{i=1}^N \hat{S}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} \quad , \quad (4.4.4) \end{aligned}$$

de onde definimos o parâmetro da interação dipolar

$$D = \frac{\mu_0 (\gamma \hbar)^2}{4\pi a_0^3} = \frac{\mu_0 (g\mu_B)^2}{4\pi a_0^3} \quad (4.4.5)$$

com dimensão de energia [J], e obtemos:

$$H = -\frac{JS^2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + \frac{DS^2}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - 3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - g\mu_B S \sum_{i=1}^N \hat{S}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} \quad . \quad (4.4.6)$$

A equação acima é o Hamiltoniano de Heisenberg no limite clássico, incluindo a anisotropia de forma e a interação com o campo magnético externo.

Até agora nos preocupamos em estabelecer as equações que descrevem o comportamento magnético na sua forma original. No entanto, ao lidar com programação computacional precisamos estabelecer linguagens específicas mais apropriadas a construção do programa. Para tornar o sistema de equações 4.4.3 integrável computacionalmente, precisamos tornar algumas grandezas adimensionais. A equação 4.4.6 pode ser reescrita como

$$H = J \left\{ -\frac{S^2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + \frac{1}{2} \frac{DS^2}{J} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - 3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \frac{g\mu_B S}{J} \sum_{i=1}^N \hat{S}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} \right\}, \quad (4.4.7)$$

na qual o termo entre as chaves é definido como a Hamiltoniana H' adimensional, e podemos generalizar:

$$H = JH'. \quad (4.4.8)$$

Algumas modificações também podem ser feitas na equação 4.2.4 obtendo,

$$\vec{B}_n = -\frac{\partial H}{\partial \vec{\mu}_n} = -\frac{J}{\gamma \hbar S} \frac{\partial H'}{\partial \hat{S}_n} = \frac{J}{\gamma \hbar S} \vec{b}_n, \quad (4.4.9)$$

em que \vec{b}_n é o campo efetivo adimensional reescrito como

$$\begin{aligned} \vec{b}_i &= \frac{\gamma \hbar S}{J} \left\{ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar} \hat{S}_j + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0 \gamma \hbar}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})\hat{r}_{ij} - \hat{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \vec{B}_i^{ext} \right\} \\ &= S \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N J'_{ij} \hat{S}_j + \frac{D}{J} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{3(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})\hat{r}_{ij} - \hat{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \frac{g\mu_B}{J} \vec{B}_i^{ext} \right), \end{aligned} \quad (4.4.10)$$

de onde definimos $J'_{ij} = J_{ij}/J$ e a eq.4.1.2 é reescrita como

$$J'_{ij} = J'_{ji} = \begin{cases} 1, & \text{se } i, j \text{ vizinhos} \\ 0, & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (4.4.11)$$

Finalmente, a equação de Heisenberg que descreve a dinâmica do sistema é escrita de uma forma adimensional substituindo-se 4.4.9 em 4.4.3,

$$\frac{d\hat{S}_n}{dt} = \gamma \hat{S}_n \times \vec{B}_n = \frac{J}{\hbar S} \hat{S}_n \times \vec{b}_n \quad (4.4.12)$$

ou ainda,

$$\frac{d\hat{S}_n}{d\tau} = \hat{S}_n \times \vec{b}_n, \quad (4.4.13)$$

de onde definimos,

$$d\tau = \frac{J}{\hbar S} dt, \quad (4.4.14)$$

o incremento de tempo computacional, adimensional. Usamos para converter o intervalo de tempo computacional em intervalo de tempo real a igualdade

$$\Delta t = \frac{\hbar S}{J} \Delta \tau. \quad (4.4.15)$$

A energia é conservada durante as integrações da equação de movimento, o que faz a dinâmica de spins ser considerada um processo microcanônico.

4.5 AVALIAÇÃO DO NÚMERO TOTAL DE SPINS EM UM SISTEMA DE DIMENSÕES REAIS

Para se utilizar a dinâmica de spins, é necessário saber o número de spins do sistema a ser simulado. Uma vez identificado esse valor, teremos o número de vezes que a equação 4.4.13 deve ser integrada. As dimensões intermediárias para os nanofios de Permalloy (Py-79) considerados nesse trabalho são comprimento L entre 1 e 2 μm , largura w entre 10 e 90 nm e espessura $t = 10$ nm. O Py-79 apresenta uma estrutura de FCC (cúbica de faces centradas) como mostra a figura 4.1, na qual cada spin possui 12 vizinhos. O parâmetro de rede de uma célula convencional para o Py-79 é de $a_0 = 0,355$ nm.

Para calcularmos o número de spins em um nanofio, primeiro calculamos o número de células convencionais existentes, e para isso, basta dividirmos o volume total do nanofio, V_n , pelo volume de cada célula cúbica existente, V_c . O número de células, N_{cel} em um nanofio de dimensões $t = 10$ nm, $w = 25$ nm e $L = 1,3$ μm por exemplo, é dado por:

$$N_{cel} = \frac{V_n}{V_c} = \frac{10 \times 25 \times 1300}{0,355 \times 0,355 \times 0,355} = 7,26 \cdot 10^6 \quad (4.5.1)$$

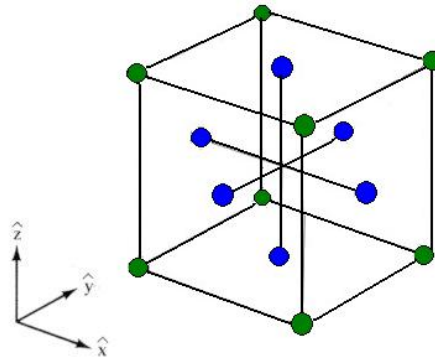


Figura 4.1: Modelo de uma célula de rede FCC.

Cada célula convencional contribui com $1/8 \times 8$ spins em cada face e $1/2 \times 6$ spins em cada vértice. Logo teremos $1/8 \times 8 + 1/2 \times 6 = 4$ spins em cada célula. Assim, o número total de spins, N_{spins} nesse nanofio típico é de

$$N_{spins} = 4 \times N_{cel} = 4 \times 7,26 \cdot 10^6 \approx 2,9 \cdot 10^7 \quad (4.5.2)$$

Percebemos que um número muito grande de integrações numéricas serão necessárias para o estudo da dinâmica, o que não é viável computacionalmente. Recorremos, então, à simulação micromagnética, a qual reduz o sistema real através de aproximações que não comprometem os resultados.

4.6 SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA

O micromagnetismo é uma forma de tratar materiais ferromagnéticos descrevendo-o não através dos momentos magnéticos atômicos μ , mas através de vetores de magnetização $M(\vec{r}, t)$. Em simulações micromagnéticas o sistema a ser estudado é dividido em células maiores que englobam vários momentos atômicos de forma a diminuir o número de interações a serem calculadas na simulação, o que torna menor o tempo computacional e a memória RAM necessária para realização dos cálculos. A figura 4.2 mostra um exemplo dessa discretização das células em duas dimensões.

O volume da nova célula de trabalho deve ser pequeno o suficiente para que os momentos atômicos em seu interior estejam praticamente alinhados, e ao mesmo tempo, grande, se comparado ao parâmetro de rede a_0 , para conter muitos momentos atômicos. A nova célula de trabalho terá um novo volume identificado por a^3 , e como a célula convencional de Permalloy possui um volume a_0^3 contribuindo com 4 momentos magnéticos, o novo número de spins de cada célula de trabalho é

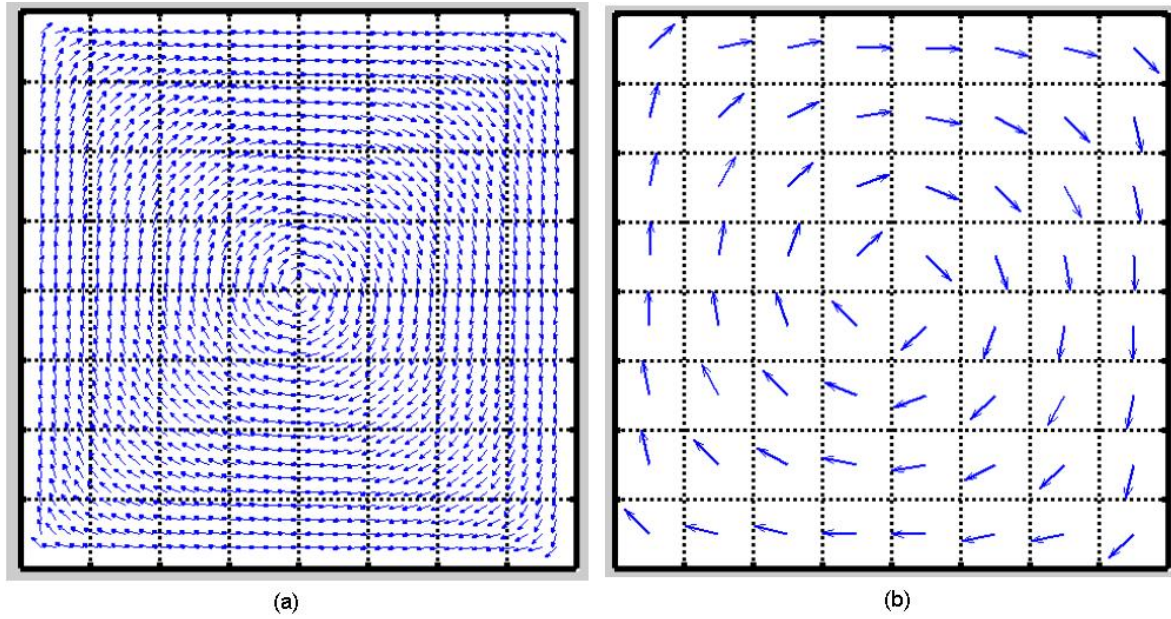


Figura 4.2: Representação do modelo micromagnético. Em (a) está representado um sistema real constituído por muitos momentos atômicos, enquanto em (b) representa-se a discretização do sistema (a), onde cada vetor representa as médias espaciais dentro dos momentos atômicos em cada célula. Retirado de [69].

$$N_{spins} = 4 \left(\frac{a^3}{a_0^3} \right) \quad (4.6.1)$$

em que a será o novo parâmetro de rede para a nova célula.

A escolha da dimensão da nova célula de trabalho depende do comprimento de troca, λ_{tr} , dado por:

$$\lambda_{tr} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \quad (4.6.2)$$

o qual representa o “alcance” da interação de troca, e por isso serve de parâmetro para o tamanho da célula de trabalho. λ_{tr} depende apenas de parâmetros intrínsecos do material, como magnetização de saturação, M_s , e a rigidez do vetor magnetização A . Para o Py-79 tais parâmetros são $M_s = 8,6 \cdot 10^5$ A/m e $A = 13 \cdot 10^{-12}$ J/m, o que fornece $\lambda_{tr} \approx 5,3$ nm. A escolha do novo parâmetro de rede a deve ser feita de modo que $a < \lambda_{tr}$, para garantir que os momentos magnéticos pertencentes a mesma célula estejam alinhados paralelamente. Dessa forma escolhemos $a = 5$ nm.

A magnetização de cada célula de trabalho é dada por:

$$\vec{M}_i = \frac{1}{v_{cel}} \sum_k \vec{\mu}_k^{atom} = \frac{1}{v_{cel}} \vec{m}_i \quad (4.6.3)$$

em que v_{cel} é o volume da célula de trabalho, \vec{m}_i é o momento magnético da célula e $\vec{\mu}_k$ é o momento magnético de cada sítio da rede contido dentro da nova célula. A interação de troca é forte o suficiente para manter o alinhamento entre os momentos magnéticos dentro da mesma célula. Além disso, cada célula possui aproximadamente o mesmo número de momentos atômicos, o que faz com o que o vetor magnetização resultante de uma célula para outra varie apenas suas direções, mas tenham módulos iguais. Os momentos magnéticos das células podem ser reescritos como:

$$\vec{m}_i = v_{cel}\vec{M}_i = v_{cel}M_s\hat{m}_i = m_{cel}\hat{m}_i \quad (4.6.4)$$

na qual \hat{m}_i é um versor na direção e sentido da magnetização de saturação.

As interações magnéticas permanecem as mesmas, porém ao modificar o parâmetro de rede, as constantes das interações devem ser renormalizadas. A Hamiltoniana de troca pode ser escrita como

$$H_{tr} = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j \quad (4.6.5)$$

em que $J_{cel} = 2Aa$ é a constante de acoplamento entre as células obtida partindo-se do limite contínuo do modelo de Heisenberg isotrópico [69].

A Hamiltoniana da interação dipolar é,

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \frac{\mu_0 m_{cel}^2}{4\pi a^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \quad (4.6.6)$$

na qual utilizamos $\vec{m}_k = m_{cel}\hat{m}_k$ de acordo com 4.6.4. Definindo o parâmetro da interação dipolar como

$$D_{cel} = \frac{\mu_0 m_{cel}^2}{4\pi a^3} = \frac{\mu_0 M_s^2 a^3}{4\pi} = \frac{a^2}{4\pi} \left(\frac{\mu_0 M_s^2}{2A} \right) 2Aa \quad (4.6.7)$$

e usando a eq. 4.6.2 obtemos,

$$D_{cel} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{tr}} \right)^2 J_{cel} \cdot \quad (4.6.8)$$

A Hamiltoniana de Zeeman é escrita como

$$H_z = -m_{cel}\mu_0 M_s \left(\sum_i^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} \right), \quad (4.6.9)$$

na qual b_i^{ext} é o campo externo adimensional definido como

$$b_i^{ext} = \frac{1}{\mu_0 M_s} \vec{B}_i^{ext}. \quad (4.6.10)$$

A constante da interação Zeeman em 4.6.9 pode ser escrita em termos de J_{cel}

$$m_{cel}\mu_0 M_s = \mu_0 M_s^2 a^3 = a^2 \left(\frac{\mu_0 M_s^2}{2A} \right) 2Aa = \left(\frac{a}{\lambda_{tr}} \right)^2 J_{cel}. \quad (4.6.11)$$

Podemos reescrever a Hamiltoniana micromagnética do sistema como,

$$H = J_{cel} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{m_{cel}\mu_0 M_s}{J_{cel}} \sum_i^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} + \frac{1}{2} \frac{D_{cel}}{J_{cel}} \sum_i^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\} \quad (4.6.12)$$

Todas as constantes de interação têm dimensão de energia, Joule, desta forma com J_{cel} em evidência na equação acima temos um hamiltoniano adimensional com versores. Ou ainda, em termos do comprimento de troca, substituindo-se as constantes 4.6.8 e 4.6.11 temos:

$$H = J_{cel} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \left(\frac{a}{\lambda_{tr}} \right)^2 \sum_i^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} + \frac{1}{8\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{tr}} \right)^2 \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\}. \quad (4.6.13)$$

O termo entre chaves é a Hamiltoniana adimensional do sistema

$$H = J_{cel} H'. \quad (4.6.14)$$

Podemos obter novamente o campo efetivo local \vec{B}_i em Tesla, derivando-se a Hamiltoniana em relação às componentes dos momentos magnéticos das células, \vec{m}_i , ou seja,

$$\vec{B}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i} = -\frac{J_{cel}}{m_{cel}} \frac{\partial H'}{\partial \hat{m}_i} = \frac{J_{cel}}{m_{cel}} \vec{b}_i, \quad (4.6.15)$$

e o campo efetivo local é dado por,

$$\vec{b}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N C_{ij} \hat{m}_j + \left(\frac{a}{\lambda_{rr}} \right)^2 \vec{b}_i^{ext} - \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{rr}} \right)^2 \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{m}_j - 3\hat{r}_{ij}(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right], \quad (4.6.16)$$

em que a constante C_{ij} é:

$$C_{ij} = C_{ji} = \begin{cases} 1, & i, j \text{ vizinhos} \\ 0, & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (4.6.17)$$

A dinâmica de spin para o micromagnetismo é governada por equações diferenciais. A equação de Landau-Lifshitz (L.L.) é:

$$\frac{d\vec{m}_i}{dt} = \gamma \vec{m}_i \times \vec{B}_i - \frac{\alpha |\gamma|}{m_i} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{B}_i) \quad (4.6.18)$$

na qual α é o parâmetro de amortecimento do sistema dependente do tipo de material. Esse termo dissipativo é o responsável pelo alinhamento dos momentos magnéticos na direção do campo efetivo. A constante γ é a razão giromagnética definida por

$$\gamma = \frac{g\mu_B}{\hbar} = \frac{ge\hbar}{2m_e\hbar} = \frac{e}{m_e}, \quad (4.6.19)$$

e é negativa para elétrons. Substituindo-se o versor \hat{m} e o campo efetivo adimensional \vec{b}_i na equação 4.6.18, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{m}_i}{dt} &= |\gamma| \frac{J_{cel}}{m_{cel}} \left[\pm \hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \right] \\ &= \omega_0 \left[\pm \hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \right], \end{aligned} \quad (4.6.20)$$

na qual ω_0 é a frequência angular de precessão do spin com dimensão de inverso de tempo (1/s) podendo ser reescrita como,

$$\omega_0 = |\gamma| \frac{J_{cel}}{m_{cel}} = \frac{2Aa\gamma}{m_{cel}} \left[\frac{\mu_0 M_s}{\mu_0 M_s} \right] = \left[\frac{2A}{\mu_0 M_s^2} \right] \frac{\mu_0 M_s \gamma}{a^2} = \left(\frac{\lambda_{rr}}{a} \right)^2 \mu_0 M_s \gamma. \quad (4.6.21)$$

A equação 4.6.20 pode ser reescrita como

$$\frac{1}{\omega_0} \frac{d\hat{m}_i}{dt} = \pm \hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i). \quad (4.6.22)$$

Definindo $d\tau = \omega_0 dt$ e substituindo na equação acima obtemos a versão adimensional da equação de Landau-Lifshitz:

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = \pm \hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i). \quad (4.6.23)$$

na qual $d\tau$ é o incremento de tempo computacional definido na eq. 4.4.14. A conversão entre o intervalo de tempo computacional no intervalo de tempo real também pode ser feita através da igualdade

$$\Delta t = \frac{1}{\omega_0} \Delta \tau. \quad (4.6.24)$$

Para o Py-79 o valor de referência é $\omega = 3,13 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ [75]. O incremento $d\tau$ é escolhido de forma que na conversão do passo computacional em tempo real dt , sejam obtidos valores da ordem de $dt = 10^{-14} \text{ s}$.

Se, ao invés da equação de Landau-Lifshitz utilizarmos a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, o sistema de equações a se integrar é:

$$\frac{1 + \alpha^2}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = \vec{m}_i \times \vec{B}_i + \frac{\alpha}{m_i} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{B}_i). \quad (4.6.25)$$

Substituindo-se as equações 4.6.4 e 4.6.15 na equação de L.L.G. acima, temos,

$$\frac{1 + \alpha^2}{\gamma} \frac{d\hat{m}_i}{dt} = \frac{J_{cel}}{m_{cel}} \hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \frac{J_{cel}}{m_{cel}} \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i), \quad (4.6.26)$$

na qual o membro direito é o mesmo que aparece na equação L.L. (4.6.18), e utilizando-se dos mesmos parâmetros, chegamos à equação adimensional de L.L.G.:

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = \frac{1}{1 + \alpha^2} [-\hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i)]. \quad (4.6.27)$$

A equação de L.L.G. é discutida no apêndice A.2.

4.7 INTEGRAÇÃO DA EQUAÇÃO DE MOVIMENTO

As equações de L.L.G. são integradas computacionalmente através de métodos numéricos utilizados especificamente para resolver um conjunto de equações diferenciais ordinárias. Utilizaremos nesse trabalho o preditor-corretor [76] e o método de Runge-Kutta [77].

A equação 4.6.27 será resolvida para determinar a evolução temporal da magnetização do nanofio magnético. Tais equações diferenciais apresentam a seguinte estrutura:

$$\frac{d\vec{m}_i^a}{d\tau} = \vec{F}(m_i^a) . \quad (4.7.1)$$

na qual o índice “ a ” representa as coordenadas espaciais e “ i ” o sítio da rede onde encontraremos a nova configuração de spin. Reescrevendo a equação para cada coordenada espacial temos

$$\frac{d\vec{m}_i^x}{d\tau} = \vec{F}(m_i^x) = \vec{f}^x(\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z, \tau) , \quad (4.7.2)$$

$$\frac{d\vec{m}_i^y}{d\tau} = \vec{F}(m_i^y) = \vec{f}^y(\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z, \tau) \text{ e} \quad (4.7.3)$$

$$\frac{d\vec{m}_i^z}{d\tau} = \vec{F}(m_i^z) = \vec{f}^z(\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z, \tau) , \quad (4.7.4)$$

nas quais as componentes dos vetores \vec{f}^a são funções das componentes dos campos efetivos locais, e \vec{m}^x , \vec{m}^y e \vec{m}^z são componentes dos campos efetivos locais. Como existem N sítios para integrar esse sistema, temos que especificar $3N$ condições iniciais,

$$\vec{m}^x(\tau_0) = \vec{m}^{x_0} ,$$

$$\vec{m}^y(\tau_0) = \vec{m}^{y_0} ,$$

$$\vec{m}^z(\tau_0) = \vec{m}^{z_0} . \quad (4.7.5)$$

Computacionalmente, iremos determinar os valores aproximados dos vetores m^a nos instantes $\tau_n = \tau_0 + n\Delta$, onde $n = 1, 2, \dots, N$, e Δ é o incremento de tempo, e $d\tau \rightarrow \Delta$. O valor inicial é

fornecido pelo método de Runge-Kutta, o qual é implementado computacionalmente da forma descrita a seguir.

4.7.1 Método de Runge Kutta de 4ª Ordem

O método de Runge-Kutta usa a média ponderada das inclinações no intervalo $[\tau, \tau_{n+1}]$. É um método de passo simples, cuja solução em um instante qualquer depende somente dos dados no instante antecessor. Além disso, o método fornece informações de ótima precisão com erros de truncamento de ordem (τ^5). Para evoluir no tempo de τ para τ_{n+1} utiliza-se o algoritmo :

$$m_{n+1}^a = m_n^a + \frac{\Delta}{6}(k_{n1}^a + 2k_{n2}^a + 2k_{n3}^a + k_{n4}^a) , \quad (4.7.6)$$

na qual m_{n+1}^a é a nova configuração do momento m^a e ainda,

$$k_{n1}^a = f^a(m_n^a, \tau_n) , \quad (4.7.7)$$

$$k_{n2}^a = f^a(m_n^a + \frac{1}{2}\Delta k_{n1}^a, \tau_n + \frac{1}{2}\Delta) , \quad (4.7.8)$$

$$k_{n3}^a = f^a(m_n^a + \frac{1}{2}\Delta k_{n2}^a, \tau_n + \frac{1}{2}\Delta) , \quad (4.7.9)$$

$$k_{n4}^a = f^a(m_n^a + \Delta k_{n3}^a, \tau_n + \Delta) . \quad (4.7.10)$$

Tendo uma configuração inicial previamente estipulada como na equação 4.7.5 dos tipos: aleatório, PDT no centro, PDV no centro, monodomínio, ou de qualquer maneira previamente escolhida, calcula-se o campo efetivo dessa configuração e os coeficientes k_{n1}^a são determinados. Antes do passo de tempo Δ , os campos efetivos intermediários são computados, logo os coeficientes k_{n2}^a , k_{n3}^a e k_{n4}^a são definidos. Vários passos vão sendo dados até que se atinja a configuração desejada ou até que se obtenha o intervalo de tempo esperado.

4.7.2 Método Preditor-Corretor de 4ª ordem

É um método de passos múltiplos, ou seja, utiliza da informação de alguns passos além do antecessor para obter a nova configuração [76]. O método começa pela implementação do algoritmo de Adams-Bashforth de quatro passos conhecido como método preditor:

$$m_{n+1}^a = m_n^a + \frac{\Delta}{24}(55f_n^a - 59f_{n-1}^a + 37f_{n-2}^a - 9f_{n-3}^a) , \quad (4.7.11)$$

para obter a configuração da magnetização m_{n+1}^a a partir das quatro configurações anteriores. O resultado obtido possui um erro para mais no valor de m_{n+1}^a , o qual é corrigido pelo algoritmo corretor de Adams-Moulton:

$$m_{n+1}^a = m_n^a + \frac{\Delta}{24}(9f_{n+1}^a + 19f_n^a - 5f_{n-1}^a + f_{n-2}^a) , \quad (4.7.12)$$

que obtem um valor mais preciso da próxima configuração do momento m_{n+1}^a .

Como o método preditor-corretor necessita de quatro configurações iniciais para calcular a quinta configuração e assim por diante, não podemos iniciar os cálculos dos campos efetivos e magnetização intermediários por ele. Porém, trata-se de um método cujo tempo computacional exigido é bastante inferior ao tempo necessário ao método de Runge-Kutta. Essa diferença de tempo está relacionada ao cálculo do termo da dipolar, que é de longo alcance, no qual o método de Runge-Kutta exige quatro cálculos do campo efetivo em cada passo computacional, enquanto o preditor-corretor exige apenas dois. Para resolver esse problema, iniciamos a nossa simulação do nanofio magnético pelo método Runge-Kutta até obter as quatro primeiras configurações iniciais. Uma vez obtidas, utilizamos o método de preditor-corretor para todas as próximas configurações desejáveis.

A precisão do método é proporcional à potência do incremento de tempo τ , e o erro local de truncamento por passo é de τ^{n+1} . Por isso utilizamos nesse trabalho um método de 4ª ordem e incremento de tempo $\tau = 0,001$.

Todos os nossos programas foram feitos na linguagem Fortran 90.

4.8 O MODELO DE IMPUREZA MAGNÉTICA

Impurezas magnéticas incluídas nos nanofios magnéticos alteram a maneira das PDs se moverem sobre o fio. Em diversos trabalhos, vários tipos de defeitos artificiais são usados para gerar um potencial local que age como sítio de aprisionamento da PD [12, 26, 27, 29, 31, 32, 30]. Até mesmo a inclusão de íons de outros materiais pode ser responsável pela variação na propagação da PD sobre o nanofio, se tornando uma maneira de controlar o posicionamento e velocidade das PDs [20, 28, 78]. Nesse trabalho propõe-se a mudança na constante de troca entre a célula da impureza e suas vizinhas. Incluímos uma impureza magnética pontual, modificando a constante de acoplamento spin-spin de J para J' na célula em que queremos simular a impureza magnética. A constante de acoplamento, J' pode assumir valores maiores ou menores que J alterando a interação com os momentos vizinhos, simulando assim, a presença de uma impureza magnética. Esse modelo de impureza foi proposto inicialmente pelo nosso grupo de pesquisa no trabalho relacionado à nanodiscos magnéticos [33].

A figura 4.3 mostra a inclusão de uma impureza magnética e como ocorre o acoplamento entre a célula com a impureza e suas vizinhas. A impureza está representada pela célula central em vermelho e a constante J' é válida na interação entre a célula com a impureza e suas vizinhas. As demais células que não interagem diretamente com a impureza continuam com a constante de acoplamento J válida.

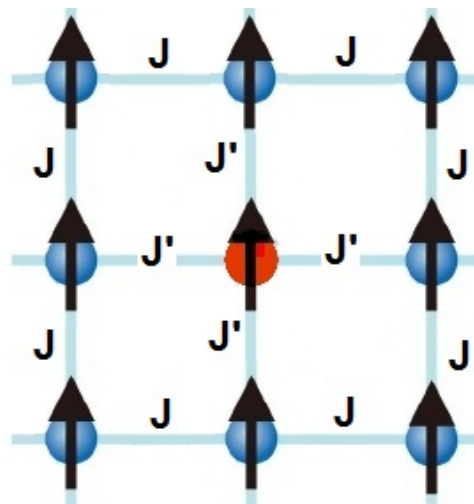


Figura 4.3: Esquema representando o modelo de impureza pela mudança de J por J' entre as células vizinhas. Retirado de [70].

Uma nova Hamiltoniana deve substituir a Hamiltoniana 4.6.12 que apresenta apenas sítios “puros”. O novo modelo para o nanofio com impureza magnética é dado por

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i \neq i', j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{J'}{2J} \sum_{\langle i', j \rangle} \hat{m}_{i'} \cdot \hat{m}_j + \frac{D}{2J} \sum_{i, j} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \frac{Z}{J} \sum_i \hat{m}_i \cdot \hat{b}_i^{ext} \right\}. \quad (4.8.1)$$

na qual i' é a posição da impureza na rede, e i é a posição do spin na rede. O primeiro termo representa a interação de troca spin-spin, o segundo termo representa a interação de troca entre a impureza e os spins vizinhos. O terceiro termo representa a interação dipolar, que não depende da constante de acoplamento de troca, e o último termo é a interação Zeeman. Lembrando que as constantes são $\frac{D}{J} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{rr}} \right)^2$ e $\frac{Z}{J} = \left(\frac{a}{\lambda_{rr}} \right)^2$.

A partir dessa nova Hamiltoniana, toda a dinâmica é simulada da mesma maneira descrita anteriormente.

4.8.1 Determinação da velocidade da parede de domínio transversal no nanofio

Além do método já descrito na seção 3.3.1 para calcular a velocidade da PDT, uma forma bastante simples de se calcular a velocidade da parede de domínio transversal foi proposta por Porter e Donahue [23], que utilizaram de resultados da simulação micromagnética para incluir a dependência da velocidade tanto em relação à largura e à espessura do nanofio, quanto à intensidade do campo magnético aplicado. Após estabelecer-se o equilíbrio magnético em termos energéticos, aplica-se um pulso de campo ao longo do eixo x do nanofio da seguinte forma:

$$\mu_0 H_x(t) = \mu_0 H_{ap} [1 - \cos(2\pi f t)], \quad 0 < t < 1 \text{ ns}, \quad (4.8.2)$$

em que a frequência do campo magnético H usada é $f = 1$ GHz e t é o tempo de aplicação do pulso, no qual 1,0 ns corresponde a um período cosseno completo. Como a PDT mantém sua forma enquanto se movimentava abaixo do campo de Walker, a sua magnetização permanece constante ao longo do eixo. A região de domínio magnético tem magnetização no eixo x e em sentido contrário nos lados opostos da parede. Essas características nos levam a calcular a velocidade $v(t)$ da parede através da derivada da magnetização média do nanofio no eixo x no tempo:

$$v(t) = \frac{L}{2} \frac{d\langle m_x(t) \rangle}{dt}, \quad (4.8.3)$$

na qual $\frac{L}{2}$ é a metade do comprimento do nanofio e $m_x(t)$ representa a magnetização em x no nanofio no instante t . A equação é uma técnica simples que em vários casos está em conformidade com o modelo de Thiele expresso na equação 3.3.1.

5 RESULTADOS

Na maioria dos trabalhos teóricos e computacionais, algumas simplificações são feitas de modo a reduzir o número de interações a serem calculadas e, conseqüentemente, o tempo computacional. A interação dipolar é a principal responsável por complicações devido ao seu caráter de longo alcance. Uma vez que ela é proporcional ao inverso do cubo da distância, um possível truncamento no alcance levaria a uma queda no tempo computacional e preservaria os principais efeitos da interação. Alguns trabalhos substituem a interação dipolar por um termo anisotrópico do tipo $\sum(\vec{S} \cdot \hat{n})^2$, em que \hat{n} são versores normais à superfície [79]. Dessa forma, os spins são forçados a ficar perpendiculares a \hat{n} , imitando o papel da interação dipolar e competindo com a interação de troca. No entanto essa denotação é verdadeiramente similar à dipolar apenas em temperaturas próximas de zero Kelvin. Por isso, para manter um caráter real durante a simulação, mantivemos o termo dipolar sem cortes, perdendo em tempo computacional, mas tornando os resultados o mais próximo possível da realidade microscópica. Nosso trabalho iniciou-se com a geração de nanofios magnéticos com vários valores de comprimento, largura e espessura. Posteriormente, fixamos o comprimento e a espessura do fio e realizamos um estudo da dinâmica da magnetização nos nanofios e a influência da inclusão de impurezas magnéticas.

5.1 GERAÇÃO DOS NANOFIOS MAGNÉTICOS

Utilizando-se das interações de troca 4.6.5 e dipolar 4.6.6 e substituindo todas as constantes da nm 4.6.14 com os valores específicos para o Permalloy, geramos nanofios magnéticos de diferentes dimensões. A configuração inicial estabelecida para a evolução temporal é escolhida entre os dois tipos mostrados na figura 5.1. A primeira evolui para uma parede de domínio do tipo transversal e a segunda evolui para uma parede do tipo vórtice.² A escolha entre as duas

²Todas as figuras dos nanofios mostradas nesse trabalho foram cortadas no eixo x . A região mostrada é aquela em que se encontra a PD ou outra região cujo estudo estará em foco. Se, nas figuras, optássemos em manter a dimensão real do comprimento, os detalhes dos momentos magnéticos e a região de PD seriam imperceptíveis.

configurações se define através do diagrama de fase visto na figura 3.15, que determina o tipo de parede que se estabelece no nanofio pela relação entre a sua largura e a sua espessura.

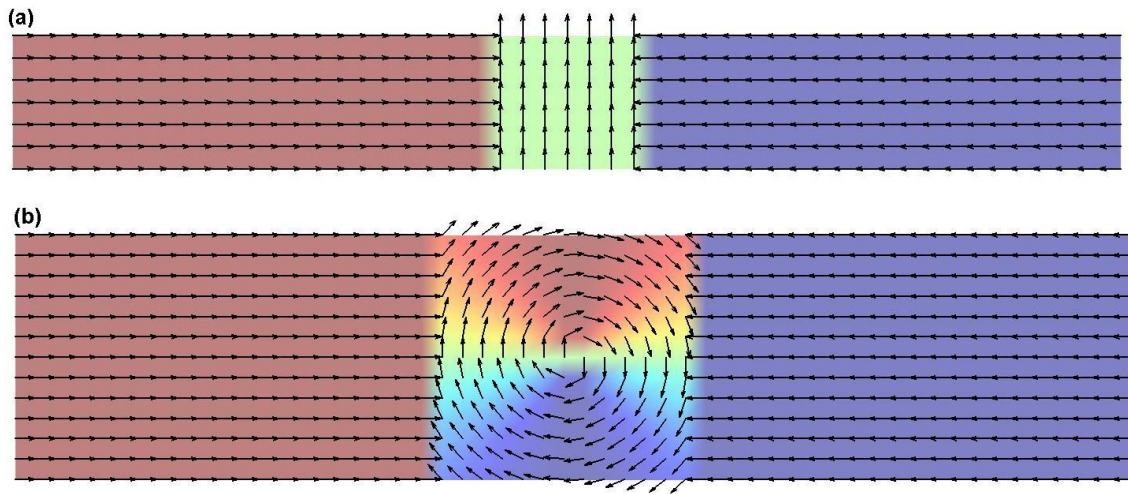


Figura 5.1: Configurações de spins iniciais dadas aos nanofios. Em (a) a configuração final esperada é uma PDT e em (b) uma PDV. Ambas as figuras sofreram cortes no comprimento visando mostrar apenas a região central de surgimento da parede de domínio.

A partir dessa configuração inicial de spins, pelo processo de integração da equação de L.L.G. com amortecimento $\alpha \neq 0$, o sistema evolui no tempo para a configuração de energia local mínima. O estado fundamental é atingido quando os momentos magnéticos se alinham com os respectivos campos efetivos, e nesse estágio a energia total se estabiliza. O gráfico da figura 5.2 mostra como a energia evolui no tempo até ser obtido o estado fundamental. Após esse processo, de acordo com as dimensões do nanofio, obtemos a configuração final de spins esperada, e é gerado um nanofio com dois domínios separados por uma parede de domínio ou transversal, ou vórtice, em seu centro.

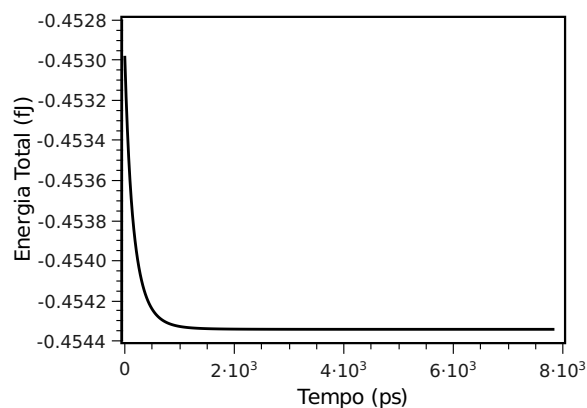


Figura 5.2: Evolução da energia total do sistema (energia de troca somada à energia dipolar) em unidades de *femtoJoule* em função do tempo em unidade de *pico-segundos*. O estado fundamental corresponde à configuração de parede de domínio no centro do nanofio.

A figura 5.3 mostra a configuração do estado fundamental para os nanofios mostrados na figura 5.1 (a) e (b) respectivamente. Na PDT a magnetização encontra-se totalmente no plano xy , enquanto a PDV possui magnetização ao longo do eixo z apenas na região do núcleo do vórtice. Como o número de momentos magnéticos ao longo do nanofio é extremamente grande, a magnetização total ao longo do eixo z é praticamente nula, mesmo no nanofio com uma PDV. Não abordamos nesse trabalho a parede transversal assimétrica devido a semelhança nos resultados obtidos para a PDT no estudo da dinâmica.

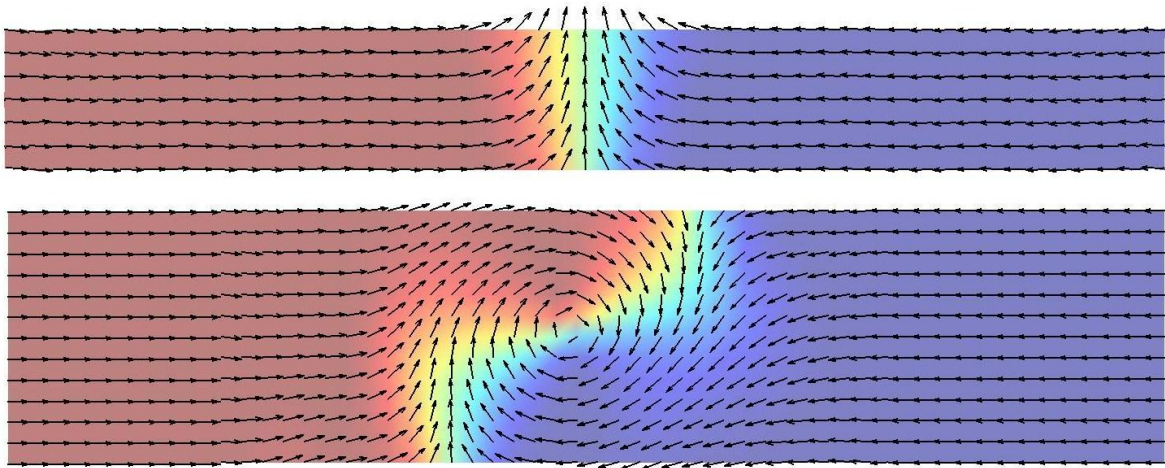


Figura 5.3: Configurações de spins obtidas no estado fundamental. Em (a) nanofio apresentando uma PDT evoluída da figura 5.1 a; em (b) uma PDV evoluída da figura 5.1 b.

Com o intuito de confirmar se as configurações obtidas são realmente as que apresentam o estado de menor energia, fizemos alguns testes com nanofios de diferentes dimensões. Os diagramas de fase das figuras 3.14 e 3.15 estabelecem uma curva limite entre os tipos de paredes de domínio e, a partir deles, utilizamos o código computacional para confirmar a curva teórica estudada. Escolhemos os pontos de 1 a 13 marcados no diagrama da figura 5.4 para reproduzir os 13 nanofios com as larguras e espessuras indicadas. Como o parâmetro de rede é $a = 5$ nm, as espessuras só podem ser iguais a $t = N \cdot 5$, onde N é um número inteiro variando de 1 a 4 para o nosso sistema, como mostra o gráfico. A região onde predomina-se a PDV possui os valores de espessura t e largura w maiores, o que aumenta muito o volume do nanofio, aumentando conseqüentemente, a quantidade de momentos magnéticos. Nesse caso, o tempo computacional torna-se um grande inconveniente na simulação. Como alternativa, escolhemos os pontos 4, 7, 8, 11 e 13 para nanofios com uma PDV por estarem próximos à curva do diagrama, sendo as menores dimensões de nanofios que fornecem essa configuração de parede. Os valores utilizados para o comprimento dos nanofios nessa fase do trabalho foram entre $1,0 \mu\text{m}$ e $2,0 \mu\text{m}$.

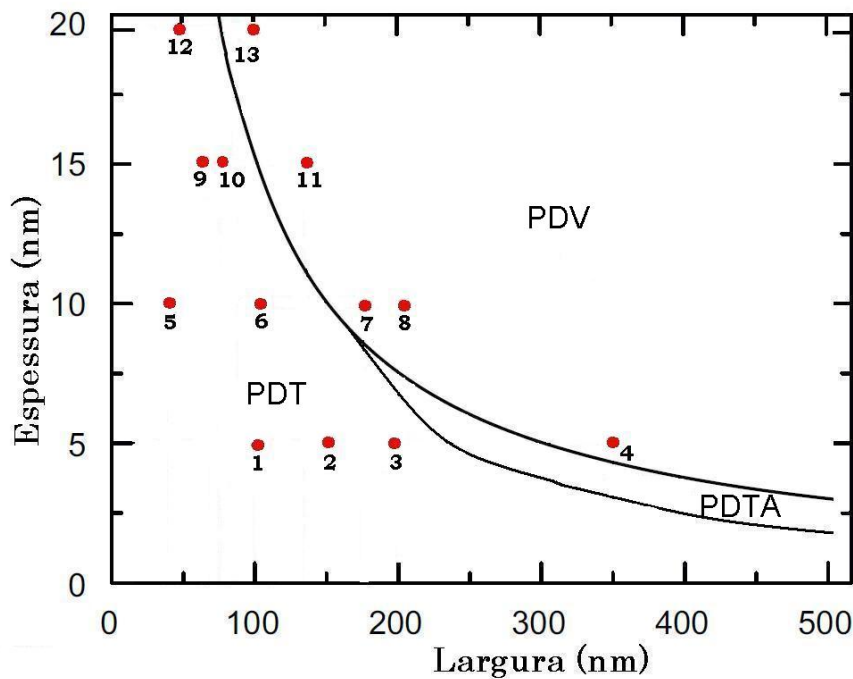


Figura 5.4: Combinação entre a largura e espessura para os 13 nanofios gerados. A curva de separação entre as paredes de domínio é a mesma apresentada no diagrama de fase da figura 3.15.

Cada nanofio escolhido foi gerado duas vezes: o primeiro com a configuração inicial mostrada na figura 5.1 a e o segundo com a configuração inicial em 5.1 b. Desta forma, após cada configuração atingir um mínimo local de energia, comparamos os dois valores de energia total atingidos. O menor valor de energia representa a configuração (PDT ou PDV) que um nanofio com as referidas dimensões irá apresentar no estado fundamental na ausência de campos externos. Para os 13 nanofios gerados, a mínima energia atingida em ambas as configurações (PDT ou PDV no centro) juntamente com os valores das dimensões t , w e L , são mostrados na tabela 5.1.

A menor energia para cada nanofio está destacada na tabela 5.1 na cor azul e em negrito. Podemos comprovar que todas as configurações de menor energia estão de acordo com a curva prevista no diagrama em 5.4, o que mostra que nosso modelo computacional concorda com o modelo teórico. Além disso, é importante notar da tabela 5.1 que quanto mais próximo o ponto escolhido está da curva de separação entre PDT e PDV, mais próximos também se tornam os valores das energias nas duas configurações. Ou seja, na região de transição as energias são muito próximas.

Verificamos ainda que os valores de energia diferem sempre a partir da terceira casa decimal, o correspondente a uma variação de 10^{-18} J, ou seja, as configurações de parede de domínio PDT e PDV nessas dimensões usadas são praticamente estados meta-estáveis de ener-

gia. Em alguns casos, um monodomínio com todos os momentos magnéticos paralelos ao eixo x leva a uma energia tão baixa quanto a configuração de uma parede de domínio central, se considerarmos apenas as três primeiras casas decimais da energia total.

Tabela 5.1: Menor energia dos 13 nanofios gerados nas configurações PDT e PDV.

N° (ver figura 5.4)	Dimensões $t \times w \times L$ (nm ³)	Energia Total (fJ)	
		PDT no centro	PDV no centro
1	$5 \times 95 \times 1995$	-2,18920	-2,18825
2	$5 \times 145 \times 1995$	-3,30978	-3,30893
3	$5 \times 195 \times 1825$	-4,05284	-4,05218
4	$5 \times 355 \times 1825$	-7,33386	-7,33397
5	$5 \times 95 \times 1005$	-1,10474	-1,10150
6	$10 \times 105 \times 1005$	-2,99682	-2,99552
7	$10 \times 155 \times 1825$	-8,97000	-8,97021
8	$10 \times 195 \times 1825$	-9,97737	-9,97780
9	$15 \times 55 \times 1995$	-5,10523	-5,10372
10	$15 \times 75 \times 1995$	-6,85803	-6,85693
11	$15 \times 135 \times 1005$	-6,09615	-6,09628
12	$20 \times 45 \times 1825$	-5,31159	-5,30992
13	$20 \times 100 \times 1005$	-6,24236	-6,24353

A largura escolhida para a parede de domínio nas configurações iniciais é sempre $\Delta = w$. Durante a evolução da configuração para o estado fundamental, a largura da PDT e PDV se ajusta para valores próximos aos confirmados pelas equações 3.2.2 ou 3.2.3, respectivamente.

5.2 VELOCIDADE DAS PAREDES DE DOMÍNIO SOB A AÇÃO DE UM CAMPO MAGNÉTICO APLICADO

5.2.1 Movimento da parede de domínio sem amortecimento

A partir do nanofio simulado e na configuração de estado fundamental dos momentos, realizamos um estudo da velocidade da PDT sob a ação de um campo magnético externo aplicado na direção do eixo do nanofio. Estudamos a dinâmica apenas para paredes transversais e utilizamos nanofios de Permalloy com comprimento fixo de 1255 nm, espessura de 5, 10 e 15 nm e largura entre 10 e 35 nm. Inicialmente, utilizamos o parâmetro de amortecimento $\alpha = 0$ para verificar a dinâmica própria da parede de domínio, sem dissipação de energia. O pulso de campo aplicado na direção $+x$ do nanofio é reescrito abaixo:

$$\mu_0 H_x(t) = \mu_0 H_{ap} [1 - \cos(2\pi f t)], \quad 0 < t < 1 \text{ ns}, \quad (5.2.1)$$

no qual fizemos $f = 1$ GHz. A curva que representa o pulso de campo é mostrada na figura 5.5.

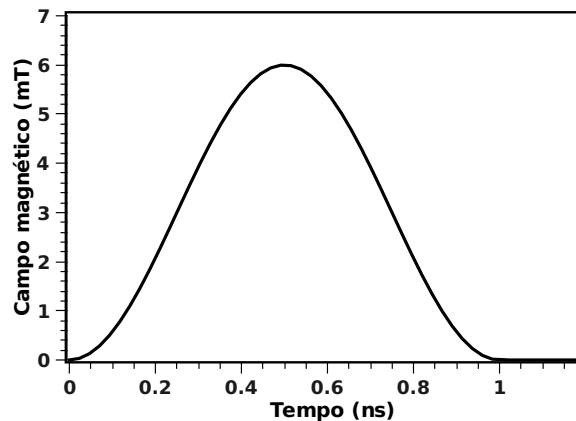


Figura 5.5: Exemplo do pulso de campo da equação 5.2.1 aplicado sobre os nanofios magnéticos. A curva é uma função cosseno de amplitude 6,0 mT.

Analisaremos os resultados obtidos para cada espessura de nanofio considerada.

ESPESSURA DE 5 nm

Para nanofios com espessura de 5 nm, o que corresponde a uma única camada de célula magnética, e larguras entre 10 e 35 nm, em geral, se a amplitude de campo for $\mu_0 H_{ap} > 2$ mT,

a PDT se move atingindo à borda do nanofio e invertendo o sentido do seu movimento, mas mantendo o módulo da velocidade. Além disso, o sentido de magnetização da PDT se inverte nesse processo, ou seja o “V” característico do formato da parede se transforma em “Λ” ao encontrar a borda e retornar e, tal inversão se repete a cada vez que a PDT é refletida pela borda. Este fato pode ser visto na sequência temporal apresentada na figura 5.6.

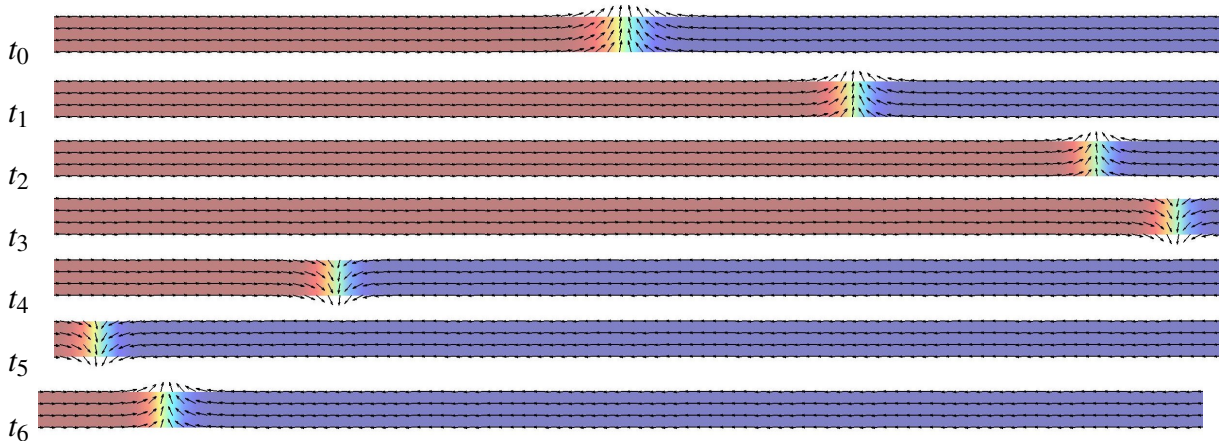


Figura 5.6: Sequência temporal do movimento de uma PDT em um nanofio com $\alpha = 0$ sob a aplicação de um pulso de 1 ns de duração e amplitude de 6 mT. Temos que $t_0 < t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < t_5 < t_6$.

A velocidade da PDT é calculada em seu trajeto pela equação 4.8.3 e para o nanofio representado na figura 5.6 o movimento é reproduzido pelo gráfico da figura 5.7. Cada variação brusca da velocidade no gráfico representa o momento em que a PDT atinge a borda do nanofio e inverte seu movimento, invertendo assim, o sinal da sua velocidade. Após a PDT atingir as bordas algumas vezes e retornar, a velocidade média começa a apresentar irregularidades como é percebido na figura 5.7, o que indica uma variação da velocidade em torno do valor médio em intervalos de tempo da ordem de 10^{-11} s. Uma das causas dessa variação são as propagações de ondas de spin, as quais interferem na magnetização influenciando o cálculo direto da velocidade.

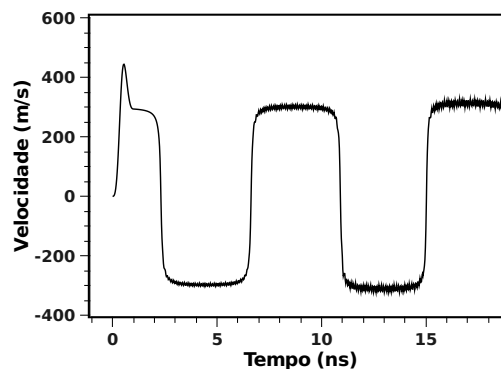


Figura 5.7: Velocidade da PDT em um nanofio de dimensões $(5 \times 15 \times 1255)$ nm com um campo de amplitude $\mu_0 H_{ap} = 6$ mT.

Para amplitudes de campo menores que 2 mT a PDT simplesmente se move em direção à borda do fio e se desfaz nela, transformando a configuração em um monodomínio com os momentos alinhados ao longo do comprimento do fio. O gráfico da figura 5.8 mostra a velocidade da PDT para um pulso de amplitude 2 mT e vemos que, mesmo não havendo dissipação, o pulso expulsa a PDT do nanofio. Quando a PDT atinge a borda, o gráfico mostra uma ligeira elevação no valor da velocidade, o que se deve a uma variação momentânea da magnetização no eixo x . Portanto, vamos considerar o movimento das PDT apenas em regiões distantes das extremidades para desconsiderar os efeitos de borda.

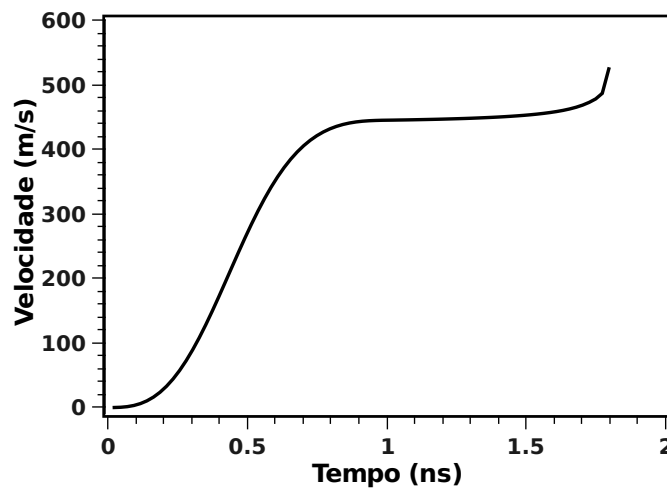


Figura 5.8: Velocidade da PDT em um nanofio de dimensões $(5 \times 20 \times 1255) \text{ nm}^3$ sob um campo externo de amplitude 2,0 mT.

Para pulsos de amplitude até $\mu_0 H_{ap} = 3,0 \text{ mT}$, em todas os nanofios o movimento da PDT é acelerado até cerca de 0,9 ns. A velocidade atingida nesse intervalo de tempo permanece constante como mostrado na figura 5.9 (a) e pode ser visto também no gráfico das figura 5.8. Para amplitudes de campo magnético entre 3,0 mT e 7,0 mT a velocidade máxima é alcançada em intervalos de tempo cada vez menores. Acima de 4,0 mT a velocidade máxima é atingida em forma de um pico, e cai em seguida para um valor aproximadamente constante (figura 5.9 (b)). Para todos os valores de largura do nanofio esse fato se repetiu. Em resumo, pulsos de campo menores demoram um tempo maior para acelerar a PDT até o valor máximo de velocidade, e esse valor alcançado permanece constante durante todo o movimento. Pulsos de campo maiores aceleram a PDT mais rapidamente, porém após a velocidade máxima ser atingida, há uma queda nesse valor, mantendo a velocidade constante inferior à máxima até a borda do nanofio.

O pico de velocidade máxima possui sempre o mesmo valor em cada nanofio, acima de uma amplitude de campo de 5,0 mT. Por exemplo, na figura 5.9 (b), independente se a amplitude do campo é de 5,0, 6,0 ou 7,0 mT a velocidade máxima sempre será 576 m/s. Este fato é verificado

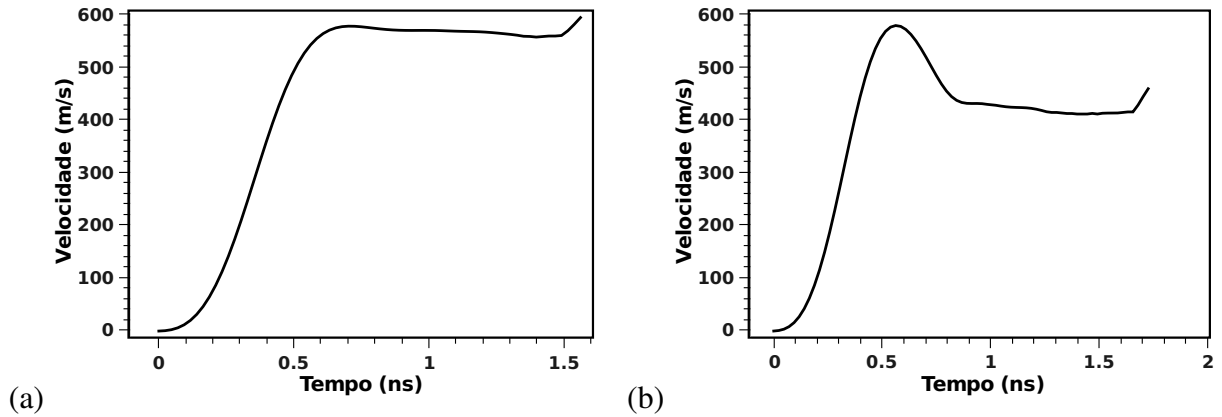


Figura 5.9: (a) Velocidade da PDT em um nanofio de dimensões $(5 \times 30 \times 1255) \text{ nm}^3$ sob um pulso de amplitude de 3,0 mT, onde a velocidade constante de 570 m/s é atingida em 0,91 ns; e (b) velocidade da PDT no mesmo nanofio com um pulso de amplitude de 4,0 mT, onde a velocidade atinge um máximo de 576 m/s em 0,56 ns e posteriormente cai para um valor médio de 423 m/s. Ao final dos dois gráficos, onde há a pequena elevação no valor da velocidade é a região em que a PDT se encontra próxima à borda do nanofio e desaparece.

no gráfico da figura 5.10, onde foi plotado o valor máximo da velocidade atingida pela PDT em função da amplitude do campo aplicado. Tal fato sugere que para esses fios, um valor entre 4,0 e 5,0 mT é o limite de amplitude do pulso do tipo 5.2.1 para que se alcance o valor máximo na velocidade da PDT. A seguinte relação pode representar o ajuste dessas curvas:

$$v = A \ln \left(\frac{\vec{B} + \vec{B}_c}{\vec{B}_c} \right) \quad (5.2.2)$$

onde v é a velocidade, A é uma constante que varia para cada nanofio, \vec{B} é a amplitude do pulso de campo aplicado e \vec{B}_c é o campo crítico, a menor amplitude de campo que maximiza a velocidade da PDT, que no gráfico da figura 5.10 está entre 4,0 e 5,0 mT. Se $\vec{B} = 0$, $v \sim \ln 1 = 0$. Para valores de amplitude de campo magnético $\vec{B} \gg \vec{B}_c$, temos a relação:

$$v = A \left(e^{-\vec{B}/\vec{B}_c} - 1 \right) \quad (5.2.3)$$

que se ajusta perfeitamente à curva e nos fornece a velocidade máxima atingida pela PDT em uma determinada amplitude de campo magnético.

Entretanto, o mais importante a se considerar no estudo da dinâmica das paredes de domínio não é o valor máximo instantâneo da velocidade, e sim, a velocidade aproximadamente constante com que a PDT se move sobre o nanofio, após o término do pulso de campo magnético. Nota-se que o valor dessa velocidade média aumenta com o aumento do pulso até a amplitude de 3,0 ou 4,0 mT. Acima desses valores, a velocidade média alcançada é cada vez menor, o que está de acordo com o proposto por Walker [25]. Ao se aproximar das maiores larguras

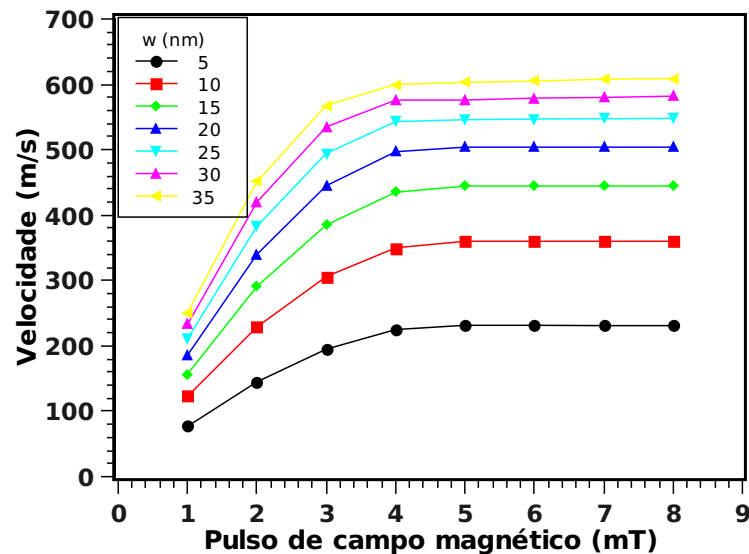


Figura 5.10: Velocidade máxima alcançada pela PDT em função da amplitude de campo magnético $\mu_0 H_{ap}$ para os nanofios de espessura $t = 5$ nm estudados.

do nanofio abordadas nesse estudo, as amplitudes de campo iguais a 7,0 e 8,0 mT provocam a nucleação da magnetização, e a sua precessão no eixo z , o que em alguns casos, não preserva o formato da PDT, levando a magnetização para o eixo z e, sendo assim, paramos de aumentar a amplitude do campo magnético. A figura 5.11 mostra um gráfico da velocidade média da PDT em função da amplitude de campo aplicado para nanofios de espessura 5 nm e diversas larguras confirmando as afirmações acima. Percebe-se também que ao considerarmos um determinado valor de campo magnético, a velocidade da PDT aumenta com o aumento da largura w do nanofio, e este resultado irá se repetir para as outras espessuras. O gráfico na figura 5.11 nos sugere que a maior velocidade alcançada pela PDT diminui com o aumento da largura, o que pode ser visto devido a diminuição da largura da curva com o aumento de w .

Porter e Donahue [23] já haviam calculado a velocidade da PDT em função da amplitude de pulso magnético aplicado e nossos resultados se assemelham aos valores obtidos por eles para as larguras em comum.

ESPESSURAS DE 10 nm e 15 nm

De forma a estudar o efeito da espessura t no movimento da parede transversal, repetimos as simulações acima para $\alpha = 0$ em nanofios com duas e três células magnéticas, de espessuras respectivamente, 10,0 e 15,0 nm.

Para $t = 10,0$ nm os resultados da velocidade média da parede de domínio para os diferentes pulsos são mostrados na figura 5.12, e para $t = 15,0$ nm, as velocidades médias são mostradas

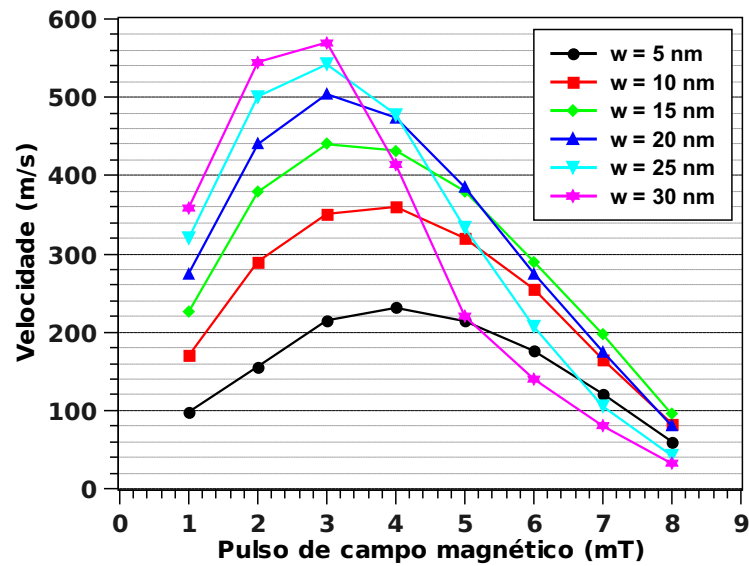


Figura 5.11: Velocidade média da PDT em um nanofio de $t = 5$ nm para diferentes larguras em função da amplitude de campo magnético $\mu_0 H_{ap}$.

na figura 5.13. Os gráficos mostram o valor da velocidade constante após o término do pulso. Para as espessuras $t = 10$ nm e $t = 15$ nm, as amplitudes máximas de campo que movimenta a parede sem alterar o seu formato são respectivamente, $\mu_0 H_{ap} \approx 8$ mT e $\mu_0 H_{ap} \approx 6$ mT, valores máximos colocados nos gráficos das figuras 5.12 e 5.13.

Comparando os resultados com a velocidade da PDT em nanofios de espessura 5 nm, na figura 5.11, o acréscimo de uma célula magnética na espessura diminui significativamente a velocidade da PDT. Quanto mais espesso é o nanofio, menor é a velocidade da PDT, tanto a velocidade máxima quanto a velocidade aproximadamente constante após o término do pulso. Ou, de outra forma, quanto maior for a razão $\frac{w}{t}$ maiores serão as velocidades alcançadas. Apenas como exemplo, a velocidade constante da PDT no nanofio de 20,0 nm de largura para um pulso de 4,0 mT de amplitude, nas espessuras de 5,0 nm, 10,0 nm e 15,0 nm são de, 490 m/s, 295 m/s e 175 m/s respectivamente, como comprovamos no gráfico da figura 5.14. Esse comportamento é o inverso para a relação entre a velocidade com a largura do nanofio, para os valores de w analisados e para campo de amplitude de até 6,0 mT.

Todas as particularidades dos gráficos de velocidade da PDT em função do tempo de cada pulso aplicado são idênticas em qualquer espessura analisada. A interpretação para este fato, é que ao adicionar novas “camadas” de momentos magnéticos na espessura do nanofio surge uma dificuldade de mobilidade da PDT devido à força de interação dipolar existente entre os momentos. Em uma única célula na espessura, como realizado por Porter e Donahue em [23], a PDT não está “presa” às demais células das novas “camadas”, o que resulta em uma magne-

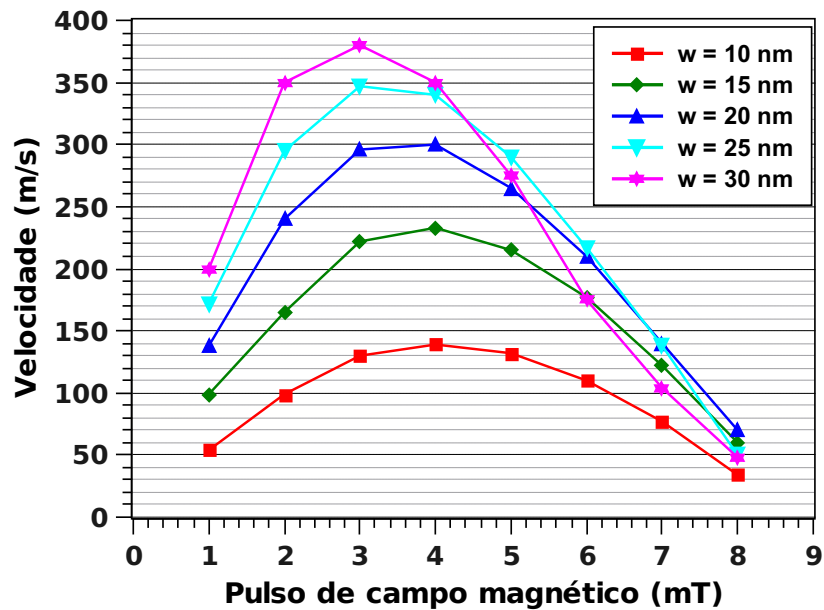


Figura 5.12: Velocidade da PDT em função da amplitude de campo magnético aplicado em nanofios com 10 nm de espessura. Excluiu-se $w = 5$ nm para que a relação $w \geq t$ seja respeitada.

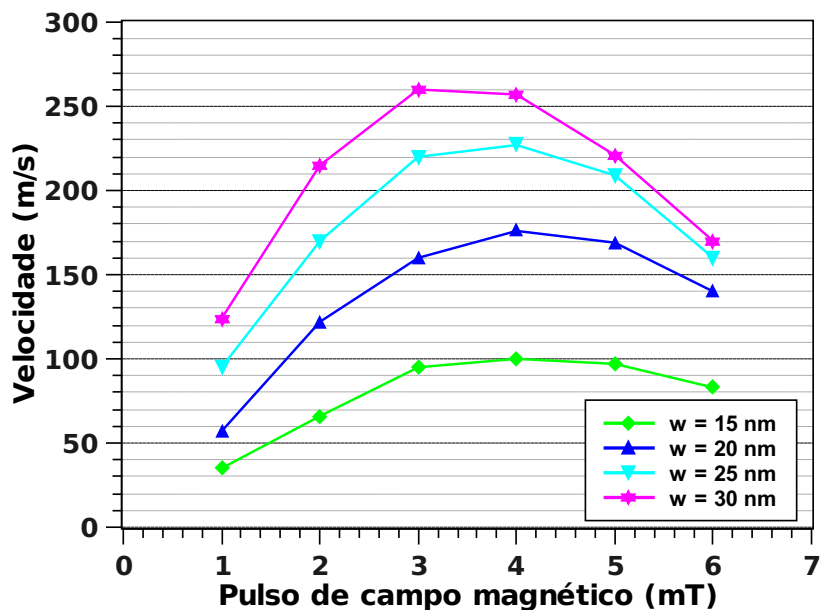


Figura 5.13: Velocidade da PDT em função da amplitude de campo magnético aplicado em nanofios com 15 nm de espessura. Excluíram-se $w = 5$ e $w = 10$ nm para que a relação $w \geq t$ seja respeitada.

tização livre para se mover de acordo com o campo aplicado. Quando a PDT se move, surge uma componente de magnetização perpendicular ao plano do nanofio, o que gera um campo desmagnetizante na amostra, e este, aumenta a energia dipolar e diminui a velocidade da PD.

Em todas as espessuras estudadas, a velocidade média é menor para amplitudes mais altas

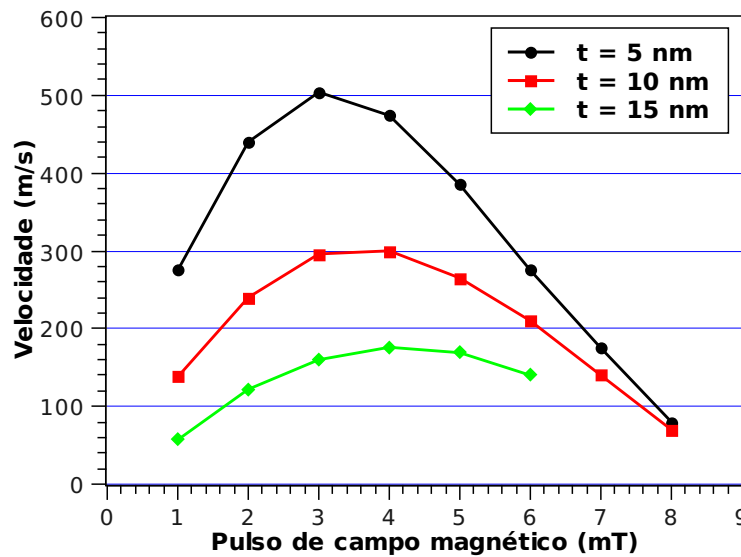


Figura 5.14: Velocidade da PDT em função da amplitude de campo magnético aplicado em um nanofio de largura $w = 20$ nm para as espessuras $t = 5, 10$ e 15 nm.

de campo em nanofios com as mesmas dimensões. Amplitudes de campo de 3,0 ou 4,0 mT proporcionam a maior velocidade média das PDTs. A velocidade média máxima chega a 230 m/s no nanofio mais espesso e a 576 m/s no menos espesso, ambas as velocidades para o nanofio de largura $w = 30$ nm.

5.2.2 Movimento da parede de domínio com amortecimento

Repetimos as simulações nos nanofios de espessura $t = 5$ nm e larguras novamente variando entre 10 e 30 nm para $\alpha = 0,01$, de forma a analisar a sua interferência na propagação da PDT e tornar o sistema mais próximo do real. O amortecimento retarda o movimento da PDT, a qual acelera até 0,8 ns para pulsos de $\mu_0 H_{ap}$ até 4 mT, e não 0,9 ns como anteriormente em todas as larguras de nanofio. Acima dessa amplitude de campo, o tempo em que a velocidade máxima é atingida também torna-se cada vez menor. Para $\alpha = 0$ vimos que a velocidade da PDT torna-se um valor aproximadamente constante após o término do pulso de campo. Para $\alpha = 0,01$, esse comportamento só é válido quando a PDT se move sob a ação de pulsos de amplitude acima de 4,0 mT, onde a velocidade aproximadamente constante após o pulso permanece próxima a velocidade máxima, como podemos verificar no gráfico da figura 5.15 (a). Para pulsos de amplitude até 3,0 mT, a PDT após atingir sua velocidade máxima, apresenta uma queda brusca na velocidade, a qual não é constante em nenhum momento. A velocidade da PDT diminui até

o momento em que se aproxima da borda do nanofio, onde ela volta a aumentar e se desfaz na borda, como podemos verificar na figura 5.15 (b). Relembramos que um efeito de borda, devido à interação dipolar, faz com que a PDT apresente um aumento na sua velocidade ao se aproximar da borda e se desfazer nela.

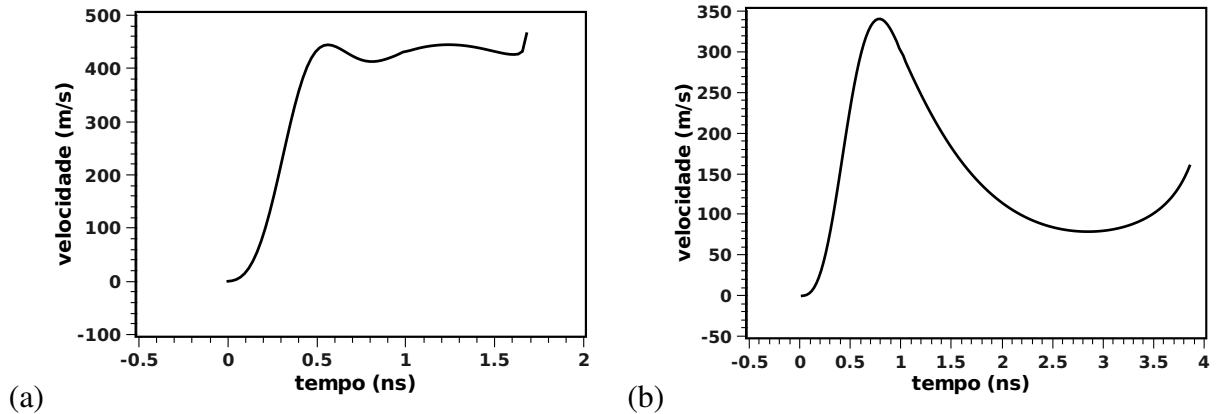


Figura 5.15: (a) Velocidade da PDT em um nanofio de dimensões $(5 \times 15 \times 1255)$ nm sob um pulso de amplitude de 6,0 mT e, (b) velocidade da PDT em um nanofio de dimensões $(5 \times 20 \times 1255)$ nm sob um pulso de amplitude de 2,0 mT.

Apenas as amplitudes de campo de 5,0 e 6,0 mT fazem com que a velocidade da PDT sofra apenas uma pequena queda após atingir seu valor máximo, mantendo seu valor sem grandes variações até atingir a borda. Isto ocorre devido a altas amplitudes provocarem uma velocidade mais alta da PDT, o que implica em percorrer distâncias no nanofio em menores intervalos de tempo. Ou seja, ainda com o pulso de campo atuando, a PDT percorre uma distância correspondente a aproximadamente $1/4$ do comprimento do nanofio, o que faz com que a proximidade da borda comece a atuar no sentido de não deixar com que a velocidade da PDT diminua. Com a introdução do parâmetro de amortecimento $\alpha = 0,01$, a inversão da PDT ao atingir a borda e seu movimento no sentido contrário deixam de ocorrer. Ou seja, a PDT inicia seu movimento devido a um campo magnético no sentido $+x$, e devido ao fator de amortecimento, ela se desfaz ao atingir a borda direita do fio transformando o sistema em um monodomínio. A figura 5.16 mostra uma sequência de intervalos de tempo em que esse fato ocorre.

Para nanofios mais largos ($w > 20,0$ nm), quando a amplitude do campo externo é alta, 7,0 ou 8,0 mT, o comportamento é o mesmo de quando $\alpha = 0$, no qual a velocidade sofre pequenas oscilações entre aumentar e diminuir e a PDT pode se deformar. Com relação a dependência da velocidade com a largura do nanofio, maiores amplitudes produzem velocidades maiores, porém um gráfico de velocidade em função do campo como em 5.11 não é possível ser visualizado, uma vez que as velocidades não se tornam constantes para $\alpha = 0,01$.

De forma geral, podemos dizer que o amortecimento diminui a velocidade da PDT e ela

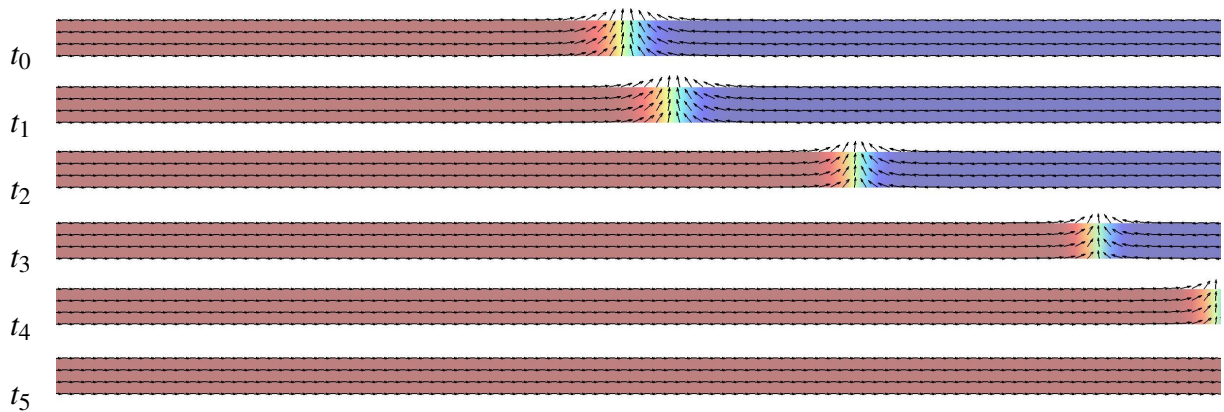


Figura 5.16: Sequência temporal do movimento de uma PDT em um nanofio com $\alpha = 0,01$ sob a aplicação de um pulso de 1 ns de duração. Temos que $t_0 < t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < t_5$.

não é capaz de retornar sobre o nanofio ao atingir a borda. O parâmetro de amortecimento na simulação computacional representa todos os fenômenos físicos responsáveis pela dissipação do movimento da PD. A velocidade máxima é atingida cerca de 0,1 ns antes dos instantes encontrados para $\alpha = 0$. O amortecimento para pulsos de 1,0 mT a 4,0 mT, faz a PDT quase parar e permanecer com uma velocidade muito inferior a máxima, não constante e aceleração próxima de zero. Em todos os nanofios, o pulso de 5,0 mT e 6,0 mT são apropriados para manter a velocidade próxima da máxima para esse comprimento de nanofio, ou seja, a diminuição brusca na velocidade da PDT não se repete (figura 5.15).

Amplitudes de campo superiores a essas provocam uma mudança na magnetização da PDT ao longo do seu movimento. Para valores de larguras acima de 20 nm é possível perceber os detalhes da PDT durante seu movimento, e percebemos que amplitudes de 7,0 mT e 8,0 mT provocam modificações na estrutura da PDT como as mencionadas na seção 3.3.1.1. Este fato nos motivou a verificar as características do movimento da PDT sob campos magnéticos maiores, e investigamos o assunto para campos magnéticos constantes muito acima do campo de Walker a seguir. Todos os estudos apresentados a partir dessa seção utilizam o parâmetro de amortecimento $\alpha = 0,01$.

5.2.3 Aplicação de um Campo Magnético Constante muito Acima do Campo de Walker

Se ao invés de pulsos de uma função cosseno de campo magnético aplicamos campos constantes suficientemente grandes na direção do eixo x do nanofio, podemos controlar o movimento

da PDT nos dois sentidos do fio [21, 23, 80]. A figura 5.17 mostra como um campo constante de 25 mT move a PDT.

A magnetização da PDT sofre o torque provocado pelo campo magnético e inicia seu movimento no mesmo sentido deste. Em seguida, um antivórtice é criado na parte inferior da parede e sobe através dela, encontrando com um vórtice de polaridade oposta e a magnetização é invertida. Nesse intervalo de tempo, a PDT sofre uma desaceleração inverte o sentido de seu movimento variando sua magnetização de $+y$ para $-y$ passando pelo eixo z . Ou seja, o formato “V” passa a ser “Λ”. A PDT faz um curto percurso no sentido contrário ao campo aplicado e esse processo se repete no nanofio. A PDT oscila se movendo ora no sentido do eixo x , ora $-x$, passando totalmente pelo eixo z no processo de mudança de sentido. Todo esse processo foi descrito pela figura 3.18 extraída da referência [50] e é reproduzido em detalhes em nossas simulações como mostra a figura 5.17. A figura 5.18 mostra o gráfico da velocidade da PDT ao passar pelos processos descritos acima. Vemos que, enquanto a PDT caminha sobre o eixo x sua velocidade oscila entre um movimento progressivo ($v = 600$ m/s) e retrógrado ($v = -600$ m/s). O gráfico da posição da PDT em função do tempo para esse movimento está representado na mesma figura 5.18 em (b). Podemos verificar que, enquanto a PDT inverte o sentido do seu movimento, o deslocamento resultante acontece no sentido do campo aplicado $+x$ até que a PDT se desfaça na borda esquerda do nanofio.

Esse movimento de “vai e vem” da PDT pelo fio também é obtido com um campo senoidal no mesmo formato do pulso em 5.2.1 variando-se a frequência f , como mostra Piao H-G *et al.* [21]. Os autores utilizam esse efeito como um diodo magnético atuando no controle do sentido da propagação da PDT.

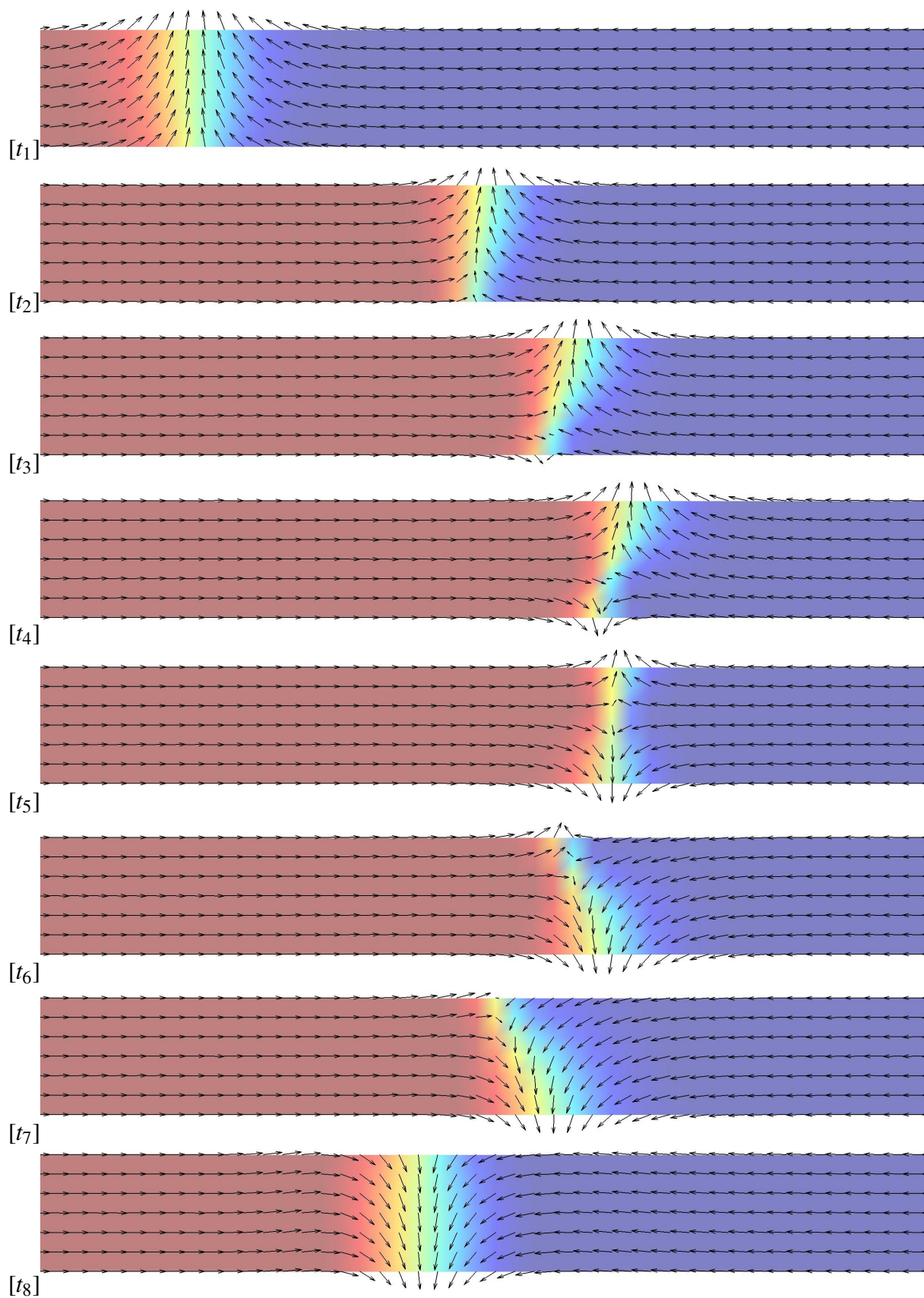


Figura 5.17: Sequência de movimento da PDT em um nanofio sob a aplicação de um campo magnético constante de 25 mT.

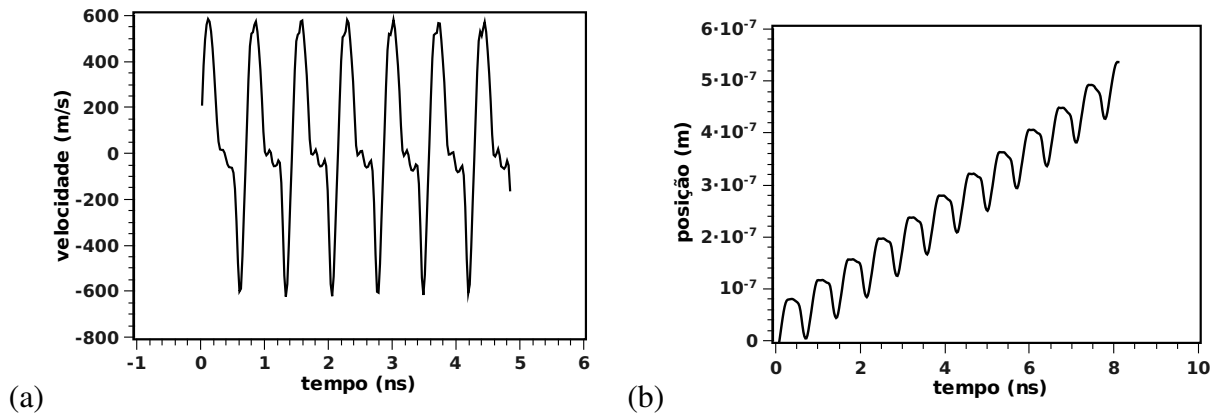


Figura 5.18: (a) Velocidade da PDT em um nanofio de $(5 \times 35 \times 1255)$ nm sob a ação de um campo externo constante de 25,0 mT durante todo o tempo; (b) posição da PDT no mesmo nanofio. A posição 0 representa o centro do nanofio onde a PDT se encontra antes da aplicação do campo externo.

5.3 ESTUDO DA INTERAÇÃO ENTRE IMPUREZAS MAGNÉTICAS E A PDT

A introdução de um defeito, uma mudança na geometria do fio [31, 30] ou a inserção de um núcleo de material diferente [20] altera a dinâmica das paredes de domínios nos nanofios. A inclusão de uma impureza magnética também é responsável pela alteração no movimento das PDTs ¹. A partir da mudança do valor de referência da constante de troca J para J' simulamos em um sítio escolhido do nanofio, uma impureza magnética como descrito na seção 4.8. Experimentalmente, uma analogia a essa técnica pode ser a implantação de íons de cromo para gerar regiões de aprisionamento da parede de domínio, realizada por Vogel *et al.* [28].

Para analisar o comportamento da PDT em nanofios de Permalloy com impurezas magnéticas, escolhemos fixar a espessura em $t = 10$ nm, para aproximar de uma espessura real usualmente obtida em experimentos e também por questões de tempo computacional. Assim como em nanodiscos magnéticos [33], a escolha da impureza magnética se resume aos tipos $0,1 < J'/J < 1$ e $J'/J > 1$, inseridas inicialmente, a uma distância de poucos parâmetros de rede da extensão da PDT. Essa distância é escolhida de forma que os efeitos da mudança na interação de troca entre os sítios vizinhos ao sítio da impureza possam ser percebidos. A interação entre a impureza e a PDT ocorre de duas formas distintas. Para $0,1 < J'/J < 1$ a PDT é atraída pela impureza, ficando com sua extensão aprisionada a ela, portanto denominamos esse tipo de impureza como **ATRATIVA (sítio de aprisionamento da PDT)** e esse efeito pode ser

¹Os resultados apresentados nessa seção foram publicados no *Journal of Applied Physics* e se encontram na referência [81] dessa tese e em anexo 1.

visto na sequência da figura 5.19.

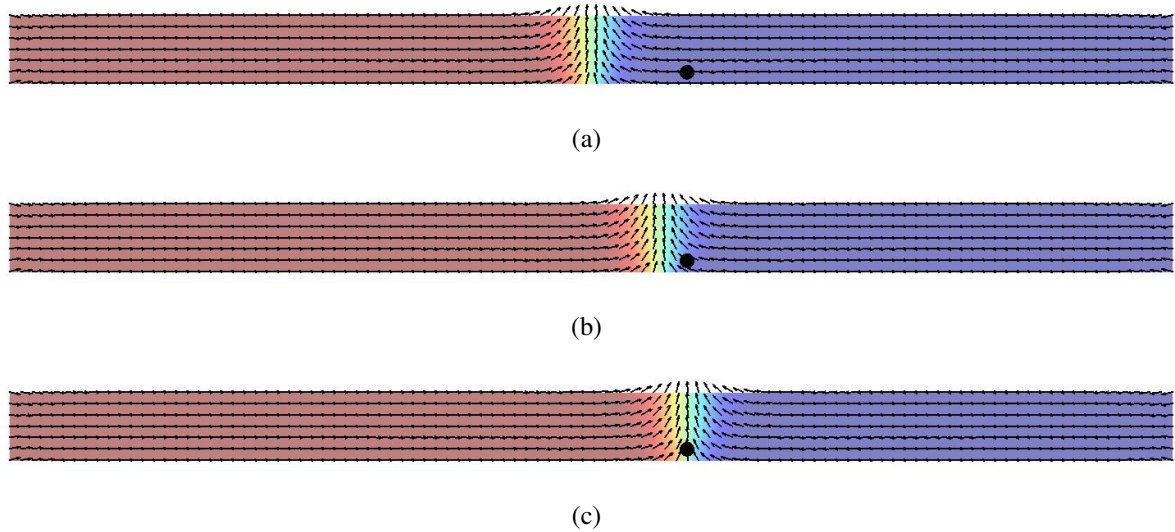


Figura 5.19: Dinâmica da PDT próxima a uma impureza atrativa ($J' < J$) em um nanofio de $w = 25$ nm. O círculo preto representa a impureza magnética. Em (a) a configuração inicial do nanofio com a PDT no centro e uma impureza localizada próxima à PDT; em (b) a configuração do sistema após 7,0 ns, e em (c) a configuração após 14,0 ns até o limite de tempo da simulação, mostrando o aprisionamento da PDT na impureza magnética.

A outra interação observada é o inverso da mostrada na figura 5.19. Se fizermos $J'/J > 1$, a PDT é repelida pela impureza, se movendo aceleradamente na direção oposta a ela e depois de algum tempo reduzindo sua velocidade para um valor próximo de zero. Devido a essa reação, tal impureza foi denominada como **impureza REPULSIVA (sítio de espalhamento da PDT)**. A dinâmica da PDT próxima a uma impureza repulsiva é mostrada na sequência da figura 5.20.

Verificamos que surge, para a PDT, um potencial atrativo ou repulsivo provocado pela introdução de uma impureza pontual magnética. Como a PDT é assimétrica com relação ao eixo y , uma vez que adquire o formato “V” ou “Λ” característico, analisamos o potencial de aprisionamento e espalhamento da PDT posicionando a impureza magnética em diferentes posições ao longo da extensão da largura do nanofio. Uma vez escolhida a posição da impureza no eixo y variamos o seu posicionamento sobre o eixo x afastando-a da PDT gradativamente. De acordo com a figura 5.21, consideramos a origem dos eixos do nanofio no centro da PDT. Consideramos $x = 0$ e $y = 0$ o centro do nanofio e x/a ou y/a representam a distância entre a impureza e o centro da PDT ao longo dos eixos x e y , respectivamente. Lembrando que o parâmetro de rede renormalizado usado em nossas simulações é igual a $a = 5$ nm e o nanofio mostrado possui $w = 45$ nm, obtemos para esse caso uma variação de $-4,5$ a $+4,5$ no eixo y/a . Esta mesma divisão dos eixos é feita para as demais larguras de nanofios estudadas. O polo norte magnético representa a região onde os momentos magnéticos apontam de dentro para fora do nanofio, ou seja, a região da PDT que possui cargas magnéticas positivas, enquanto o polo sul magnético

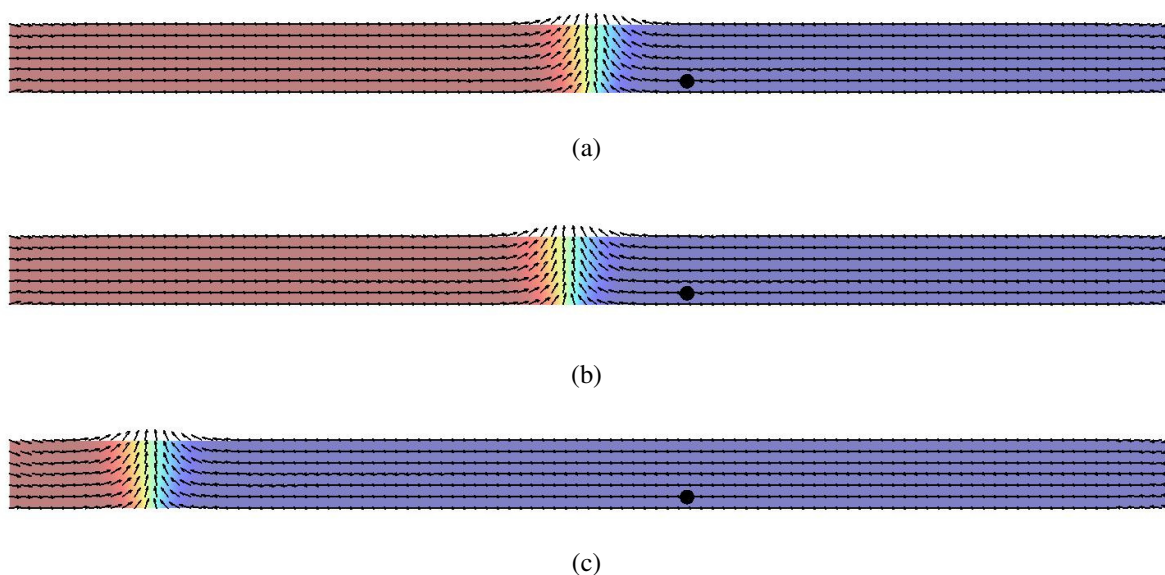


Figura 5.20: Dinâmica da PDT próxima a uma impureza magnética pontual repulsiva ($J' > J$) representada pelo círculo preto. Em (a) a configuração inicial do sistema com a PDT no centro do nanofio e uma impureza magnética próxima a ela; em (b) a configuração após 5,0 ns e, em (c) a configuração após 26,0 ns mostrando o espalhamento da PDT pela impureza magnética.

representa a região na qual os momentos apontam para dentro do nanofio, ou a região da PDT que possui cargas magnéticas negativas.

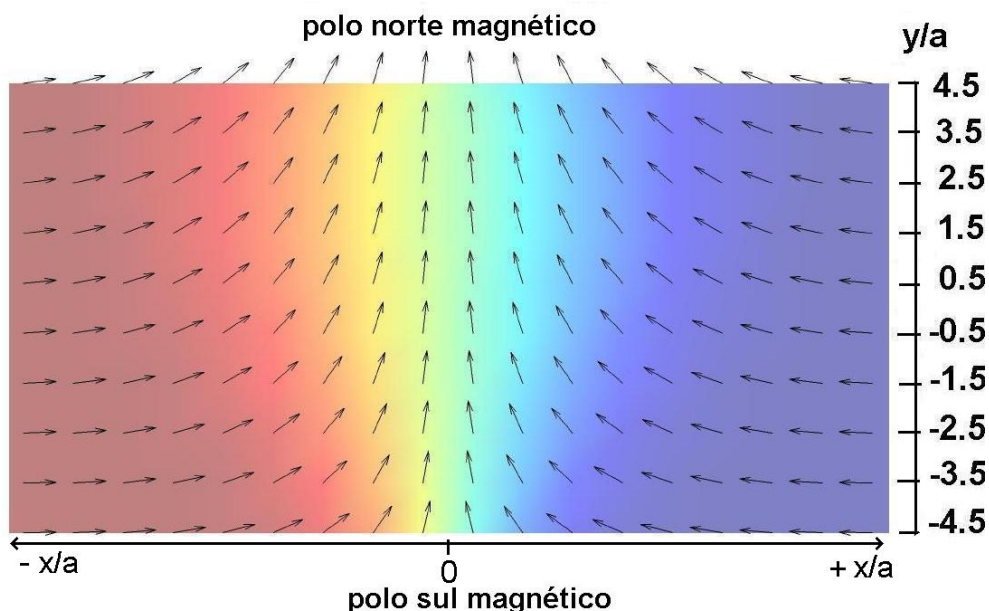


Figura 5.21: Os eixos x e y se iniciam no centro da PDT. Em um nanofio qualquer o eixo y/a varia de $-w/(2a)$ a $+w/(2a)$ e o eixo x/a varia de $-L/(2a)$ a $+L/(2a)$. No caso particular da figura, cuja $w = 45$ nm, temos $-4,5 < y/a < +4,5$.

Utilizamos a figura 5.21 para indicar as posições em que incluímos uma impureza magnética pontual a fim de calcular a energia de interação entre a impureza e a PDT nas diferentes

posições $(\frac{x}{a}, \frac{y}{a})$. Realizamos esse estudo tanto para impurezas atrativas quanto para impurezas repulsivas. A energia de interação entre a PDT e a impureza é obtida calculando-se a soma da energia de troca e energia dipolar do nanofio com a impureza na posição escolhida e, subtraindo o resultado da energia do nanofio no estado fundamental na ausência da impureza magnética. O potencial de interação que aparece para cada tipo de impureza será analisado nas seções que se seguem.

5.3.1 Potencial de interação de uma impureza magnética atrativa

Escolhemos uma impureza atrativa do tipo $J'/J = 0,1$ e a inserimos na posição $y/a = -4,5$ de acordo com a figura 5.21 em um nanofio de $w = 9a$, ou seja na borda do nanofio, especificamente na região de polo sul da PDT. Variando-se a posição da impureza magnética em x/a calculamos a energia de interação para cada posição e mostramos os resultados no gráfico da figura 5.22.

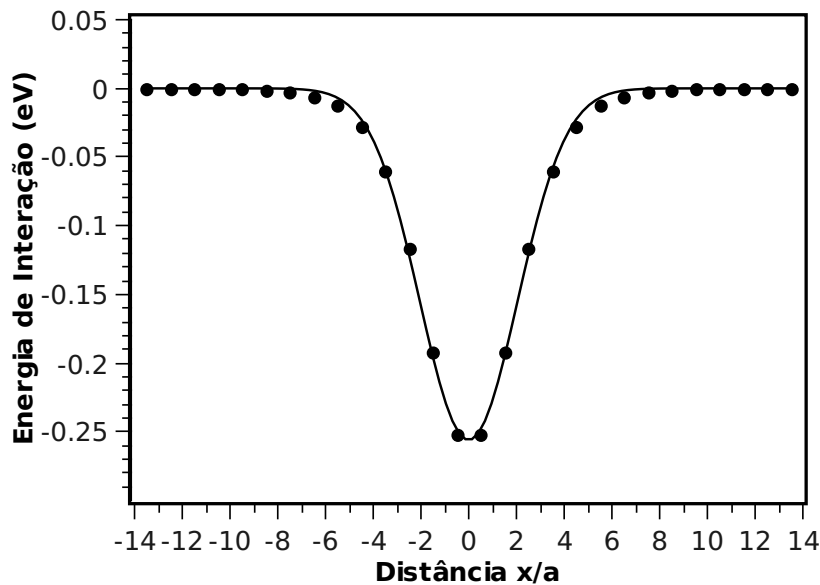


Figura 5.22: Potencial atrativo para a impureza $J'/J = 0,1$ na posição $y/a = -4,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$.

Cada ponto no gráfico acima representa a energia de interação entre a PDT e impureza quando a última se encontra na posição $(y/a = -4,5)$ e x/a mostrado no gráfico. Em cada par de coordenada $(\frac{x}{a}, \frac{y}{a})$ uma nova energia de interação em elétron-volts é encontrada. A curva que une os pontos foi ajustada através de uma função gaussiana do tipo $E = E_0 \cdot e^{-0,5(\frac{x}{s})^2}$, em que E é a energia de interação, x é a distância x/a da impureza ao centro da PDT, $E_0 = -0,266$ é a

profundidade da gaussiana e a largura à meia altura da gaussiana é $s = 2,04$. A impureza atrativa provoca um poço de potencial, no qual durante o aprisionamento, o centro da PDT se encontra exatamente sobre a impureza magnética. À medida que a impureza se distancia do centro da PDT no eixo x , a energia de interação diminui tendendo a zero para $x \rightarrow L$. Quanto mais distante da PDT sobre o eixo x a impureza é inserida, mais demorado acontece o movimento da PDT em direção à impureza.

Para comparar o perfil do poço de potencial em relação a outras posições da impureza sobre o eixo y/a fizemos mais dois gráficos da energia de interação. Com relação às posições marcadas na figura 5.21, primeiro escolhemos fixar a impureza sobre $y/a = -0,5$ variando sua posição em relação a x/a como fizemos anteriormente. O gráfico para essa configuração de posicionamentos da impureza pode ser observado na figura 5.23.

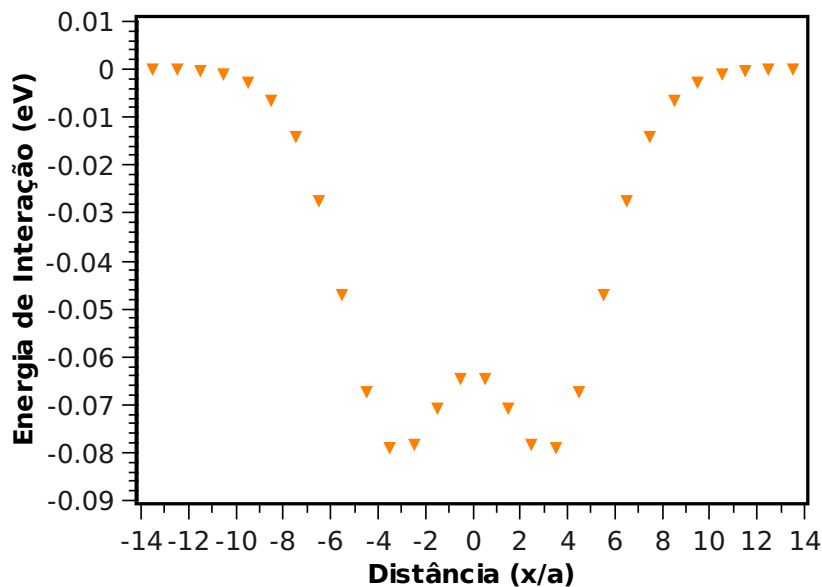


Figura 5.23: Potencial atrativo para a impureza $J'/J = 0,1$ na posição $y/a = -0,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$.

A impureza atrativa $J'/J = 0,1$ quando se encontra em $y/a = -0,5$ apresenta um poço de potencial com dois pontos de mínimo, o que significa que a impureza aprisiona a PDT mantendo seu centro geométrico no poço de potencial, ou seja, deslocado $3,5a$ da impureza magnética como mostra o gráfico em 5.23. Podemos verificar que a impureza é sempre aprisionada em um local que representa a borda da PDT. A configuração de equilíbrio equivalente a este estado é mostrada na figura 5.24, onde a PDT durante o movimento de atração oscila ao redor da impureza atingindo o equilíbrio estático na posição mostrada.

Na prática o mínimo da direita representa a posição de equilíbrio da PDT durante o aprisionamento em uma impureza colocada a sua direita. O mínimo da esquerda representa o local

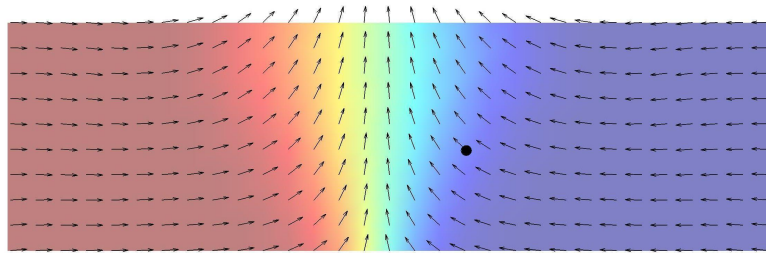


Figura 5.24: Posição de equilíbrio da PDT no aprisionamento por uma impureza magnética atrativa em $y/a = -0,5$.

de aprisionamento da PDT se a impureza for inserida a sua esquerda. Comparando as figuras 5.22 e 5.23 ambas revelam que o afastamento da impureza em relação à PDT sobre o eixo x/a provoca uma redução na energia de interação tendendo a zero com a impureza cada vez mais afastada de $x = 0$. No entanto, o posicionamento da impureza em $y/a = -0,5$ revela um alcance maior da interação sobre o eixo x , o que é percebido pelo aumento da largura da curva em x/a no gráfico da energia de interação em função de x/a . Este fato será discutido mais adiante. Percebemos ainda que o módulo da energia de interação para a impureza em $y/a = -0,5$ diminui com relação ao mesmo ponto em $y/a = -4,5$. Isto é facilmente visualizado pelo módulo da amplitude máxima nos gráficos 5.22 e 5.23, que é de 0,256 eV para $y/a = -4,5$, diminuindo para 0,078 eV para $y/a = -0,05$.

Com o intuito de aprofundar a análise desses resultados, escolhemos mais uma posição para a impureza magnética em $y/a = +4,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$, ou seja, inserimos a impureza magnética o mais próximo possível do polo norte da PDT. O comportamento para essa nova posição em y/a é mostrada no gráfico da figura 5.25. O alcance da interação em x/a é ainda maior do que o apresentado no gráfico em 5.23 e o módulo da energia de interação é menor em todas as posições, sendo sua amplitude máxima $|E| = 0,057$ eV. A posição de equilíbrio da PDT no aprisionamento é $x/a = \pm 0,5$, indicada na figura 5.23, o que significa que esses dois pontos representam pontos de mínimo no gráfico. Então em $x/a = 0$ haverá no gráfico de energia de interação uma pequena elevação com relação a $x/a = \pm 0,5$, revelando esses últimos dois pontos como reais posições de mínima energia entre a PDT e a impureza magnética.

Inserimos as curvas de potencial de interação encontradas nos gráficos das figuras 5.22, 5.23 e 5.25 no gráfico da figura 5.26, que representa o poço de atração para todas as posições da impureza magnética ao longo de y/a no nanofio de 45 nm de largura. Cada uma das dez curvas no gráfico representa o potencial de interação da impureza com a PDT em função de x/a para uma posição definida y/a . Perceba que as três posições analisadas separadamente permanecem com os mesmos símbolos no gráfico 5.26.

Somando a comparação feita para os gráficos das figuras 5.22, 5.23 e 5.25 a uma análise

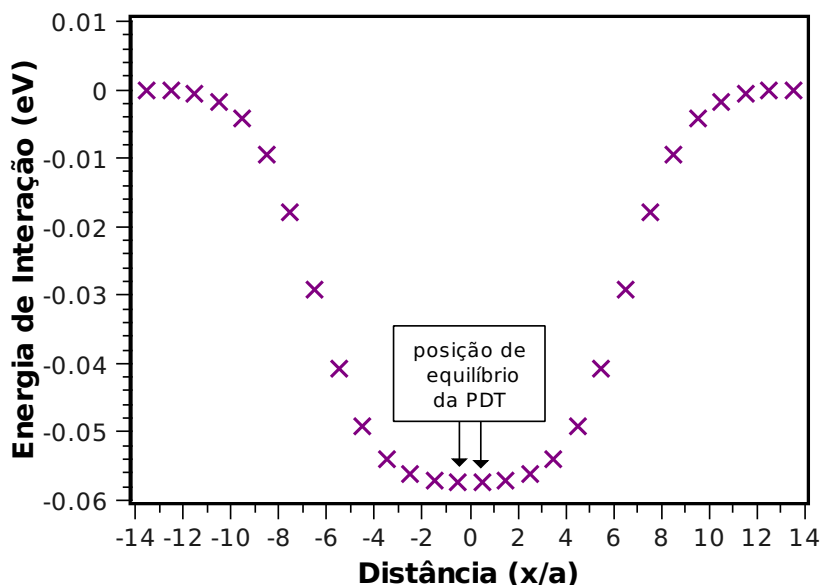


Figura 5.25: Potencial atrativo para a impureza $J'/J = 0.1$ na posição $y/a = +4,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$.

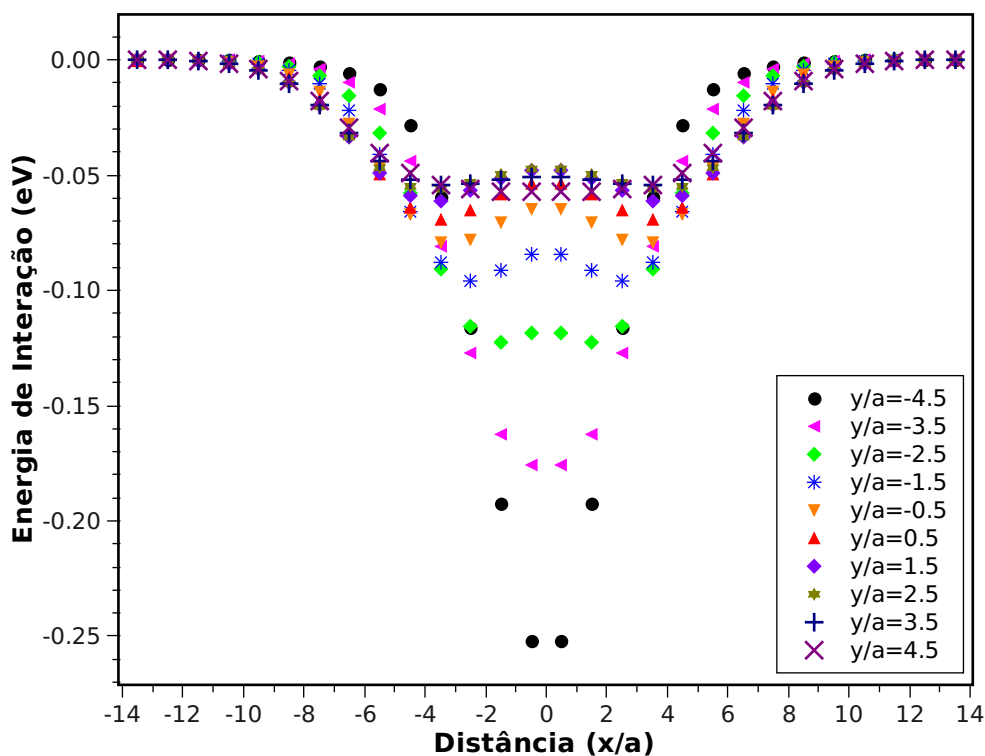


Figura 5.26: Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética $J'/J = 0,1$ em função da posição x/a da impureza para todas as ordenadas y/a possíveis a uma impureza pontual em um nanofio de largura 45 nm.

do gráfico da energia de interação da figura 5.26, podemos tirar algumas conclusões. Quanto mais próximo do polo sul da PDT a impureza magnética for inserida, maior é o módulo da energia de interação. Do ponto de vista experimental, isso significa que a introdução de uma

impureza magnética, próxima ao polo sul da PDT, é mais favorável ao seu aprisionamento. Este fato também acontece em nanofios magnéticos em forma de anel com defeitos topológicos que aprisionam uma PDV [30].

Quando a impureza é inserida nas proximidades do polo norte magnético da PDT com relação ao eixo y/a , as curvas para a energia de interação passam a assumir valores mais próximos. Isto se deve ao fato de que, nessa região, a variação da direção dos momentos magnéticos vizinhos é mais discreta, uma vez que a largura da parede é maior do que na região de polo sul magnético.

Outro fato notável é que o alcance da energia de interação sobre o eixo x/a é tanto maior quanto mais próxima a impureza se encontrar do polo norte da PDT. Podemos entender esse resultado da seguinte maneira: a forma em “V” que a PDT apresenta no nanofio, faz com que a região de polo norte magnético possua um número maior de momentos magnéticos do que a região de polo sul magnético da PDT. Logo, a extensão da parede sobre o eixo x/a é maior no polo norte, o que faz com que a impureza magnética nessa região seja “percebida” pela PDT a uma distância um pouco maior nesse eixo do que na região de polo sul. Isto caracteriza o maior alcance observado.

O perfil gaussiano apresentado na figura 5.22 é válido para $y/a = -4,5$ e $-3,5$, o restante das posições apresentam dois mínimos de energia de interação, que representam o local de aprisionamento da PDT para impurezas inseridas à direita ou à esquerda do nanofio. Todos os resultados explorados aqui se referem a um nanofio magnético de largura 45 nm. Embora o perfil do gráfico se mantenha, uma comparação detalhada dos resultados para outros valores de w será realizada posteriormente na seção 5.3.3.

Todas as conclusões acima se estendem a outros nanofios, cuja largura seja diferente de 45 nm. Apenas para comparação, a figura 5.27 revela o gráfico da energia de interação entre a PDT e uma impureza pontual atrativa para um nanofio de $w = 25$ nm em todas as posições y/a possíveis a esse nanofio.

O perfil da energia de interação mostrado no gráfico da figura 5.26 é válido para qualquer impureza atrativa de valor $0,1 < J'/J < 1$. Uma comparação para diferentes valores J'/J será feita na seção 5.3.4.

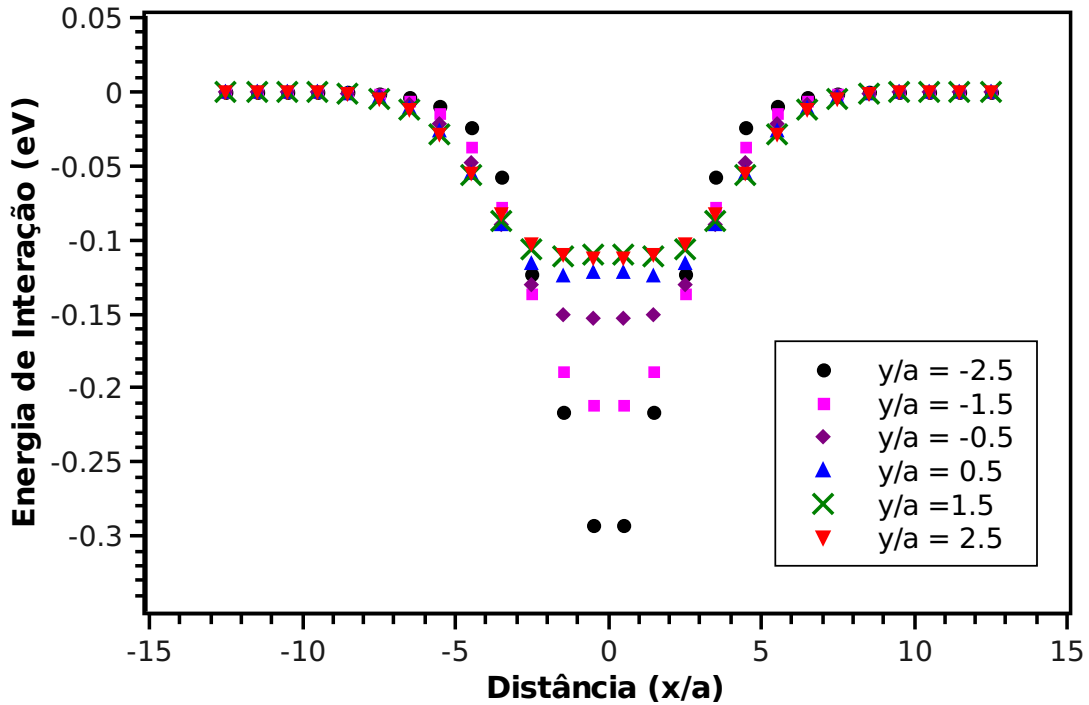


Figura 5.27: Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética $J'/J = 0,1$ em função da posição x/a da impureza para todas as ordenadas y/a possíveis a uma impureza pontual em um nanofio de largura 25 nm.

5.3.2 Potencial de interação de uma impureza magnética repulsiva

Para analisar os detalhes da repulsão da PDT provocada pela impureza magnética, introduzimos inicialmente uma impureza pontual do tipo $J'/J = 2,5$ nas proximidades da PDT variando seu posicionamento ao longo do eixo x/a para uma posição y/a definida, exatamente como fizemos para a impureza atrativa. No mesmo nanofio de largura $w = 45$ nm inserimos a impureza repulsiva na posição $y/a = -4,5$, região de polo sul magnético da PDT, e variamos sua posição sobre o eixo x/a . O gráfico da energia de interação pode ser visto na figura 5.28.

Enquanto a impureza atrativa gera um poço de potencial, a impureza repulsiva gera uma barreira de potencial como mostra o gráfico. A curva que liga os pontos também possui o perfil gaussiano do tipo $E = E_0 \cdot e^{-0,5(\frac{x}{s})^2}$, em que, para essa impureza, $E_0 = 0,434$ eV é a amplitude da gaussiana, e $s = 4,04$ é a sua largura à meia altura. Para a impureza repulsiva, quanto mais próximo do centro da PDT for colocada a impureza em relação ao eixo x/a , ou seja, quanto mais próximo de $x = 0$ ela for inserida, mais rápido acontece o espalhamento da PDT. Este resultado pode ser visto, pela diminuição da energia de interação à medida que a impureza se distancia do centro da PDT sobre o eixo x . A energia de interação tende à zero para grandes distâncias e possui o mesmo alcance da impureza atrativa colocada na mesma posição, e, como

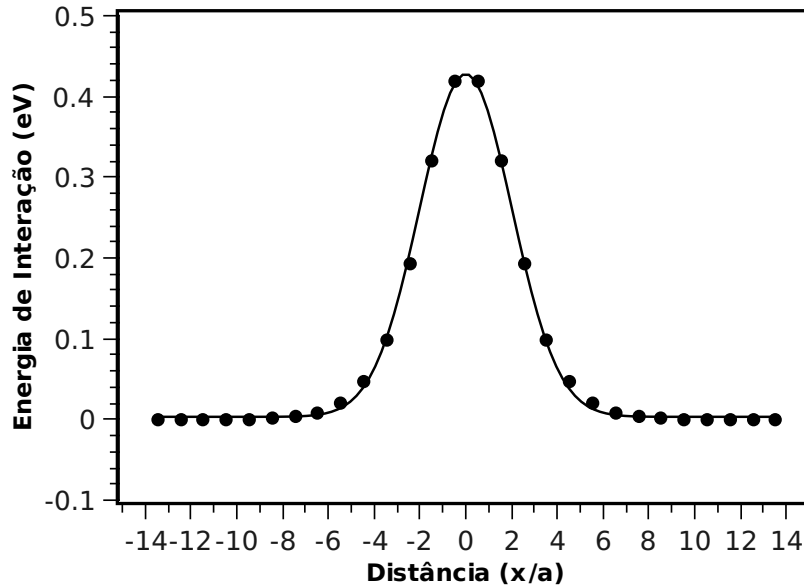


Figura 5.28: Potencial repulsivo para a impureza $J'/J = 2,5$ na posição $y/a = -4,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$.

já foi dito, varia para diferentes posições.

Seguindo o mesmo estudo realizado para uma impureza atrativa, fixamos a impureza $J'/J = 2,5$ na posição $y/a = -0,5$ variando os valores de x/a e a energia de interação obtida é mostrada no gráfico da figura 5.29. Diferentemente do perfil gaussiano encontrado quando a impureza se encontra em $y/a = -4,5$, obtemos uma barreira de potencial com dois pontos de máximo em $\frac{x}{a} = -3,5$ e $\frac{x}{a} = +3,5$. Ou seja, as posições em que a impureza repulsiva maximiza a interação com a PDT são $x/a = \pm 3,5$. O potencial de repulsão expulsa a PDT para longe da impureza em direção à borda do nanofio.

Assim como a impureza atrativa na mesma posição (gráfico 5.23) o alcance da interação em x/a é maior do que na região de polo sul da PDT, e ainda, a amplitude máxima da interação cai de 0,434 eV em $y/a = -4,5$ para 0,132 eV em $y/a = -0,5$.

Finalmente, inserindo a impureza magnética em $y/a = 4,5$, ou seja, o mais próximo da região de polo norte da PDT, e variando sua posição x/a obtemos o gráfico da energia de interação entre a impureza e a PDT na figura 5.30. Análogo ao gráfico da figura 5.25, percebemos que em comparação com as outras duas posições escolhidas acima, quanto mais próximo ao polo norte da PDT a impureza se encontra, em relação ao eixo y/a , menor a energia de interação em cada posição e maior o seu alcance em x/a . Embora não apareça no gráfico, em $x = 0$ há um poço de potencial de profundidade mínima, muito próximo ao valor de energia em $x = \pm 0,5$.

Calculamos o potencial de interação para todas as posições em y/a que varrem a largura do nanofio e obtemos o gráfico para a energia de interação em todas as posições entre $-13,5 x/a$ e

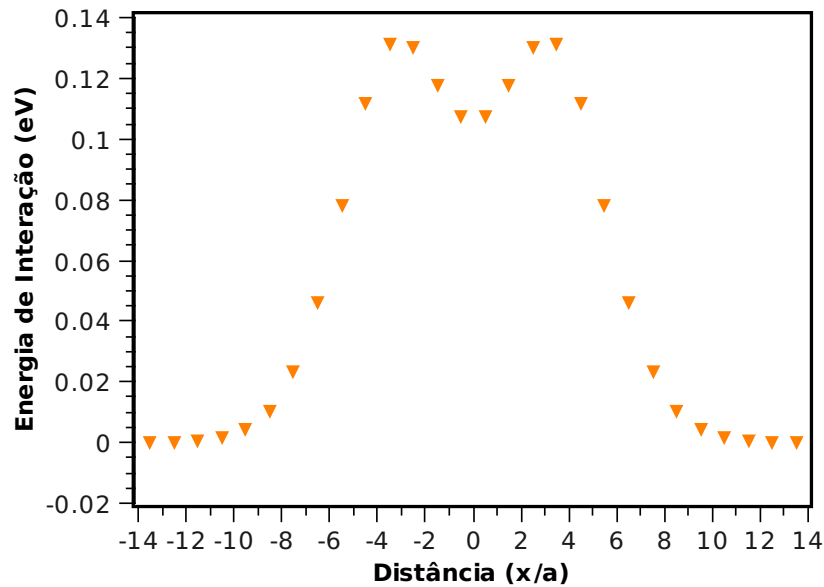


Figura 5.29: Potencial repulsivo para a impureza $J'/J = 2,5$ na posição $y/a = -0,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$.

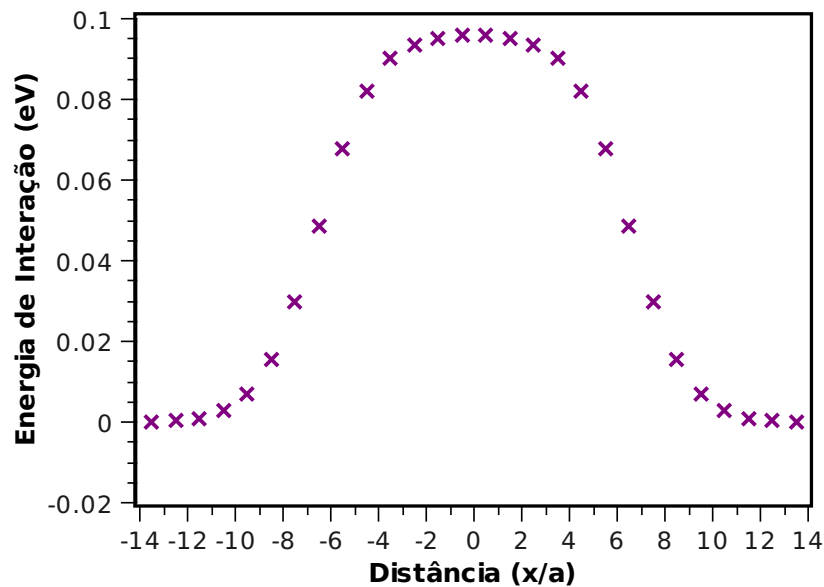


Figura 5.30: Potencial repulsivo para a impureza $J'/J = 2,5$ na posição $y/a = 4,5$ e $-13,5 < x/a < 13,5$.

13,5 x/a na figura 5.31. As curvas de interação para impurezas repulsivas analisadas acima nos gráficos 5.28, 5.29 e 5.30 estão incluídas no gráfico da figura 5.31.

As conclusões obtidas para a energia de interação entre a PDT e uma impureza repulsiva são análogas àquelas obtidas para a impureza atrativa. Uma barreira de potencial é responsável pelo espalhamento da PDT. Para efeitos de um movimento rápido durante a repulsão, a inclusão da impureza na região de polo sul da PDT é a posição mais favorável, pois apresenta uma maior

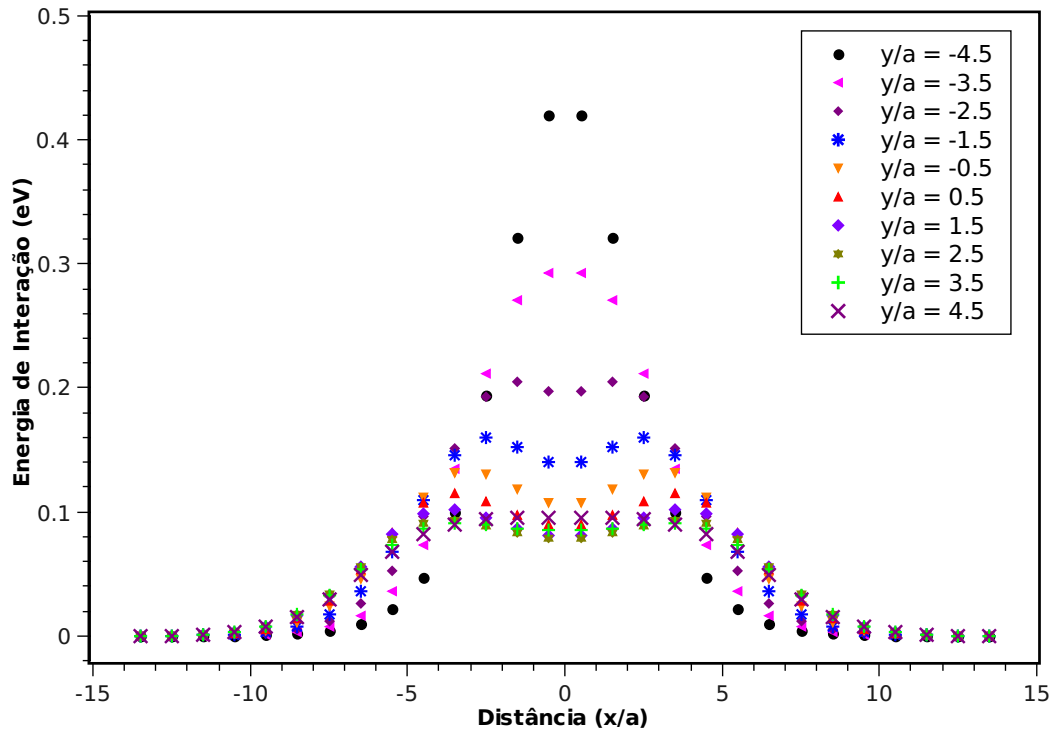


Figura 5.31: Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética $J'/J = 2,5$ em função da posição x/a da impureza para todas as ordenadas y/a possíveis a uma impureza pontual em um nanofio de largura 45 nm.

amplitude na energia de interação. O sentido dos domínios magnéticos formando a estrutura em “V” da PDT fazem com que a região próxima ao polo norte da PDT apresente um alcance maior da interação em relação ao eixo x/a . O perfil gaussiano da interação encontrado para o posicionamento da impureza em $y/a = -4,5$, se estende para a posição $y/a = -3,5$. As demais localidades em y/a em que a impureza pode ser inserida, revelam uma energia de interação cujo máximo é deslocado do centro $x/a = 0$.

5.3.3 Relação entre a impureza magnética e a largura do nanofio

Os procedimentos relatados anteriormente para o nanofio de largura $w = 45$ nm foram repetidos para outros valores de w , a fim de verificar se os resultados se confirmam independentemente da largura do fio. Mostramos, nesse trabalho, a configuração do poço de potencial para o nanofio de $w = 25$ nm na figura 5.32 e para o nanofio de $w = 85$ nm na figura 5.33, ambos com a impureza de valor $J'/J = 2,5$. Na figura 5.33, optamos por mostrar apenas alguns valores de y/a para deixar o gráfico mais nítido.

O comportamento da impureza repulsiva para as diferentes posições de y/a em que pode

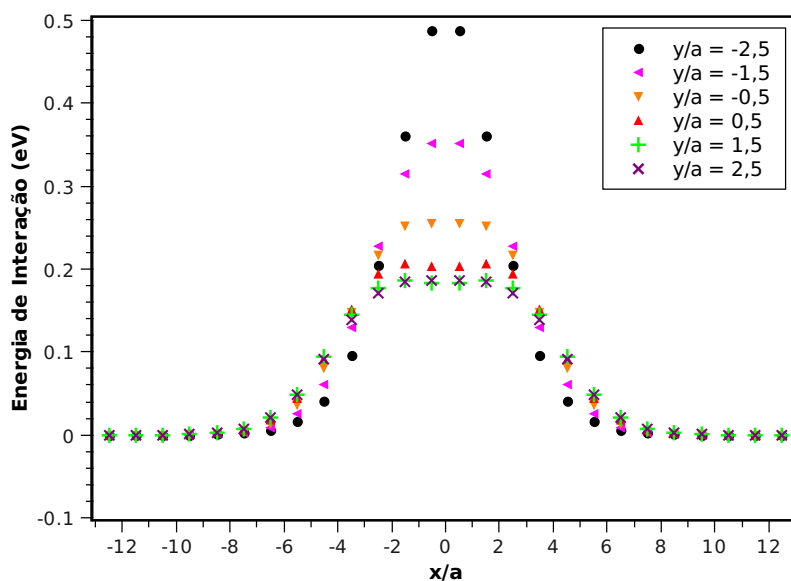


Figura 5.32: Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética $J'/J = 2,5$ em função da posição x/a da impureza para algumas ordenadas y/a onde pode ser inserida uma impureza pontual em um nanofio de largura 25 nm.

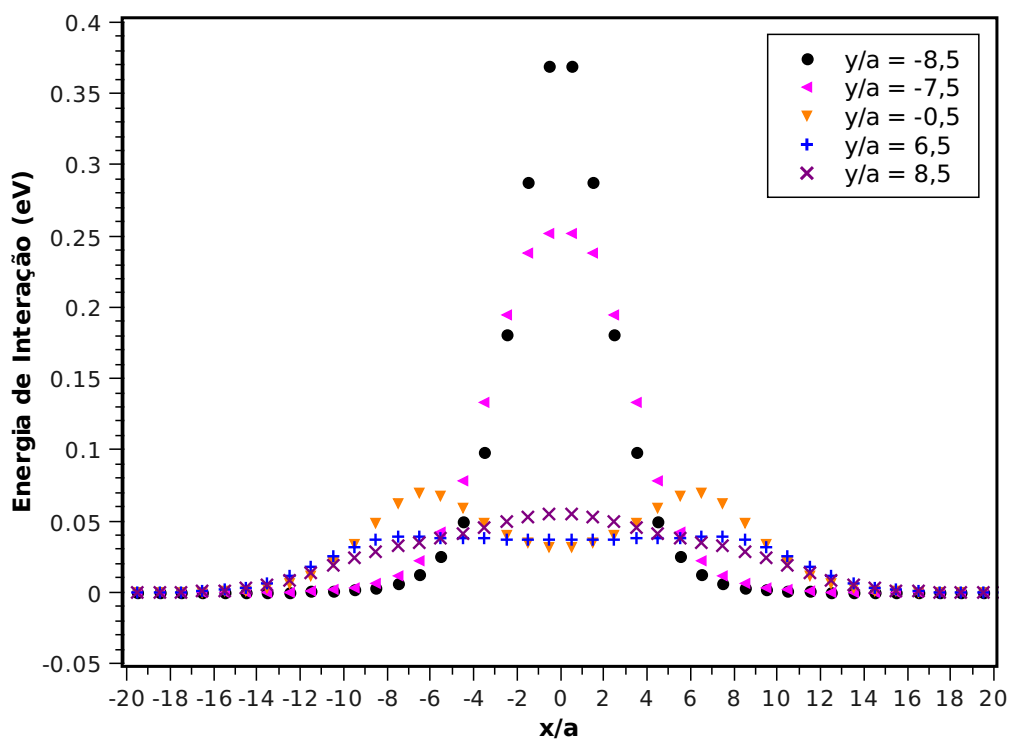


Figura 5.33: Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética $J'/J = 2,5$ em função da posição x/a da impureza para algumas ordenadas y/a onde pode ser inserida uma impureza pontual em um nanofio de largura 85 nm.

ser inserida se assemelha ao perfil mostrado no gráfico da figura 5.31, na qual temos a mesma impureza no nanofio de $w = 45$ nm. Os gráficos dos nanofios de larguras 25 e 45 nm, por apre-

sentarem uma diferença na largura de apenas $4a$, são semelhantes. Comparando os três gráficos, vemos que o módulo da energia de interação diminui à medida que w aumenta. Este resultado é esperado, uma vez que um número cada vez maior de momentos magnéticos constituem a PDT em nanofios mais largos, tornando o efeito de uma impureza magnética local sobre a PDT cada vez menor. O gráfico da figura 5.34 revela o comportamento da energia de interação em função da largura do nanofio. Nesse caso, fixamos a impureza em $x/a = \pm 1,5$ e $y/a = -w/(2a)$, ou seja, no polo sul magnético da PDT em todos os nanofios utilizados. A diminuição da energia com a largura w obedece a função de decaimento exponencial de segunda ordem do tipo $k_1 e^{\left(\frac{-x}{a_1}\right)} + K_2 e^{\left(\frac{-x}{a_2}\right)} + y_0$. As constantes mudam ao variarmos a posição da impureza, mas o perfil da curva permanece inalterado.

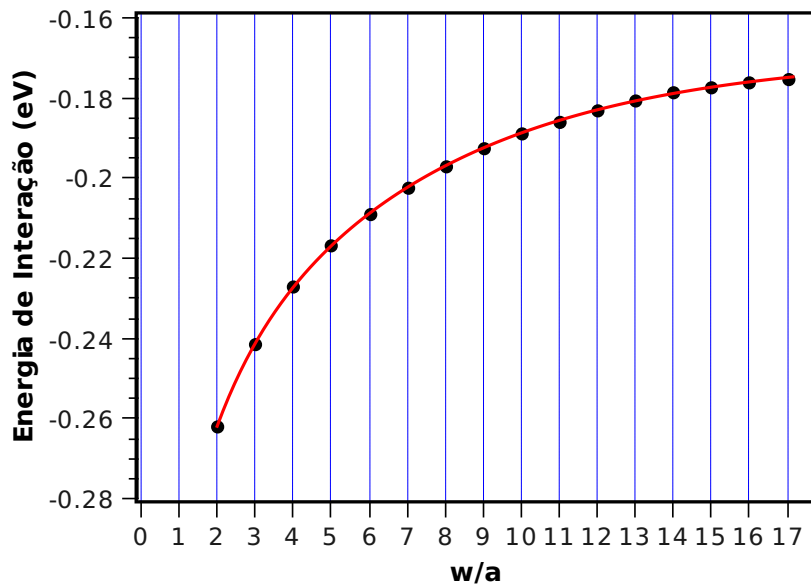


Figura 5.34: Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética $J'/J = 0,1$ em função da largura w/a do nanofio. Para a posição considerada da impureza a função obedece a relação específica para esse caso

$$E = 0,078 e^{\left(\frac{x/a}{1,17}\right)} - 0,111 e^{\left(\frac{x/a}{5,78}\right)} - 0,17.$$

O alcance da interação entre a impureza magnética atrativa ou repulsiva com a parede de domínio aumenta quando a impureza se encontra no polo norte da PDT, devido à sua extensão ser maior nessa região. Uma vez que a largura da PDT pode ser relacionada à largura do nanofio pela equação 3.2.2, $\Delta = \frac{w}{\pi}$, o alcance da interação também aumenta à medida que w aumenta.

Como já vimos, o alcance da interação em um mesmo nanofio aumenta à medida que a impureza se encontra mais próxima do polo norte magnético, devido ao aumento da extensão da PDT nessa região. Comparando os diferentes nanofios, para as larguras w analisadas, o alcance permaneceu praticamente o mesmo quando a impureza se encontra sobre o polo sul magnético da PDT. O gráfico da figura 5.35 (a), nos mostra a energia de interação quando a

impureza magnética se encontra em $y/a = -\frac{w/a}{2}$, isto é, próxima ao polo sul da PDT. Vemos que para as três larguras de nanofio no gráfico, o alcance da interação é praticamente o mesmo, e tem o valor próximo de $6a$. Porém, se a impureza for inserida no polo norte magnético da PDT, um aumento na largura do nanofio, e consequentemente em Δ , provoca um ligeiro aumento do alcance. Podemos ver claramente essa diferença no gráfico da figura 5.35 em (b), onde as setas da direita para a esquerda indicam que os alcances da interação para os nanofios de 85, 45 e 25 nm são, respectivamente, próximos a $15a$, $10a$ e $8a$.

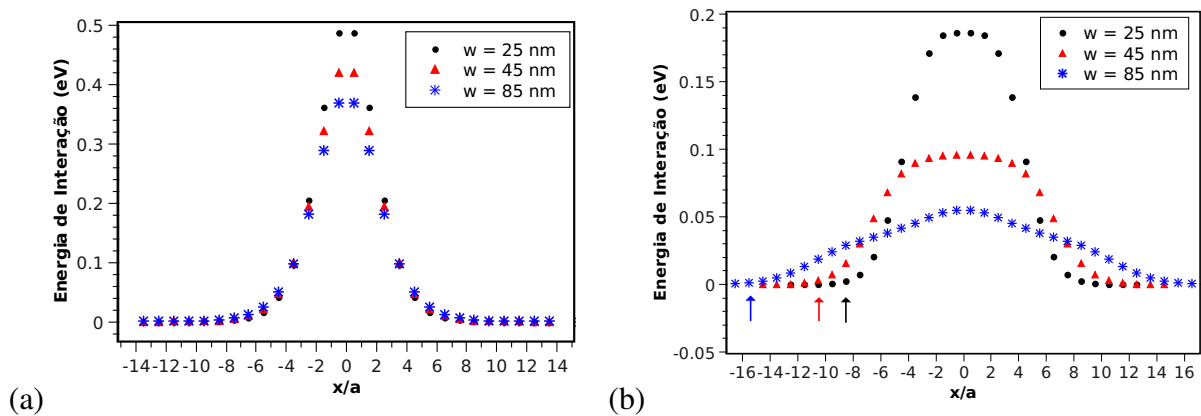


Figura 5.35: Alcance do potencial de interação entre a PDT e a impureza magnética para $w = 25, 45$ e 85 nm em (a) na posição mais próximo ao polo sul magnético ($y/a = -w/2a$) e, em (b) na posição mais próxima ao polo norte magnético ($y/a = +w/2$).

A partir desse resultado, podemos escolher o posicionamento da impureza magnética no nanofio de acordo com a aplicação desejada. Para efeitos de um aprisionamento mais forte ou um espalhamento mais rápido da PDT, a região próxima ao polo sul da PDT é mais indicada à inserção da impureza. Se a intenção é fazer com que os efeitos de atração e repulsão sejam percebidos à distâncias maiores sobre o eixo x do nanofio, sugere-se a inserção da impureza na região próxima ao polo norte da PDT.

As mesmas observações com relação ao posicionamento da impureza são válidas para uma impureza atrativa.

5.3.4 Tipo de impureza

Após estudar o potencial de interação para uma impureza atrativa $J'/J = 0, 1$ e uma impureza repulsiva $J'/J = 2, 5$ variando as suas posições e a largura do nanofio, nos concentramos em estabelecer uma relação entre os diversos tipos de impureza. Fixamos a impureza magnética

na posição mais próxima ao polo sul da PDT, local de maior potencial de aprisionamento ou espalhamento, e variamos os valores de J'/J . Os valores escolhidos estão entre $0, 1 \leq J'/J \leq 3,0$, como mostra o gráfico da figura 5.36 para a largura $w = 25$ nm. Quanto mais o valor J' se afasta do valor J , próprio do material, o módulo da energia de interação tende a aumentar. Isto significa que, para uma impureza atrativa, quanto menor for a razão J'/J , maiores serão os efeitos de atração da impureza sobre a PDT. Se a impureza magnética for repulsiva, temos que quanto maior for a razão J'/J , maiores serão os efeitos de repulsão da impureza sobre a PDT. Quanto mais próximo de 1 for o valor de J'/J , os efeitos de atração ou repulsão da PDT serão suavizados. Para $J' = 0$ não inserimos uma impureza magnética na amostra, mas uma região de buraco é criada. Para os diferentes valores de J' usados, fixamos a impureza na posição $y/a = -2,5$ e através do ajuste gaussiano realizado sobre todas as curvas, a largura a meia altura s para todas as gaussianas é em módulo igual a 1,908, tanto para as impurezas atrativas quanto para as impurezas repulsivas. Podemos verificar este resultado no gráfico da figura 5.36, na qual todas as curvas tendem a zero aproximadamente em $x/a = 6,5$ mostrando que o alcance da interação independe do valor J' . Tal ajuste também foi realizado para os nanofios de larguras 15, 20 e 45 nm, revelando novos valores s , porém, confirmando que o alcance da interação independe de J'/J .

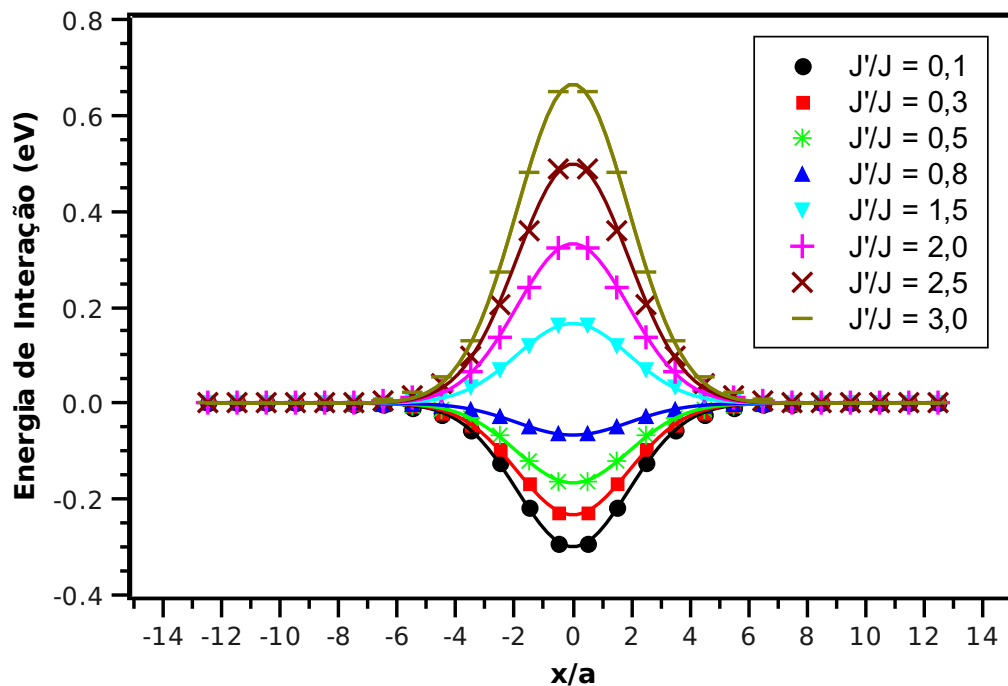


Figura 5.36: Energia de interação entre a PDT e a impureza magnética para os valores de J'/J mostrados em função da posição x/a em um nanofio de largura 25 nm.

É possível perceber no gráfico 5.36 que a amplitude da energia de interação tem o mesmo

valor para $J'/J = 0,5$ e $1,5$, sendo, evidentemente, o primeiro valor um poço de potencial e o segundo uma barreira de potencial. Este resultado é devido ao fato de ambos os valores J' se distanciarem igualmente do valor da constante de troca J , provocando uma mesma intensidade nos efeitos de atração ou repulsão. Podemos extrapolar o resultado para todas as impurezas magnéticas cujo valor $|1 - (J'/J)|$ forem iguais.

Se traçarmos um gráfico da amplitude da energia de interação para cada valor $|1 - (J'/J)|$ teremos, para uma mesma posição da impureza e variando-se J'/J , uma relação linear como a mostrada na figura 5.37. Ou seja, a relação entre a energia de interação entre a PDT e a impureza magnética aumenta linearmente a medida que o valor da impureza J' vai se afastando do valor J , ou a razão J'/J vai se distanciando de 1. A relação é do tipo $E = n \cdot |1 - (J'/J)|$, em que o coeficiente angular n depende da posição em que fixamos a impureza magnética. Quanto mais próximo do centro da PDT no polo sul magnético se encontrar a impureza magnética maior será a inclinação do gráfico.

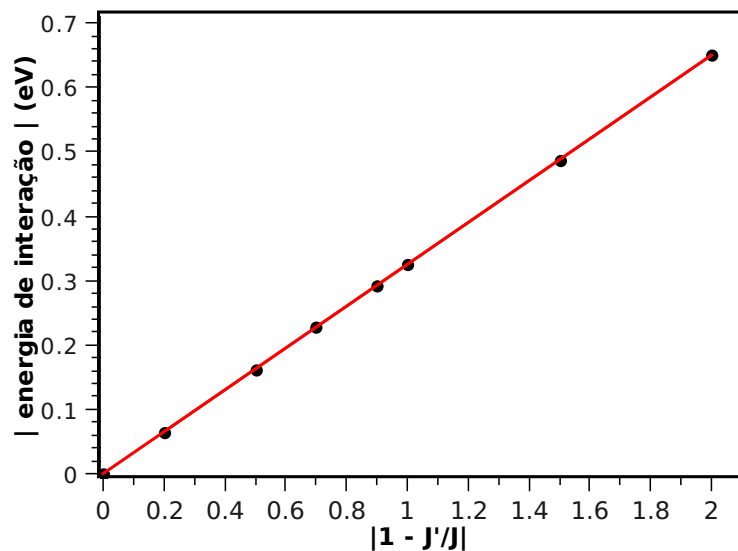


Figura 5.37: Módulo da energia de interação entre a PDT e a impureza magnética em função dos valores de $|1 - (J'/J)|$ para a posição da impureza em $x/a = \pm 0,5$ e $y/a = -2,5$ em um nanofio de largura 25 nm.

5.3.5 Inclusão de um “cluster” de impurezas

Até agora inserimos uma impureza magnética através da mudança da interação de troca de uma única célula magnética do material discretizado. Se ao invés de inserirmos uma impureza magnética em uma única célula, utilizarmos o valor J' em quatro células vizinhas teremos uma impureza magnética ainda localizada, porém com maiores dimensões. Escolhemos introduzir uma impureza “quadrada” abrangendo quatro células sobre o plano do nanofio, duas células

adjacentes no eixo x acima de outras duas a $1a$ de diferença no eixo y , ou seja, a impureza forma um quadrado sobre o plano do nanofio. Chamaremos este tipo de impureza “quadrada” de “*cluster*” de impurezas.

Escolhemos os nanofios de larguras 25 e 45 nm e introduzimos um “*cluster*” de impurezas magnéticas nas dimensões próximas ao polo sul da PDT e realizamos os mesmos estudos sobre a energia de interação entre a PDT e impureza. Comparando os resultados do efeito de uma impureza de uma única célula com os efeitos do “*cluster*” de impurezas sobre o mesmo nanofio, o módulo da energia de interação aumenta com o aumento das dimensões da impureza. O gráfico da figura 5.38 mostra o potencial de interação entre a PDT e o “*cluster*” de impureza atrativa $J'/J = 0,1$ em um nanofio de $w = 45$ nm. A impureza em y/a ocupa duas células consecutivas como mostra a legenda da figura e, em x/a o posicionamento mostrado no gráfico se refere ao ponto médio entre as duas células consecutivas que englobam a impureza. O perfil das curvas para a energia de interação em cada valor y/a variando-se as posições x/a é o mesmo visualizado para a impureza pontual e o potencial de aprisionamento ou espalhamento da PDT é intensificado com o “*cluster*” de impurezas.

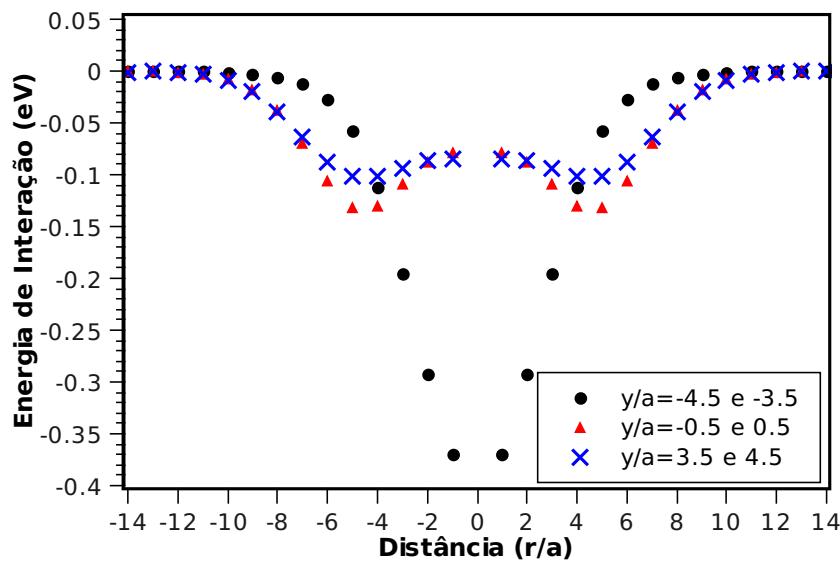


Figura 5.38: Energia de interação entre a PDT e o cluster de impureza magnética $J'/J = 0,1$ em função da posição x/a do cluster de impurezas para três posições y/a em um nanofio de largura 45 nm.

Uma impureza pontual $J'/J = 0,1$ inserida na posição $x/a = 0,5$ e no polo sul da PDT, tem sua energia de interação aumentada 1,16 vezes de um nanofio de largura 45 nm para a mesma posição em um nanofio de 25 nm. Essa proporção encontrada entre diferentes larguras de nanofios, se mantém para impurezas quadradas. Ou seja, se substituirmos a mesma impureza pontual na mesma posição por uma impureza quadrada nos dois nanofios, a alteração na energia

seria exatamente a mesma proporção de 1,16 do nanofio de $w = 45$ nm para o nanofio de $w = 25$ nm. Cada posição $(\frac{x}{a}, \frac{y}{a})$ possui uma proporção diferente. Desta forma, percebemos que a partir de um gráfico de energia de interação para um determinado nanofio como aquele em 5.36 para $w = 25$ nm, e apenas uma curva do mesmo gráfico para um nanofio de largura diferente, utilizando-se as proporções na variação da energia, válidas para qualquer tamanho de impureza, conseguimos traçar um gráfico completo de energia de interação para o novo nanofio, sem ter que calcular cada interação individualmente.

A inclusão de um “*cluster*” de impurezas magnéticas pode ser de grande utilidade em nanofios muito espessos, onde o aumento das dimensões da PDT diminui muito a energia de interação. Logo, uma impureza de maiores dimensões compensaria esse efeito, e a atração ou espalhamento poderia ocorrer de forma mais rápida e intensa novamente.

5.4 INFLUÊNCIA DAS IMPUREZAS MAGNÉTICAS NA DINÂMICA DA PAREDE DE DOMÍNIO TRANVER-SAL

Conhecendo-se detalhadamente os efeitos que uma impureza magnética exerce sobre a parede de domínio transversal, estendemos nosso estudo a verificação de sua influência na dinâmica da PDT. Aplicamos um pulso de campo magnético sobre o eixo x do nanofio para mover a PDT e detectamos que a presença da impureza altera a sua velocidade. Inicialmente, o pulso de campo de 1 ns de duração acelera a PDT no sentido $+x$ do nanofio, da mesma maneira que ocorre nos nanofios que não possuem impurezas magnéticas. Uma alteração na velocidade é percebida apenas quando a PDT passa exatamente sobre a região onde a impureza se encontra, como mostram os gráficos da figura 5.39 na ausência de impurezas em (a) e na presença de uma impureza em (b). Essa variação instantânea da velocidade pode ser tanto um aumento quanto uma diminuição, dependendo de vários fatores, como o tipo de impureza, a largura do nanofio e a amplitude do campo magnético aplicado. Essas peculiaridades serão estudadas individualmente.

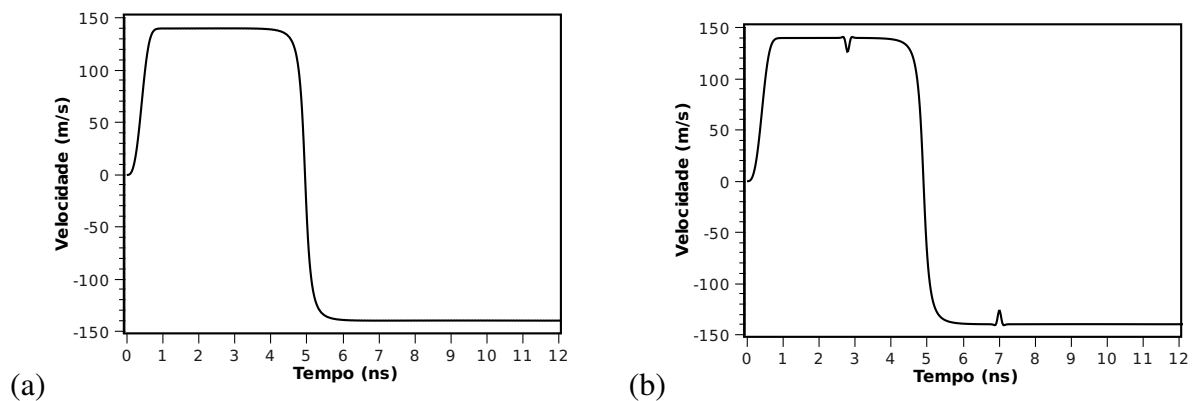


Figura 5.39: Gráficos da velocidade da PDT em um nanofio de $10 \times 10 \times 1255$ nm sem impureza em (a), e com uma impureza atrativa em (b), no qual a alteração instantânea da velocidade que ocorre em 3,1 ns e depois no retorno da PDT sobre o nanofio em 7,1 ns, representa o momento em que a PDT passa sobre a impureza magnética.

5.4.1 Uma impureza magnética atrativa

Escolhemos o nanofio de largura $w = 25$ nm com uma PDT no centro e posicionamos sobre ele uma impureza atrativa do tipo $J'/J = 0,2$ na coordenada $(\frac{x}{a}, \frac{y}{a}) = (+50,5, -2,5)$. Variamos a amplitude do campo magnético sugerido na equação 5.2.1 entre 0,5 mT e 3,0 mT para mover a PDT sobre o eixo $+x$ do nanofio. O posicionamento da impureza magnética em x/a foi escolhido de tal forma que o pulso de campo de 1,0 ns de duração sempre termine antes da PDT atingir a região da impureza magnética. Nesse intervalo de amplitudes, a PDT se move preservando suas características. Inicialmente posicionamos a impureza em $y/a = -w/a$ devido a essa região apresentar uma maior interação entre a PDT e a impureza. Comparações com as demais posições serão feitas na seção 5.4.3. A tabela 5.2 abaixo apresenta as modificações ocorridas na velocidade da PDT, ΔV , ao passar exatamente sobre a região da impureza. O sinal “+” representa um aumento instantâneo na velocidade da PDT, e o sinal de “-” indica uma diminuição no seu valor. A palavra “aprisiona” na tabela significa que a PDT não ultrapassou a impureza magnética, sendo aprisionada por ela.

Tabela 5.2: Variação da velocidade da PDT em m/s ao passar pela impureza atrativa $J'/J = 0,2$ no nanofio de $w = 25$ nm.

$\mu_0 H_{ap}$ (mT)	ΔV (m/s)
0,5	aprisiona
1,0	aprisiona
1,5	aprisiona
2,0	+ 75
2,5	+ 51
3,0	+22

Uma impureza atrativa em $y/a = -2,5$ no nanofio de $w = 25$ nm apresenta uma interação com a PDT semelhante ao poço de potencial apresentado na figura 5.22. Sendo assim, amplitudes de campo magnético menores como 0,5 mT, 1,0 mT e 1,5 mT não são suficientes para fornecer uma energia cinética à PDT maior que a profundidade do poço de potencial. A PDT adquire uma velocidade não muito elevada e quando chega à região da impureza magnética, “cai” no poço de potencial, ficando aprisionada. O aprisionamento ocorre com a PDT oscilando em torno da impureza atrativa até parar totalmente sobre ela após vários ns, como mostra o gráfico da figura 5.40. Essa oscilação se assemelha à curva apresentada por um oscilador harmônico amortecido, porém a função que representa a velocidade da PD *versus* tempo difere da função

do oscilador. Vemos que ao atingir a região da impureza magnética pela primeira vez a velocidade aumenta tanto que chega a ser maior que a máxima velocidade provocada pelo pulso de campo quando ele ainda está atuando. A partir desse momento as variações da velocidade ao oscilar em torno da impureza atrativa se tornam cada vez menores.

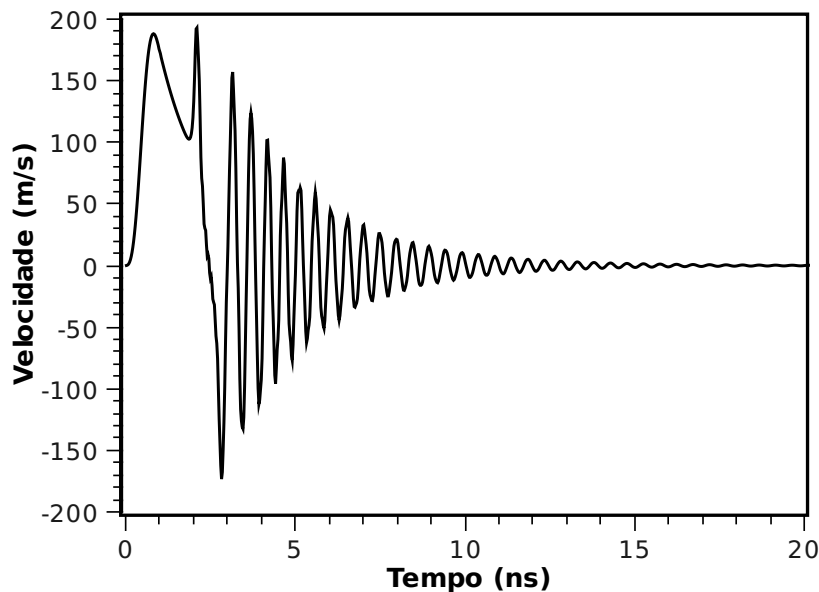


Figura 5.40: Velocidade da PDT em função do tempo durante o aprisionamento da mesma em uma impureza atrativa sob uma campo magnético de amplitude 1,5 mT.

Um aumento da velocidade sem o aprisionamento, acontece para os campos de amplitude 2,0, 2,5 e 3,0 mT. A PDT é acelerada, e ao percorrer o nanofio após o término do pulso de campo, enquanto sua velocidade é descendente, ela ultrapassa a região da impureza. O potencial atrativo é o responsável pelo aumento instantâneo da velocidade da PDT. Nesse caso específico, onde a impureza magnética $J'/J = 0,2$ se encontra na posição $y/a = -2,5$ em um nanofio de largura 25 nm, é necessário uma energia maior que 0,1 eV para que a PDT vença o poço de potencial. Campos magnéticos acima de 2,0 mT fornecem à PDT uma energia superior a esse valor. A figura 5.41 mostra o gráfico de velocidade da PDT sob um campo de 2,0 mT em um nanofio com uma impureza atrativa. O pico no gráfico corresponde a um aumento de 75 m/s e ocorre instantaneamente quando a PDT passa sobre a região da impureza, e tem a duração de 0,3 ns. O valor ΔV encontrado é a altura média do pico mostrado. A impureza atrativa provoca dois efeitos que somados determinam a largura do pico de ΔV . Primeiro, a presença da impureza magnética acelera a PDT quando esta se aproxima da região da impureza. Porém, logo após ultrapassar essa região, mas ainda dentro do alcance da interação da impureza magnética, a PDT sofre uma desaceleração (a impureza continua atraindo a PDT), a qual só deixa de acontecer quando a PDT já se afastou o suficiente para estar em uma região fora do alcance da interação.

Por isso, o pico que representa ΔV é resultado do processo de atração da PDT imediatamente antes e imediatamente após a sua ultrapassagem sobre a impureza magnética.

Uma vez que campos magnéticos de maiores amplitudes aceleram a PDT a velocidades maiores, a largura do “pico” de velocidade torna-se menor. Como a PDT se move mais rapidamente, a alteração na velocidade ao passar sobre a região da impureza torna-se cada vez mais instantânea. Para os valores de campo iguais a, 2,0, 2,5 e 3,0 mT, a duração de ΔV é respectivamente, 0,30 , 0,24 e 0,20 ns.

Outro fator observado é o momento exato do início e do final do pico de variação da velocidade da PDT. Para todos os campos magnéticos, nos instantes em que a PDT se encontra a uma distância de $6a$ ou $7a$ da impureza magnética, seja antes ou após ultrapassá-la, ocorre o pico de ΔV . Este resultado está de acordo com o alcance da interação de uma impureza em $y/a = -2,5$ no nanofio de $w = 25$ nm visualizado na figura 5.36. Isto comprova que a interação entre a PDT e a impureza é significativa até uma distância de $6a$ ou $7a$ entre elas.

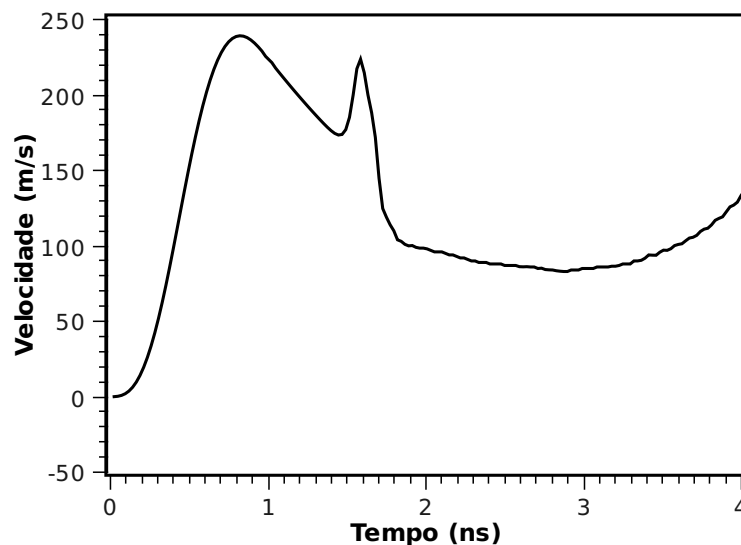


Figura 5.41: Velocidade da PDT em função do tempo para um campo magnético de amplitude 2,0 mT. O pico de $\Delta V = +75$ m/s ocorre quando a PDT atinge a região da impureza magnética atrativa.

Quando a amplitude de campo magnético é superior a 2,0 mT, a partir do momento em que a PDT passa sobre a impureza magnética, a sua velocidade sobre todo o caminho restante do nanofio passa a apresentar oscilações irregulares, como mostram os gráficos da figura 5.42 em (a) para uma amplitude de 2,5 mT e em (b) para 3,5 mT. Tais oscilações na ausência de uma impureza magnética, só são produzidas sob a ação de campos magnéticos superiores a 7,0 mT, dependendo da largura e espessura do fio. No entanto, a inclusão de uma impureza magnética, provoca uma perturbação local, que modifica o movimento da PDT após passar

sobre ela. Dois efeitos podem provocar as oscilações observadas. O primeiro deles, independe da presença da impureza magnética, tendo como responsável uma amplitude de campo alta, a qual faz com que a largura e magnetização da PDT sofra mudanças durante o movimento. Esse fato altera a velocidade da PDT como já foi explicado por Walker [25]. No entanto o que a figura 5.42 revela vai além dessa explicação. A presença da impureza magnética interage com a PDT primeiro acelerando-a no sentido $+x$ e posteriormente desacelerando-a no mesmo sentido. Tal efeito tende a ser reproduzido no movimento da PDT após ultrapassar a impureza como pequenas oscilações na sua velocidade, como se um campo oscilante estivesse atuando sobre ela durante a ultrapassagem da impureza. Esse efeito provoca pequenas alterações na largura da PDT no instante em que a impureza magnética acaba de ser ultrapassada, o que contribui para as oscilações mostradas no gráfico da figura 5.42. Esse fato só acontece se a amplitude de campo magnético for superior a um determinado valor. Quanto maior a largura do nanofio, menor o valor de campo magnético que provoca tais oscilações, uma vez que o campo de Walker também diminui.

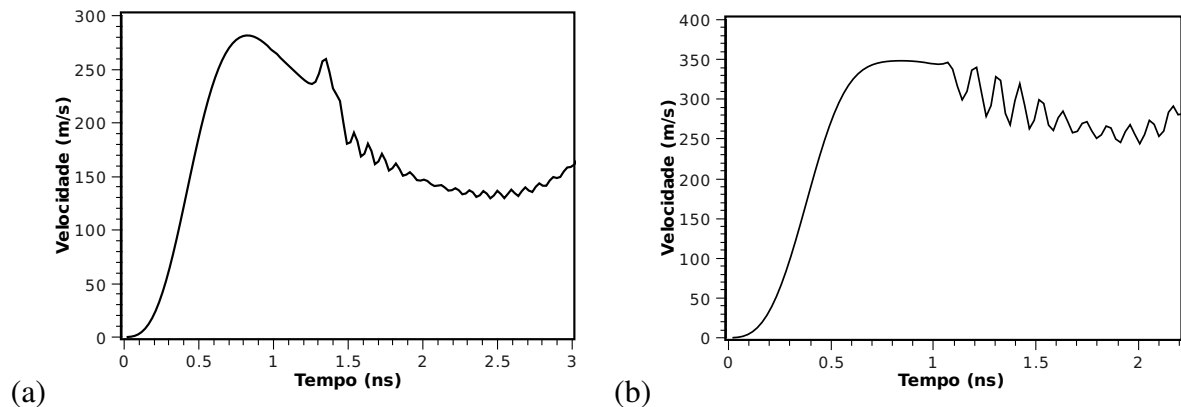


Figura 5.42: Velocidade da PDT em função do tempo para um nanofio com uma impureza magnética atrativa, sob a ação de um campo magnético de amplitude 2,5 mT em (a) e, 3,5 mT em (b). As oscilações começam com a PDT atingindo a região da impureza magnética.

Para as amplitudes de 2,5 e 3,0 mT, as oscilações apresentadas são pequenas, não comprometendo a percepção da variação instantânea da velocidade provocada pelo potencial atrativo, ou mesmo o movimento da PDT em direção à borda do nanofio. O movimento da PDT sob a ação de campos acima de 3,0 mT apresenta oscilações muito amplas após ultrapassar a região da impureza magnética, como a figura 5.42 (b) revela, o que dificulta a percepção de alterações instantâneas na sua velocidade.

5.4.2 Uma impureza magnética repulsiva

Assim como fizemos anteriormente com a inclusão de uma impureza atrativa, escolhemos agora uma impureza magnética repulsiva $J'/J = 2,5$ inserida na mesma posição reservada a impureza atrativa na seção anterior. Também analisamos as alterações na velocidade da PDT se movendo sob o efeito de um campo magnético de amplitude entre 0,5 e 3,0 mT em um nanofio de 25 nm de largura. Os resultados da variação da velocidade, ΔV , são apresentados na tabela 5.3 e a indicação “repulsão” representa a situação em que a PDT é repelida pela impureza, não conseguindo ultrapassá-la.

Tabela 5.3: Variação da velocidade da PDT em m/s ao passar pela impureza repulsiva $J'/J = 2,5$ no nanofio de $w = 25$ nm.

$\mu_0 H_{ap}$ (mT)	ΔV (m/s)
0,5	repulsão
1,0	repulsão
1,5	repulsão
2,0	repulsão
2,5	-56
3,0	-18

A impureza repulsiva na posição $y/a = -2,5$ apresenta um potencial de interação semelhante à barreira de potencial apresentado na figura 5.28. Proporcionalmente, a altura da barreira de potencial da impureza repulsiva $J'/J = 2,5$ é 0,25 eV maior em módulo que a profundidade do poço de potencial da impureza atrativa $J'/J = 0,2$, o que faz com que seja necessário uma amplitude ainda maior nesse caso, para que a PDT ultrapasse a impureza repulsiva. Vemos que amplitudes de campos magnéticos de 0,5 mT a 2,0 mT não fornecem uma energia cinética à PDT suficiente para vencer a altura da barreira de potencial, que para essa posição é 0,5 eV. O gráfico da figura 5.43 descreve o movimento da PDT que se move sob a ação de um campo de 2,0 mT e é repelida pela impureza magnética.

Podemos ver que, a PDT devido ao pulso de campo magnético, se move em direção a impureza e ao se aproximar dela é freada e para na posição $1a$ anterior à célula em que a impureza se encontra. A barreira de potencial expulsa a PDT que se move na direção oposta a ela. Em um determinado momento (17 ns no gráfico) a PDT se encontrando entre a impureza e o centro do nanofio, inverte o sentido do seu movimento novamente. Há uma aceleração momentânea em direção à impureza e a PDT após uma pequena oscilação em torno do equilíbrio, enfim permanece em repouso em uma região próxima $6a$ da impureza magnética, exatamente o alcance da interação.

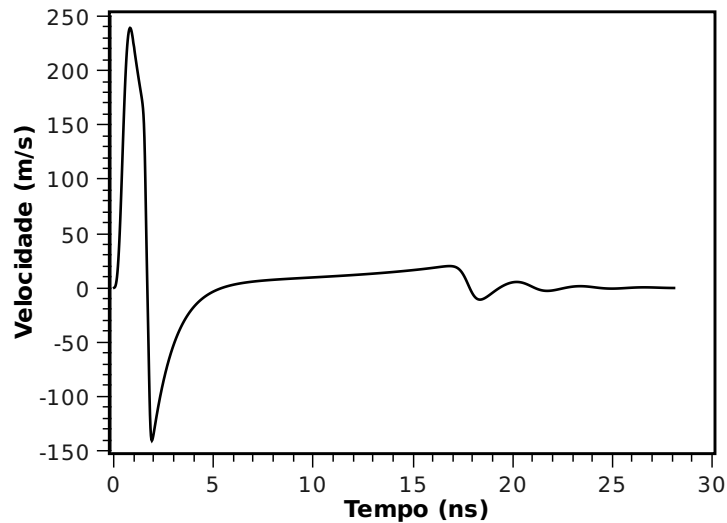


Figura 5.43: Velocidade da PDT em função do tempo para um campo magnético de amplitude 2,0 mT.

Uma queda instantânea na velocidade é percebida quando a PDT se move sob um pulso de campo de amplitude entre 2,5 mT e 3,0 mT. Após ultrapassar a barreira de potencial a PDT volta a se mover com a velocidade usual. A figura 5.44 mostra o gráfico de velocidade da PDT ao ultrapassar a impureza magnética pontual sob um campo de amplitude 2,5 mT. Em 1,41 ns ocorre a diminuição da velocidade em 56 m/s, a qual não ultrapassa 0,24 ns de duração para esse valor de campo magnético. Novamente, o valor de ΔV encontrado se refere a profundidade média do vale que aparece no gráfico de velocidade. Assim como para a impureza magnética atrativa, os intervalos de tempo de variação da velocidade para os campos de 2,5 e 3,0 mT também são 0,24 e 0,20 ns, respectivamente. A queda de ΔV no gráfico é resultado da desaceleração da PDT ao se aproximar da impureza magnética e da aceleração instantânea da PDT enquanto se afasta da impureza repulsiva na região de alcance da interação.

No gráfico da figura 5.44 a velocidade não apresenta oscilações após ultrapassar a região da impureza repulsiva, como ocorre para a mesma amplitude de campo magnético para a impureza atrativa (5.42 a). Para a impureza $J'/J = 2,5$, tais oscilações começam a surgir quando a PDT se move sob a ação de 3,0 mT como mostra o gráfico da figura 5.45 (a), e a partir de 3,5 mT, se tornam muito amplas, dificultando a análise do movimento, como vemos na mesma figura em (b). As oscilações também se originam devido aos efeitos instantâneos e consecutivos de desaceleração e aceleração da PDT ao passar sobre a região do alcance da impureza. O aumento da amplitude de campo que gera esse resultado se deve também ao aumento do módulo da diferença entre J e J' .

Em uma análise geral dos resultados acima, podemos dizer que sob amplitudes de campo magnético até 3,0 mT, uma impureza magnética atrativa, quando não aprisiona a PDT, é capaz

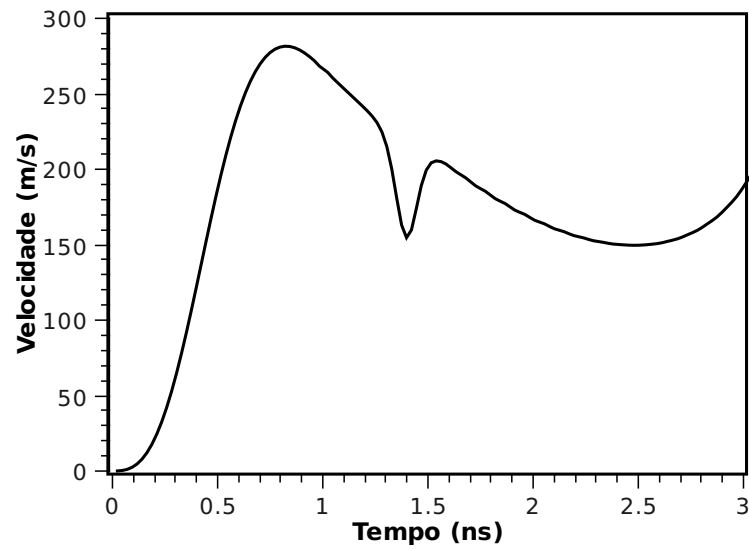


Figura 5.44: Velocidade da PDT em função do tempo para um campo magnético de amplitude 2,5 mT.

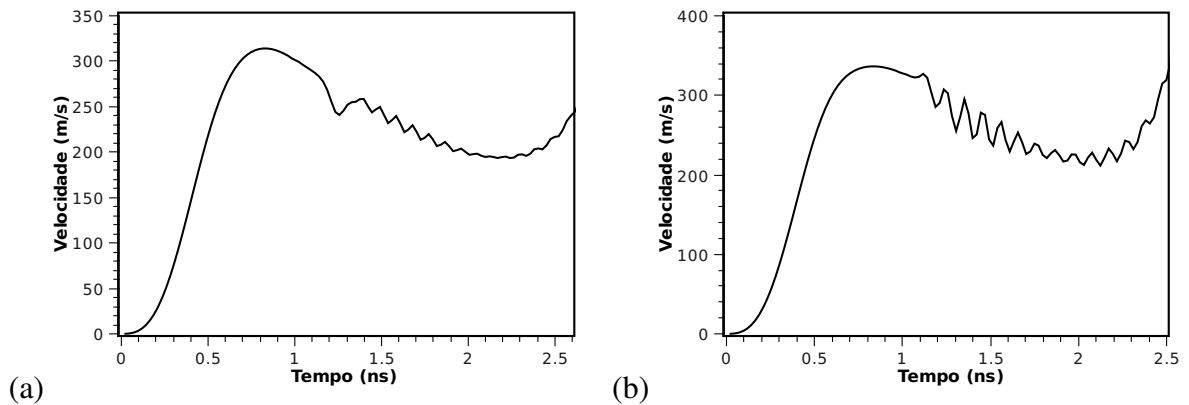


Figura 5.45: Velocidade da PDT em função do tempo para em um nanofio com uma impureza magnética repulsiva, sob a ação de um campo magnético de amplitude 3,0 mT em (a) e 3,5 mT em (b). As oscilações começam com a PDT atingindo a região da impureza magnética.

de aumentar sua velocidade instantaneamente. Uma impureza magnética repulsiva, ao contrário, se não bloquear a passagem da PDT, pode diminuir a sua velocidade no momento em que se encontram. Amplitudes de campo magnético entre 1,5 e 2,0 mT são as mais favoráveis à variação da sua velocidade apenas instantaneamente.

5.4.3 Relação entre a variação da velocidade da parede de domínio e o posicionamento da impureza sobre o eixo y/a

A dependência do perfil do potencial de interação entre a PDT e a impureza magnética com o seu posicionamento sobre o nanofio no eixo y/a influencia nas características da variação da velocidade da PDT. O estudo apresentado até agora se refere a posição $-w/a$, polo sul da PDT, local de maior interação com a impureza, consequentemente, local onde o aprisionamento ou repulsão se tornam mais fáceis mesmo durante a dinâmica da PDT. Uma extensão desse estudo sobre outras posições da impureza magnética ao longo da direção y foi realizada para o nanofio de $w = 25$ nm, sob as mesmas amplitudes de campo magnético de 0,5 mT a 3,0 mT. Separamos nossos resultados de variação da velocidade da PDT em função da amplitude de campo para a impureza atrativa na tabela 5.4, adicionados aos resultados da tabela 5.2. A impureza magnética sobre o eixo x/a continua na posição 50,5.

Tabela 5.4: Variação da velocidade da PDT em m/s ao passar pela impureza atrativa $J'/J = 0,2$ encontrada nas diferentes posições y/a de um nanofio de 25 nm de largura.

$\mu_0 H_{ap}$ (mT)	posição da impureza magnética sobre o eixo y/a					
	-2,5	-1,5	-0,5	0,5	1,5	2,5
0,5	aprisiona	aprisiona	aprisiona	aprisiona	aprisiona	aprisiona
1,0	aprisiona	aprisiona	aprisiona	aprisiona	aprisiona	aprisiona
1,5	aprisiona	+95	+95	+73	+67	+67
2,0	+75	+72	+46	+42	+41	+41
2,5	+51	+41	+36	+36	+27	+26
3,0	+24	+23	+15	+14	+8	+3

Os resultados da tabela 5.4 nos mostram que em um nanofio de $w = 25$ nm, excetuando-se a posição $y/a = -2,5$, o campo magnético mínimo para vencer o poço de potencial gerado pela impureza atrativa é de 1,5 mT. Valores intermediários a 1,5 mT e 2,0 mT foram testados, confirmando essa afirmação. A medida que a impureza se desloca da posição $y/a = -2/5$ em direção a $y/a = +2,5$, há uma redução no valor de ΔV . Este resultado pode ser justificado pela figura 5.27, onde percebemos que a interação entre a PDT e a impureza diminui ao se mover a impureza da região $-w/a$ para $+w/a$.

As posições entre $y/a = -0,5$ e $y/a = +2,5$ apresentam dois mínimos locais de energia, como já vimos na figura 5.27. Essas particularidades aparecem no gráfico de velocidade da PDT. Por exemplo, os gráficos da figura 5.46 mostram a velocidade da PDT sob um campo

de 2,0 mT com uma impureza atrativa em $y/a = -0,5$ em (a) e em $y/a = 0,5$ em (b). Ambos revelam aparentemente dois picos de velocidade separados por uma queda suave. A justificativa para esse fato se baseia no poço de potencial atrativo com dois mínimos para essas regiões. A PDT é atraída pela impureza caindo no primeiro mínimo local, o que sugere o primeiro aumento instantâneo na velocidade. Do primeiro mínimo local para o segundo, a PDT deve ultrapassar uma pequena barreira de potencial menor que 0,01 eV, o que produz a pequena queda de velocidade no meio do pico. Uma nova e pequena elevação em ΔV ocorre quando a PDT atinge o segundo mínimo local.

Os valores de ΔV da tabela 5.4 para as posições $y/a = -0,5$ e $y/a = +0,5$ são muito próximos, uma vez que os valores do potencial de interação nos dois casos são bem próximos entre si. O mesmo pode ser dito sobre a amplitude da interação entre a PDT e a impureza nas posições $y/a = 1,5$ e $y/a = 2,5$, causando valores de ΔV também bem aproximados nessas regiões.

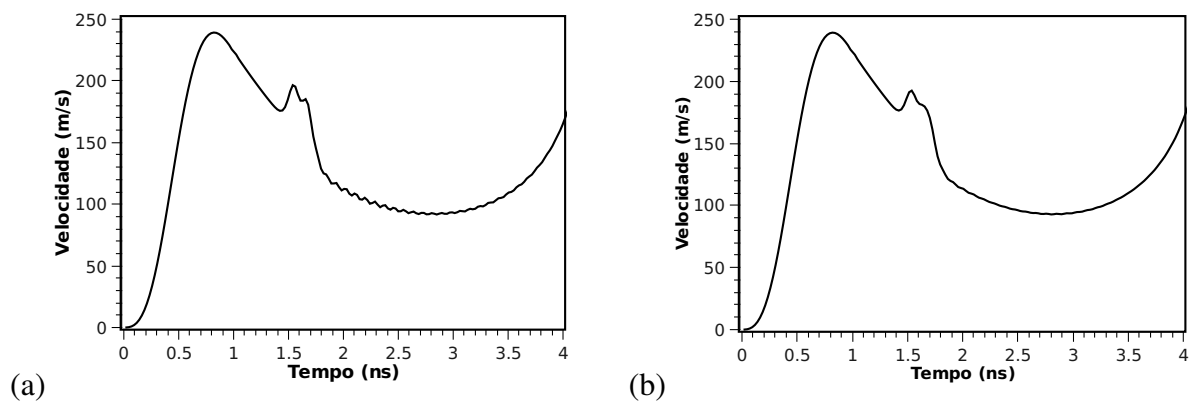


Figura 5.46: Gráficos da velocidade da PDT em um nanofio de $10 \times 25 \times 1255$ nm com uma impureza atrativa em $y/a = -0,5$ em (a) e em $y/a = 0,5$ em (b). Em ambos os casos a PDT se move devido a um campo magnético de 2,0 mT.

Acompanhando a curva do potencial de interação, quando a impureza magnética é inserida nas posições de $y/a = -0,5$ a $y/a = 2,5$, o poço de potencial diminui, porém apresenta uma largura maior, da mesma forma que acontece na figura 5.32 para uma impureza repulsiva, ou seja o alcance da interação é maior nessa região. Comprovamos essa observação ao estudar a dinâmica da PDT. A variação da velocidade da PDT nessa região é menor, porém, o pico de ΔV é mais largo, indicando esse maior alcance. Para um campo de 2,0 mT, o intervalo de tempo de duração de ΔV na posição de $y/a = -2,5$ até $y/a = +2,5$ passando por todas as posições indicadas na tabela 5.4 é mostrado na tabela 5.5. Como os valores são muito próximos, não é possível perceber essa variação através de um gráfico de velocidade completo.

Tabela 5.5: Intervalo de tempo de duração da variação da velocidade da PDT em ns ao passar pela impureza atrativa $J'/J = 0,2$ sob a ação de um campo de 2,0 mT encontrada nas diferentes posições y/a de um nanofio de 25 nm de largura.

posição y/a	ΔT
-2,5	0,30
-1,5	0,30
-0,5	0,42
0,5	0,49
1,5	0,45
2,5	0,44

As mesmas considerações relativas ao posicionamento da impureza magnética foram realizadas para uma impureza repulsiva $J'/J = 2,5$. As variações na velocidade da PDT sob a aplicação de um pulso de campo magnético variando entre 0,5 mT e 3,0 mT são mostradas na tabela 5.6.

Tabela 5.6: Variação da velocidade da PDT em m/s ao passar pela impureza repulsiva $J'/J = 2,5$ encontrada nas diferentes posições y/a no nanofio de $w = 25$ nm.

$\mu_0 H_{ap}$ (mT)	posição da impureza magnética sobre o eixo y/a					
	-2,5	-1,5	-0,5	0,5	1,5	2,5
0,5	repulsão	repulsão	repulsão	repulsão	repulsão	repulsão
1,0	repulsão	repulsão	repulsão	repulsão	repulsão	repulsão
1,5	repulsão	repulsão	repulsão	repulsão	repulsão	repulsão
2,0	repulsão	-136	-69	-42	-33	-33
2,5	-56	-37	-30	-29	-26	-25
3,0	-18	-10	-7	-6	-5	-4

A impureza magnética repulsiva produz uma barreira de potencial que reduz a velocidade da PDT ao passar sobre ela. Quantitativamente, percebemos que a medida que retiramos a impureza magnética da posição $y/a = -2,5$ e a movemos em direção a posição $y/a = +2,5$, como a barreira de potencial entre a PDT e a impureza diminui, a variação na velocidade também decresce. Para todas as posições, um campo magnético de amplitude de 0,1 até 1,5 mT não é capaz de fornecer uma energia cinética à PDT maior que a barreira de potencial provocada pela impureza. Refinando esse resultado, encontramos que a amplitude de 1,7 mT é a máxima que não ultrapassa a barreira, ou seja, permite a repulsão da PDT pela impureza magnética

$J'/J = 2,5$ em todas as posições do nanofio cuja largura é 25 nm. Vemos que a impureza localizada na posição $y/a = -2,5$ é a única que repele a PDT sob a aplicação de um campo magnético de 2,0 mT. Tal amplitude fornece uma energia necessária para “romper” a barreira de potencial das demais posições em y/a , mesmo reduzindo muito a sua velocidade. Através do gráfico de velocidade na figura 5.47, podemos verificar que 2,0 mT para a posição $y/a = -1,5$ é capaz de fornecer energia suficiente para a PDT ultrapassar a barreira de potencial, porém a PDT quase para ao encontrar a impureza repulsiva.

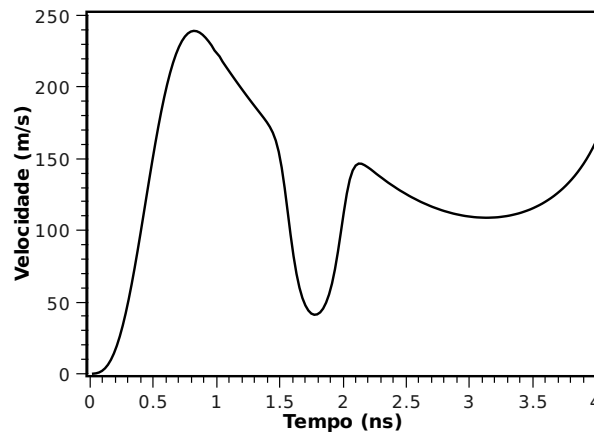


Figura 5.47: Velocidade da PDT em função do tempo para um campo magnético de amplitude 2,0 mT e uma impureza magnética repulsiva em $y/a = -1,5$.

Assim como uma impureza magnética atrativa inserida nas posições de $y/a = -0,5$ a $y/a = 2,5$ apresentam dois mínimos de energia de interação, analogamente, uma impureza magnética repulsiva apresenta dois máximos locais. A figura 5.48 mostra as particularidades da variação da velocidade da PDT ao ultrapassar a impureza em $y/a = -0,5$ em (a) e $y/a = +1,5$ em (b). Inicialmente a PDT encontra a barreira repulsiva provocada pela impureza magnética e diminui sua velocidade. Uma vez que a PDT ultrapassou a barreira, ela cai em um mínimo local existente entre os dois máximos de energia, o que tende a aumentar sua velocidade instantaneamente. Como esse mínimo é da ordem de apenas 0,03 eV, não percebe-se um aumento, e sim uma menor inclinação da curva exatamente no meio da variação ΔV . Logo a PDT atinge o segundo máximo de energia tendendo a uma maior inclinação da curva novamente. Tanto em $y/a = -0,5$, quanto em $y/a = 1,5$ essa variação torna-se praticamente imperceptível. Apenas em nanofios de larguras maiores as alterações mencionadas se tornam expressivas.

As larguras de cada ΔV são as mesmas especificadas para a impureza atrativa, indo de acordo com o alcance do potencial da interação para cada posição y/a .

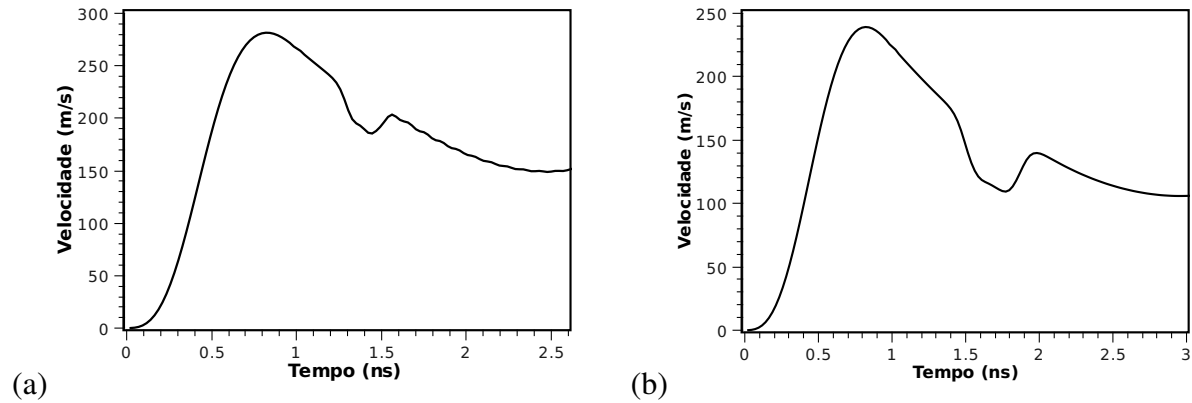


Figura 5.48: Gráficos da velocidade da PDT que se move sob a ação de um campo de 2,0 mT em um nanofio de $10 \times 25 \times 1255$ nm com uma impureza atrativa em $y/a = -0,5$ em (a) e, $y/a = 1,5$ em (b).

5.4.4 Comparando nanofios de larguras diferentes

As paredes de domínio sob a ação de um campo magnético se movem com velocidades diferentes em nanofios com larguras diferentes. Na seção 5.3.3, verificamos que quanto maior o valor de w do nanofio, menor é o potencial de interação com a impureza magnética, e maior é o seu alcance. Fizemos uma comparação entre a variação na velocidade da PDT ao passar pela região de uma impureza magnética fixa, variando os valores da largura do nanofio entre 10 e 30 nm. Nesse estudo, posicionamos a impureza magnética em $x/a = 50,5$ e $y/a = -0,5$ w ímpares e $y/a = 0$ para w pares. As amplitudes de campo magnético foram variadas entre 0,5 mT e 3,0 mT e os resultados de ΔV obtidos para a impureza atrativa do tipo $J'/J = 0,7$ estão apresentados na tabela 5.7.

Tabela 5.7: Variação da velocidade da PDT em m/s ao passar pela impureza atrativa $J'/J = 0,7$.

$\mu_0 H_{ap}$ (mT)	largura w do nanofio (nm)				
	10,0	15,0	20,0	25,0	30,0
0,5	aprisiona	+11	+6	+2	$\simeq 0$
1,0	+34	+22	+8	+3	$\simeq 0$
1,5	+26	+19	+9	+2	$\simeq 0$
2,0	+18	+9	+2	$\simeq 0$	$\simeq 0$
2,5	+7	+5	+1	$\simeq 0$	$\simeq 0$
3,0	+3	+1	+1	$\simeq 0$	$\simeq 0$

De uma maneira geral os resultados na tabela 5.7 nos mostram que a alteração na velocidade é tanto mais significativa quanto menor for a largura do nanofio. Nos nanofios com larguras menores, a energia de interação passa a ser maior, como discutimos na seção 5.3.3. Por isso, percebemos maiores variações de velocidade no nanofio de $w = 10$ nm, seguido respectivamente pelos nanofios de $w = 15$ e 20 nm. Em $w = 30$ nm uma impureza única torna a alteração na velocidade imperceptível para todas as amplitudes de campo magnético mostradas. Isto ocorre devido a considerável redução na energia de interação entre PDT e impureza e, podemos verificar esse resultado comparando os gráficos de velocidade da figura 5.49 para nanofios de diferentes larguras. Outro fato que contribui significativamente para não percebermos alterações na velocidade da PDT no nano fio de $w = 30$ nm, é que a impureza escolhida J' possui um valor muito próximo ao da constante de troca J , uma vez que $J'/J = 0,7$. Ou seja, não há uma interação forte entre a impureza magnética e a PDT como nos demais valores de impurezas escolhidos anteriormente. Ainda, o surgimento de oscilações na velocidade da PDT tornam uma alteração pequena na velocidade imperceptível. Ou seja, uma interação fraca somada a um nanofio de maior largura resulta em alterações de velocidade imperceptíveis.

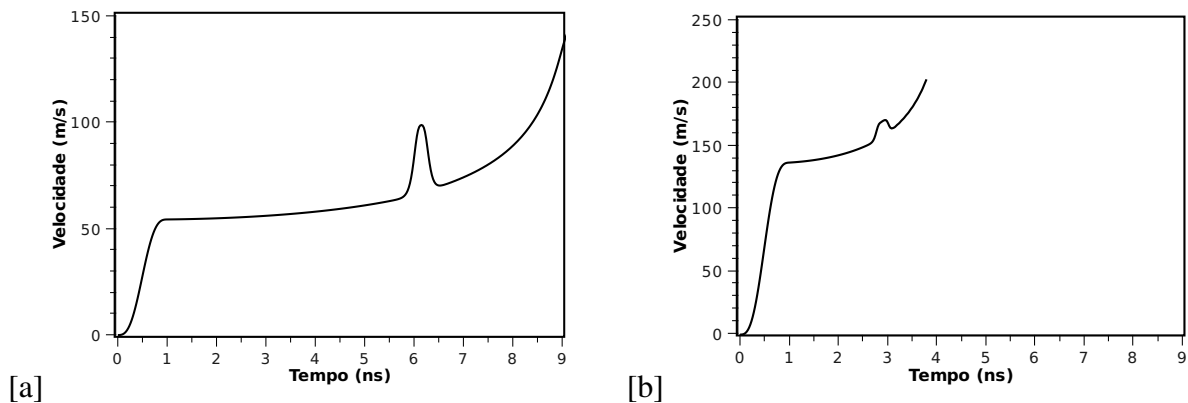


Figura 5.49: Gráficos da velocidade da PDT em função do tempo sob a ação de um campo magnético de amplitude 1,0 mT. Em (a) temos um nanofio de $w = 10$ nm e em (b) um nanofio de $w = 20$ nm.

Com relação ao pulso de campo magnético aplicado, a tabela 5.7 nos fornece um padrão nos resultados de alteração da velocidade. Para campos de magnitude entre 1,0 mT e 2,0 mT a velocidade da PDT sofre um aumento instantâneo ao passar pela impureza. Tal fato foi explicado como sendo a interação do poço de potencial atrativo sob a PDT quando ela “cai” dentro dele. O gráfico de velocidade para o campo magnético de amplitude igual a 3,0 mT também apresenta oscilações, o que torna a identificação de ΔV mais difícil. No entanto, quando são distinguíveis, as variações na velocidade são pequenas. O fato da impureza J' ter um valor mais próximo de J nesse estudo sobre as larguras do nanofio, também contribui para os valores de variação da velocidade serem mais reduzidos. E ainda, o posicionamento de uma impureza magnética próximo a $y/a = 0$ também apresenta uma menor interação, logo uma menor

alteração na velocidade.

Assim como fizemos anteriormente com a inclusão de uma impureza atrativa, escolhemos agora uma impureza repulsiva $J'/J = 1,5$ inserida na mesma posição reservada a impureza atrativa acima. Também analisamos as alterações na velocidade da PDT nos nanofios de 10 a 30 nm de largura sob um pulso de campo magnético de amplitudes entre 0,5 e 3,0 mT. Os resultados se encontram na tabela 5.8.

Tabela 5.8: Variação da velocidade da PDT na nanofio em m/s ao passar pela impureza $J'/J = 1,5$.

$\mu_0 H_{ap}$ (mT)	largura w do nanofio (nm)				
	10,0	15,0	20,0	25,0	30,0
0,5	bloqueio	bloqueio	-24	-16	-8
1,0	bloqueio	-40	-16	-7	-4
1,5	-56	-22	-7	-4	$\simeq 0$
2,0	-45	-10	-4	$\simeq 0$	$\simeq 0$
2,5	-26	-5	-3	$\simeq 0$	$\simeq 0$
3,0	-4	-3	-2	$\simeq 0$	$\simeq 0$

Os resultados gerais encontrados para a impureza magnética atrativa se estendem a impureza repulsiva. Quanto maior for a largura do nanofio, menor se torna a variação da velocidade da PDT. Este fato também se justifica pela diminuição na energia de interação entre a PDT e impureza. Para o nanofio de $w = 30$ nm vários campos magnéticos não são capazes de tornar a alteração na velocidade perceptível. No nanofio de largura 25 nm os campos magnéticos de 2,0 a 3,0 mT, onde a alteração da velocidade da PDT seria muito pequena, também não revelam tais alterações, ou apresentam oscilações de velocidade que as tornam imperceptíveis.

As amplitudes de campo de 0,5 a 2,5 mT movem a PDT até a impureza magnética, que devido ao seu potencial repulsivo, bloqueia a passagem da PDT ou reduz a sua velocidade. O gráfico de velocidade da PDT sob a ação de um pulso de amplitude 3,0 mT também apresenta muitas oscilações após a PDT ultrapassar a impureza, e de qualquer forma, quando ΔV é percebido, apresenta um aumento instantâneo pequeno.

5.4.4.1 Mais de uma impureza sobre o nanofio

Com o intuito de verificar se a presença de uma impureza magnética não afetaria os efeitos de outra impureza magnética inserida no mesmo nanofio, porém distante da primeira, distribuímos 4 impurezas locais sobre o nanofio de $w = 25$ nm. A princípio fixamos tais impurezas repulsivas $J'/J = 1,5$ sobre o eixo x/a nas posições 23,5, 41,5, 65,5 e 80,5 e sobre o eixo y/a todas foram colocadas em +0,5 como mostra a figura 5.50. As distâncias escolhidas sobre o eixo x/a respeitam o alcance da interação entre a PDT e cada impureza, sendo no mínimo $13a$ o afastamento entre elas. Aplicamos um pulso de 1,0 mT sabendo que sob essa amplitude a PDT não é repelida por esse valor de impureza magnética. O gráfico de velocidade da PDT é mostrado na figura 5.51, onde confirmamos que a presença da impureza magnética provoca um efeito apenas local no nanofio, alterando a velocidade da PDT apenas instantaneamente ao passar sobre cada impureza.

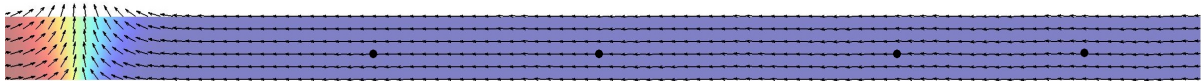


Figura 5.50: Posição escolhida para quatro impurezas magnéticas em um mesmo nanofio.

Na ordem em que dispomos as impurezas sobre o nanofio, percebemos uma diminuição na velocidade respectivamente de, 12 m/s, 24 m/s, 10 m/s e 6 m/s. Quando a PDT passa sobre a região da primeira impureza magnética, o pulso de campo ainda está ligado, o que torna a percepção da impureza suavizada pela ação do campo magnético. Ao atingir a segunda impureza local, o pulso de campo já deixou de atuar e percebemos um maior ΔV . Nas impurezas seguintes, a PDT já se aproxima da borda do nanofio, e a elevação na sua velocidade em todo esse percurso também faz com que a percepção do potencial da impureza seja suavizada.

O gráfico 5.52 (a) revela a velocidade da PDT sobre um nanofio de largura 20 nm com as mesmas 4 impurezas magnéticas nos mesmos locais. Os efeitos de cada impureza local são os mesmos comentados para o nanofio de largura 25 nm, e como a interação aumenta com a diminuição da largura, há uma mudança maior em todos os valores de ΔV . Apenas para comparação as diminuições na velocidade da PDT na ordem em que aparecem as impurezas são, 26 m/s, 40 m/s, 22 m/s e 16 m/s. Pulsos de campo de 2,0 e 2,5 mT também foram aplicados sobre os mesmos nanofios, porém as alterações na velocidade foram muito pequenas e se misturaram às pequenas oscilações da velocidade, como mostra o gráfico da mesma figura em (b) para um pulso de 2,0 mT.

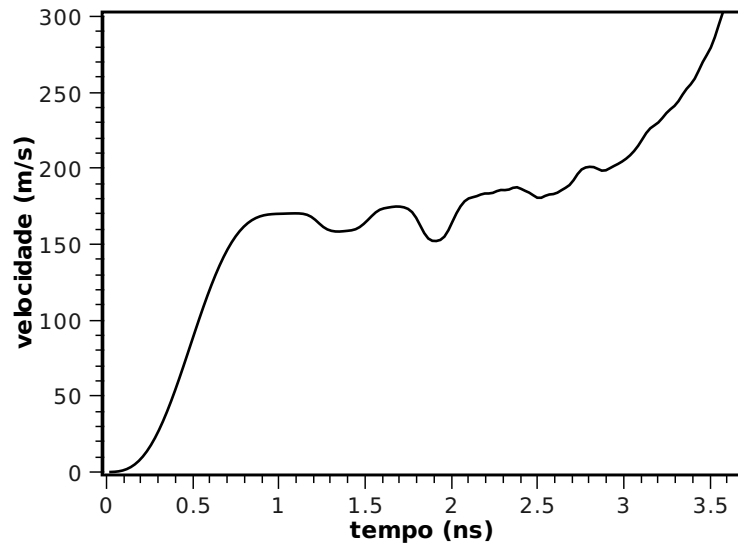


Figura 5.51: Velocidade da PDT em função tempo sob a ação de um campo magnético de amplitude 1,0 mT em um nanofio de 25 nm de largura com 4 impurezas locais repulsivas.

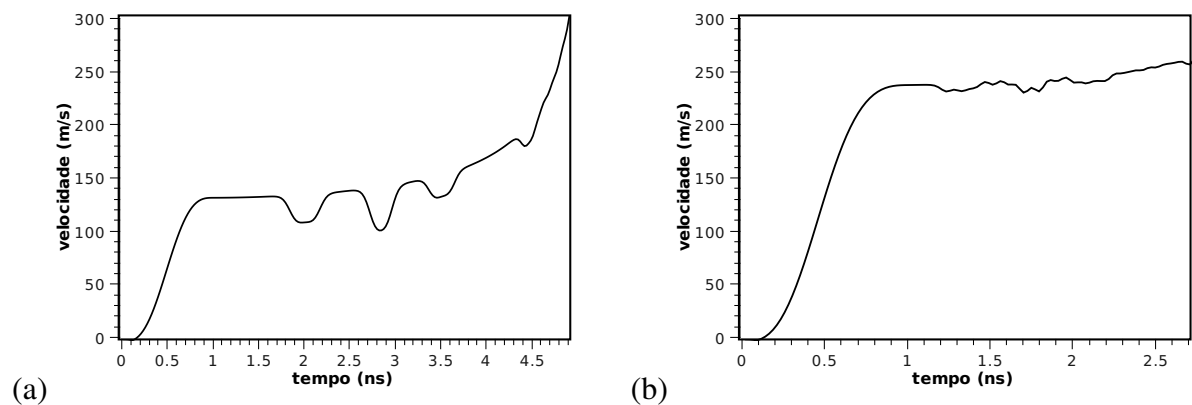


Figura 5.52: Gráficos da velocidade da PDT em função do tempo em um nanofio de largura 20 nm com 4 impurezas locais repulsivas sob a ação de um campo magnético de amplitude em (a) de 1,0 mT e em (b) de 2,0 mT.

Percebemos que a região que proporciona uma maior alteração instantânea na velocidade da PDT se aproxima de $x/a = 60,5$, ou seja, em um nanofio de comprimento L variando entre $-125a$ e $+125a$, uma região próxima a $L/4$. Logo, a região que se aproxima do valor médio entre o centro de nanofio e a sua borda, possibilitam uma maior percepção da impureza magnética. Obviamente, este resultado só é válido se o pulso de campo aplicado tiver finalizado ao chegar nessa região.

5.4.5 Variando o tipo de impureza magnética

Assim como os valores diferentes da constante de troca J' levam a diferentes valores na energia de interação entre a impureza magnética e a parede de domínio, os efeitos sobre a dinâmica da PDT também dependem de J' . Como vemos nas figuras 5.27 e 5.31 para uma impureza atrativa e outra repulsiva respectivamente, quanto mais próximo o valor de J'/J for de 1, menor o potencial de interação. Apenas para comparação, escolhemos a amplitude de campo de 2,0 mT e inserimos uma impureza magnética com vários valores diferentes de J'/J em $(\frac{x}{a}, \frac{y}{a}) = (50,5, -2,5)$ em um nanofio de $w = 25$ nm, e mostramos os valores de alteração na velocidade da PDT ao passar pela impureza na tabela 5.9.

Tabela 5.9: Variação da velocidade da PDT em m/s sob a ação de um pulso de campo magnético de 2,0 mT em um nanofio de 25 nm para vários J'/J .

	impureza magnética atrativa					impureza magnética repulsiva				
J'/J	0,2	0,3	0,5	0,7	0,8	1,2	1,5	2,0	2,5	3,0
ΔV	+75	+64	+47	+31	+2	-2	-47	-103	repele	repele

Podemos perceber que para a impureza atrativa, ΔV aumenta a medida que o valor de J'/J diminui. Analogamente, para a impureza repulsiva, quanto maior for a relação J'/J , maior será a variação na velocidade da PDT, podendo até mesmo ocorrer o bloqueio da mesma pela repulsão provocada pela impureza. Outro fato percebido, é que impurezas atrativas e repulsivas que possuem a mesma relação $|1 - (J'/J)|$, ou seja, que possuem a mesma amplitude em relação ao número 1, irão apresentar o mesmo módulo de ΔV na propagação da PDT. Por exemplo, ambos os valores para a impureza magnética $J'/J = 0,5$ e $J'/J = 1,5$, apresentam $|\Delta V| = 47$ m/s, sendo obviamente um aumento para a impureza atrativa e uma redução para a impureza repulsiva. Este fato nos mostra que o efeito da impureza atrativa e repulsiva cujo valores $|1 - (J'/J)|$ sejam iguais, possuem a mesma intensidade de interação.

Os vários tipos de J'/J devem ser escolhidos de acordo com o resultado esperado no experimento. Se o objetivo for repelir a PDT quanto maior o valor de J'/J mais facilmente se alcança esse objetivo, em qualquer posição da impureza ou largura do nanofio. Se, por outro lado, pretende-se aprisionar a PDT em uma posição pré-definida, quanto menor for o valor de J'/J , mais facilmente a PDT será aprisionada.

No que diz respeito a velocidade da PDT, pode-se controlar o valor de uma alteração instantânea, escolhendo-se a impureza J'/J mais apropriada.

5.4.6 Um “cluster” de impurezas de dimensões $10 \times 10 \times 10$ (nm)³

Nas tabelas 5.7 e 5.8 verificamos que os valores de J'/J utilizados não provocaram efeitos perceptíveis no nanofio de largura 30 nm para determinados valores de campo magnético, e consequentemente não alterarão a dinâmica da PDT em todos os nanofios cuja largura seja superior a essa. Há duas maneiras de provocar em nanofios mais largos os efeitos de atração ou repulsão pela impureza magnética. Uma delas é utilizar uma impureza magnética $J'/J \sim 0$ no caso da atração, ou J'/J cada vez maiores para que haja repulsão, como mencionamos na seção 5.4.5. Outra maneira seria a inclusão de um “cluster” de impurezas, como sugerido na seção 5.3.4. Em um nanofio de largura 45 nm introduzimos um “cluster” de impurezas ocupando 4 células da rede e verificamos se houve interferência na dinâmica da PDT.

Inicialmente, uma impureza atrativa $J'/J = 0,2$ em uma célula na posição $(\frac{x}{a}, \frac{y}{a}) = (50,5, -4,5)$ só produz o efeito de aprisionamento da PDT sob um campo de amplitude de até 1,0 mT, o qual move a PDT com uma velocidade inferior a 200 m/s. A partir de uma amplitude de 1,0 mT, a PDT ultrapassa a impureza sendo possível detectar seus efeitos na variação da velocidade da PDT. Quando substituímos a impureza de uma única célula por uma impureza quadrada, que ocupe 4 células adjacentes, os resultados são atenuados. A impureza é capaz de aprisionar a PDT mesmo quando elas se movem sob a ação de um campo magnético de amplitude até 1,5 mT. Os gráficos da figura 5.53 mostram ΔV para a PDT ao ultrapassar uma impureza em uma única célula em (a) e ao ultrapassar um “cluster” de impurezas em (b), ambos sob a ação de um campo magnético de 2,0 mT. A atenuação na alteração da velocidade é percebida tanto no aumento de ΔV ao se aproximar do cluster de impurezas, quanto na brusca diminuição da velocidade após ultrapassar a impureza. Para a largura de $w = 45$ nm do nanofio nos gráficos da figura o pulso de amplitude 2,0 mT já inicia as oscilações da velocidade da PDT após passar sobre a região da impureza.

Da mesma forma, realizamos a mesma comparação entre impurezas magnéticas repulsivas. Uma impureza $J'/J = 2,5$ de uma única célula na mesma posição em um nanofio de 45 nm é capaz de repelir a PDT quando ela se move sob um campo de amplitude de até 1,0 mT. No entanto, se inserirmos uma impureza magnética da extensão de 4 células adjacentes, mesmo sob a ação de um pulso de 1,5 mT a PDT é bloqueada. Pulsos com amplitude de 2 mT movem a PDT, que ao passar sobre a região da impureza apresenta uma redução na sua velocidade de 42 m/s ao ultrapassar uma impureza magnética de uma única célula (figura 5.54 (a)) e 64 m/s ao ultrapassar um “cluster” de impurezas (figura 5.54 (b)). Após a PDT passar sobre a região de impureza magnética começamos a perceber oscilações na velocidade.

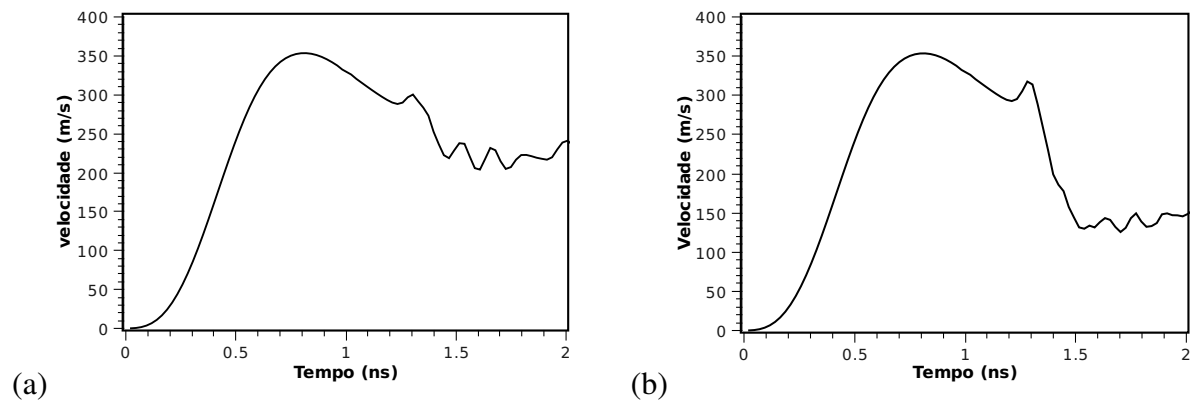


Figura 5.53: Gráficos da velocidade da PDT em função do campo sob a aplicação de um campo magnético de amplitude 2,0 mT com uma impureza magnética atrativa de uma única célula em (a) e uma impureza atrativa ocupando 4 células em (b). A PDT ultrapassa a impureza magnética em 1,3 ns.

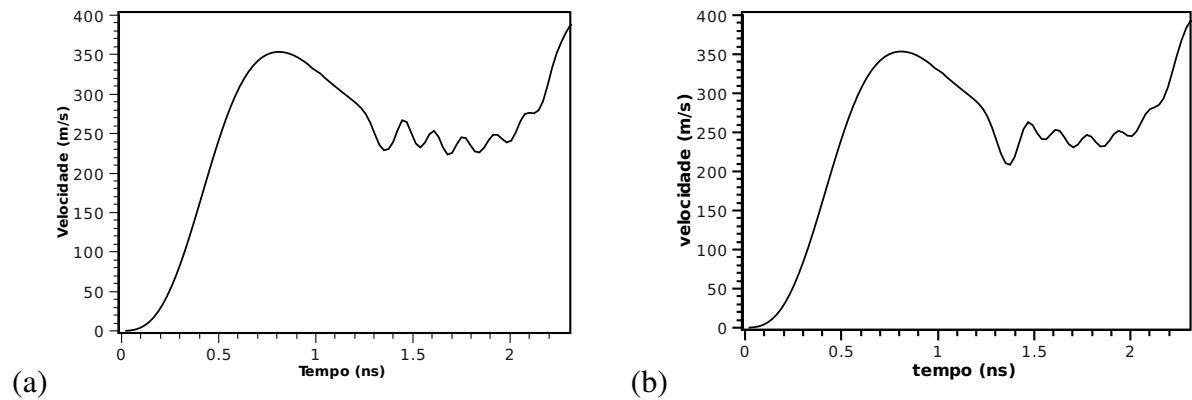


Figura 5.54: Gráficos da velocidade da PDT em função do tempo sob a aplicação de um campo magnético de amplitude 2,0 mT com uma impureza magnética ocupando uma única célula em (a) e um “cluster” de impurezas em (b). A PDT ultrapassa a impureza em 1,38 ns.

5.4.7 Campo de “*depinning*” da parede de domínio transversal

Uma impureza magnética atrativa pode ser utilizada no nanofio magnético para fixar a PDT em uma determinada região, limitando o comprimento dos domínios no fio. Uma aplicação tecnológica que se utiliza da PDT como um dispositivo de memória ou como um dispositivo lógico, necessita ter controle sobre o seu posicionamento no nanofio. Desta forma, uma impureza atrativa aprisiona a PDT, e um pulso de campo magnético pode liberar essa PDT e levá-la para uma nova posição de equilíbrio, podendo ser uma nova impureza magnética ou outro potencial de interação introduzido no nanofio, como os cortes ou protusões sugeridos nas referências [31, 30, 32]. Nesse contexto, escolhemos um nanofio com uma impureza atrativa e uma PDT inicialmente aprisionada a ela e verificamos o pulso de campo necessário para que essa PDT consiga se desprender da impureza. Do inglês o termo que define esse campo magnético é

“*depinning*”, e nesse trabalho o campo de “*depinning*” representa o campo magnético mínimo necessário a liberação da PDT da impureza atrativa. Dos nossos estudos anteriores podemos dizer que o campo de “*depinning*” da PDT depende fortemente do valor J'/J da impureza magnética e das dimensões do nanofio, e depende mais fracamente do posicionamento da impureza sobre o nanofio.

Fixamos o valor da impureza atrativa inicialmente em $J'/J = 0,5$, e com uma PDT aprisionada por uma impureza em $y/a = -w/a$, testamos o campo de “*depinning*” para os nanofios de larguras 10, 15, 20, 25, 30 e 85 nm. Identificamos que o pulso que libera a PDT em cada nanofio é respectivamente, 7,2, 4,6, 3,3, 2,5, 2,0 e 1,5 mT. A figura 5.34 nos mostrou que o potencial de interação entre um impureza magnética e a PDT varia com a largura do nanofio de acordo com uma função exponencial. Como o campo de “*depinning*” da PDT depende diretamente do potencial de interação, imaginamos que a sua dependência com a largura do nanofio deve ter uma relação semelhante. Vimos que na figura 5.34 que a relação entre o potencial de interação e a largura do nanofio é um decaimento exponencial, então esperamos que o campo de “*depinning*” da PDT varie com a largura do nanofio obedecendo também a uma relação de decaimento, na qual o seu valor diminui com a largura do nanofio. Com os seis valores encontrados acima, fizemos um gráfico do campo de “*depinning*”, H_{dep} , em função da largura do nanofio w/a e encontramos o decaimento exponencial que representa essa dependência. O gráfico da figura 5.55 mostra esse ajuste exponencial e a função que determina que mais se ajusta aos dados é dada por:

$$H_{des} = H_0 + Ae^{\frac{-w/a}{c}} \quad (5.4.1)$$

em que $H_0 = 1,49$ mT é o campo mínimo para a liberação da PDT para a impureza $J'/J = 0,5$ e as constantes para o ajuste para esse valor de impureza são $A = 18,4$ mT e $c = 1,70$ adimensional. O erro no ajuste é de $\pm 0,07$ mT.

Utilizamos a equação 5.4.1 para encontrar o campo de “*depinning*” para outras três larguras de nanofio, $w = 45, 55$ e 90 nm, e obtivemos $H_{dep} = 1,58, 1,51$ e $1,49$ mT, respectivamente. Reproduzimos valores próximos a esses em nossas simulações e encontramos para a PDT nos nanofios referidos de larguras 45, 55 e 90 nm, $H_{dep} = 1,6, 1,5$ e $1,5$ mT, respectivamente. Nossos valores concordam com o resultado encontrado uma vez que só variamos o campo magnético até primeira casa decimal em unidades de mT. Confirmamos que o campo de “*depinning*” é realmente o valor apontado no gráfico 5.55 para a posição e impureza indicadas. Este resultado é de grande importância, pois uma vez conhecido o valor do campo de “*depinning*” da PDT é possível manipular sua posição e deslocamento sobre o nanofio magnético.

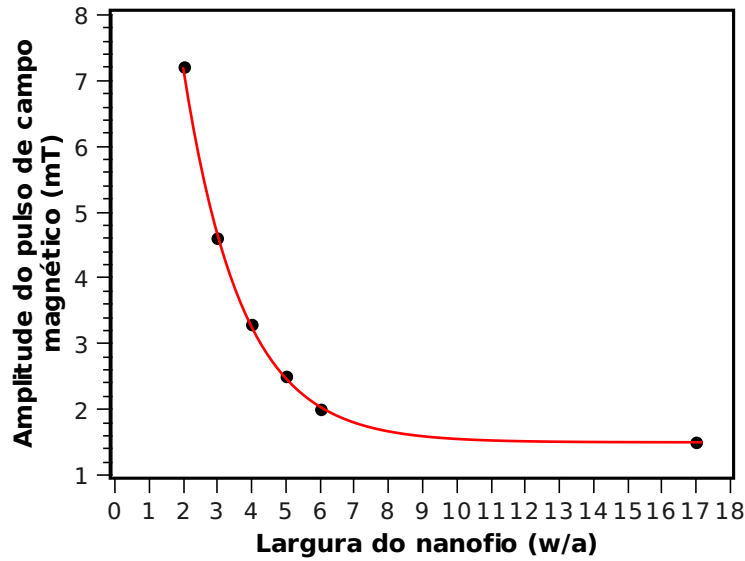


Figura 5.55: Campo de “*depinning*” H_{dep} da PDT em uma impureza atrativa $J'/J = 0,5$ na posição $y/a = -w/a$ em função da largura do nanofio.

Se a impureza magnética que aprisiona a PDT for inserida em outra posição no eixo y/a , sabemos que o potencial de interação irá variar, logo o campo de “*depinning*” da PDT também muda. Porém, o perfil da interação continua obedecendo uma relação exponencial com a largura do nanofio como a mostrada na figura 5.55. Então podemos dizer que o perfil da dependência do campo de “*depinning*” com a largura do nanofio será o mesmo apresentada a figura 5.55 para qualquer posição y/a escolhida para a impureza atrativa, apenas os valores do campo magnético serão alterados proporcionalmente à curva.

Quando a PDT já se encontra em movimento devido a pulso de campo magnético e posteriormente encontra a região de impureza magnética atrativa, o valor de campo magnético que faz com que ela ultrapasse essa impureza não é igual ao campo de “*depinning*”. Se a impureza já se move ao encontrar a impureza atrativa, ela já possui uma energia cinética inicial e por isso, um pulso de campo magnético inferior ao campo de “*depinning*” é capaz de fazê-la vencer o poço de potencial da impureza.

Se, por outro lado, pretendemos fixar agora uma largura para um nanofio e variarmos o valor da impureza atrativa J'/J , podemos encontrar uma relação do campo de “*depinning*” com o valor da impureza. Para isso, escolhemos os nanofios de larguras $w = 10$ e 25 nm e fixamos a impureza em $y/a = -w/(2a)$ (polo sul da PDT) no centro do nanofio em $x/a = 0,5$, onde a PDT encontra-se aprisionada. A relação encontrada entre o campo de “*depinning*” e o valor de J'/J pode ser vista nas figuras 5.56 em (a) para $w = 10$ nm e em (b) para $w = 25$ nm. Percebemos que o ajuste dos pontos nos fornece uma relação de decaimento exponencial do

tipo $H_{des} = H_0 + A e^{-J'/J}$. É fácil notar também que quanto maior a largura do nanofio, menor será o campo de “*depinning*”.

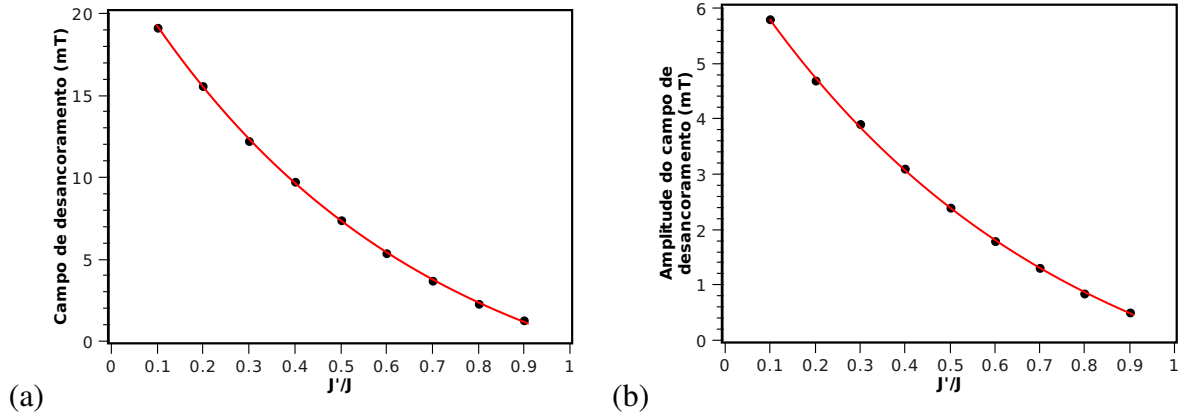


Figura 5.56: Campo de “*depinning*” em função do valor J'/J para uma impureza atrativa em um nanofio de largura 10 nm em (a) e 25 nm em (b) inserida no polo sul da PDT.

5.4.8 Espalhamento da parede de domínio transversal

Assim como uma impureza magnética atrativa pode ser usada na determinação e manipulação do posicionamento da PDT em um nanofio, a impureza magnética repulsiva também pode ser utilizada com o mesmo intuito. Uma impureza repulsiva limita o posicionamento de uma PDT a uma porção do nanofio, dependendo do valor de campo magnético que a move. Podemos inicialmente, em um nanofio com uma PDT no centro e um impureza magnética repulsiva afastada da PDT, aplicarmos um campo magnético com uma amplitude baixa, para a PDT não ultrapassar a região da impureza. Sabemos que a PDT ao se aproximar da impureza é repelida por ela e fica em equilíbrio estático em uma região próxima a ela. Podemos inserir uma nova impureza magnética sobre o nanofio com valor J'/J diferente de forma que um campo magnético que permita que a PDT ultrapasse o potencial de repulsão de uma impureza, não seja suficiente para ultrapassar o potencial de outra, ou vice-versa. Desta forma, podemos aprisionar uma PDT em uma região entre duas impurezas.

Estendendo esse resultado à inclusão de várias impurezas magnéticas ao longo do comprimento do nanofio percebemos que surge uma gama de possíveis posições bem definidas da PDT através da escolha do campo magnético aplicado sobre o eixo x . Assim como determinamos o campo de “*depinning*” com relação a largura do nanofio e ao valor da impureza magnética atrativa, esses resultados podem ser estendidos à impureza magnética repulsiva. O referido campo

de “*depinning*” para a impureza atrativa tem como análogo o campo de ultrapassagem, H_{ult} , para a impureza repulsiva, que representa o campo magnético mínimo capaz de mover a PDT do repouso e fazê-la ultrapassar uma impureza magnética repulsiva. Os valores encontrados no gráfico da figura 5.55 são os mesmos para aquelas impurezas cuja relação $|1 - (J'/J)|$ tenha o mesmo valor. Ou, de outra forma, para as impurezas magnéticas cujo valor $|1 - (J'/J)|$ seja igual, o campo de “*depinning*” é igual ao campo de ultrapassagem. Esse resultado só é válido se a impureza magnética repulsiva estiver próxima a PDT quando ela inicia o movimento, pois uma vez que a PDT já está em movimento ao atingir a impureza repulsiva, o campo de ultrapassagem se torna menor que o campo de “*depinning*”.

A relação obtida nas figuras 5.56 (a) e (b) também são válidas para o campo de ultrapassagem, ou seja, a relação entre o campo de ultrapassagem e o valor J'/J obedece exatamente a mesma função se substituirmos uma impureza atrativa por uma impureza repulsiva cujo valor $|1 - (J'/J)|$ seja igual.

Assim como D. A. Allwood *et al.* [5] sugeriram um dispositivo lógico baseado em fios magnéticos que contém várias junções e a aplicação de um campo magnético rotacional no tempo move a PDT através delas, podemos utilizar as impurezas magnéticas como um análogo a essas junções. As duas regiões de domínios magnéticos são a base para a representação da informação binária e a parede de domínio funciona como a transição do sinal. As operações lógicas são realizadas através da manipulação das paredes de domínio que atravessam as impurezas magnéticas atrativas ou repulsivas.

5.4.9 Inversão da polaridade da PDT por uma impureza magnética atrativa

Ao analisar a variação da velocidade da PDT ao passar sobre a região onde se encontra uma impureza magnética, verificamos que amplitudes de campo magnético maiores que, aproximadamente, 3,0 mT provocam oscilações na velocidade da PDT. A presença da impureza gera uma interação local que afeta o movimento da PDT mesmo após passar sobre ela. Percebendo que apenas amplitudes de campo acima do campo de Walker provocam essas alterações, aplicamos na direção $+x$ do eixo do nanofio campos magnéticos de amplitudes maiores, porém não tão grandes para provocar o movimento de nucleação descrito na seção 5.2.3 e mostrado pela figura 5.17. Para determinadas amplitudes de campo magnético percebemos que a impureza magnética atrativa é capaz de bloquear a passagem da PDT e, além disso, inverter o sentido da sua polarização. Este efeito pode ser visto na sequência temporal da figura 5.57 para um nanofio de

$w = 20$ nm e um pulso de campo magnético de amplitude 9 mT. Um campo magnético elevado ao mover a PDT provoca oscilações na sua largura e na magnetização.

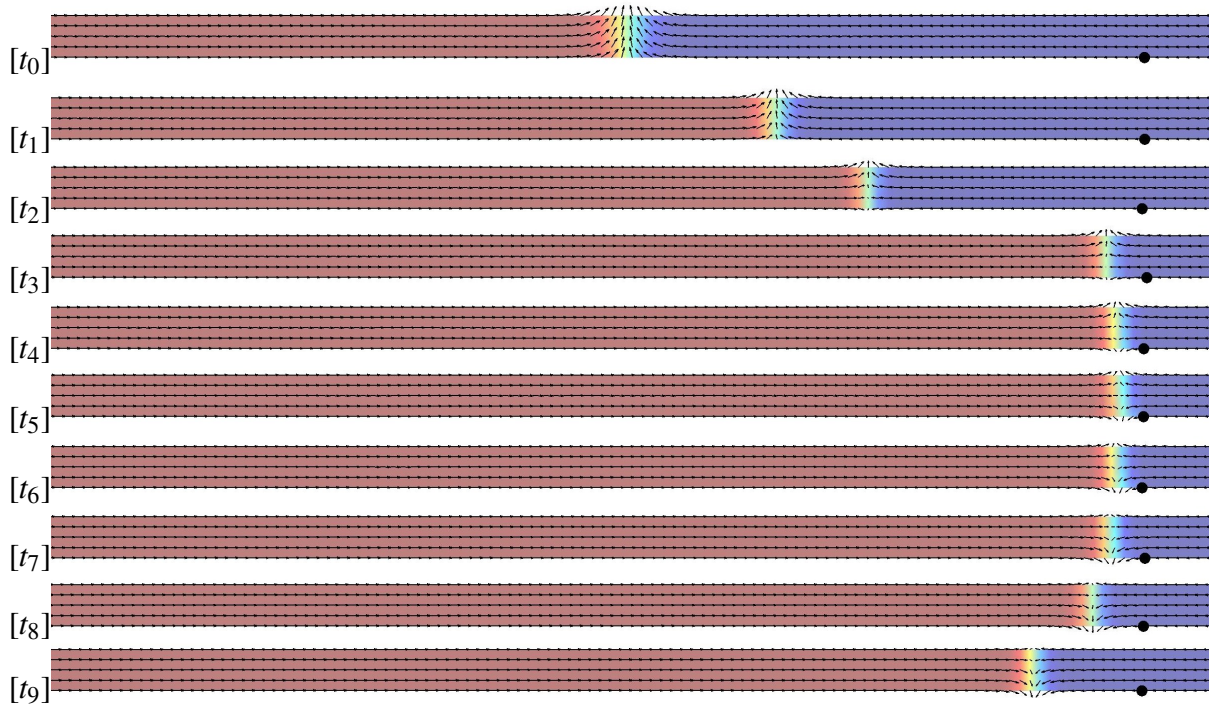


Figura 5.57: Sequência de movimento da PDT em um nanofio de $w = 20$ nm sob a aplicação de um pulso de campo magnético de 9 mT. A impureza atrativa $J'/J = 0,2$ inverte a polarização da PDT.

A PDT passa a apresentar um aumento na magnetização no eixo z . Através da criação de um antivórtice na borda inferior do nanofio, a magnetização nessa região tende a sair do plano. Como a amplitude de campo não é capaz de mover o antivórtice em direção à borda superior do nanofio, como descrito na seção 3.18, ele fica estagnado nessa região da PDT e se move com ela no sentido $+x$. Quando a PDT atinge a região da impureza magnética, o antivórtice interage com a impureza. A magnetização que se encontrava no eixo $+z$ é desviada em direção ao sentido do eixo $-y$. Desta forma inicia-se a inversão da polaridade da parede de domínio do eixo $+y$ para o eixo $-y$ e a PDT passa a percorrer o nanofio no sentido contrário. A figura 5.58 mostra a trajetória da PDT vista sob um ângulo do nanofio que nos permite visualizar a magnetização no eixo z . É possível perceber que quando a PDT é bloqueada pela impureza atrativa a magnetização na borda inferior da PDT se move do eixo $+z$ para o eixo $-y$ e a polaridade da PDT é então invertida. O gráfico da figura 5.59 mostra a magnetização do nanofio no eixo y em função do tempo, e podemos verificar que em $t \simeq 2$ ns, instante em que a PDT está mais próxima da impureza magnética, a PDT inverte a magnetização.

Em nanofios de maiores larguras, essa inversão da polaridade também acontece, porém a partir de $w = 40$ nm é necessário a inclusão de um cluster de impurezas magnéticas atrativas para que o efeito ocorra. A amplitude de campo que provê essa inversão na polarização depende do

nanofio. Para nanofios de larguras 10 e 15 nm a amplitudes de campo que promove esse efeito é 7 mT, e para nanofios de larguras 20, 25 e 30 nm temos que 9 mT é capaz de promover a inversão da PDT. À medida que se aumenta o cluster de impurezas em nanofios mais largos, o campo necessário a inversão da polaridade da PDT se torna um pouco menor.

Quando a impureza localizada no nanofio é repulsiva, um novo efeito instantâneo é observado. Ao se aproximar da região de impureza, grande parte da magnetização da PDT aponta no sentido do eixo $+z$. No entanto, a impureza magnética repulsiva tende a direcionar a magnetização da PDT de volta sobre o plano xy no sentido de $+y$, retornando a magnetização da PDT momentaneamente a seu estado original. Como consequência, a largura Δ da PDT aumenta durante a sua passagem sobre a impureza.

Utilizar a impureza magnética atrativa como agente capaz de modificar a polarização da PDT pode ter uma importante aplicação tecnológica, onde ao invés do sentido da magnetização dos domínios codificar os “bits”, teríamos como codificação a polaridade da parede de domínio. Este efeito já foi proposto por Tretiakov *et al.* [9] onde na sua versão, a inversão da polaridade se dá através de uma corrente elétrica de spin polarizada em um nanofio com um formato diferenciado. A densidade de armazenamento de informações se tornaria muito superior a capacidade dos dispositivos atuais.

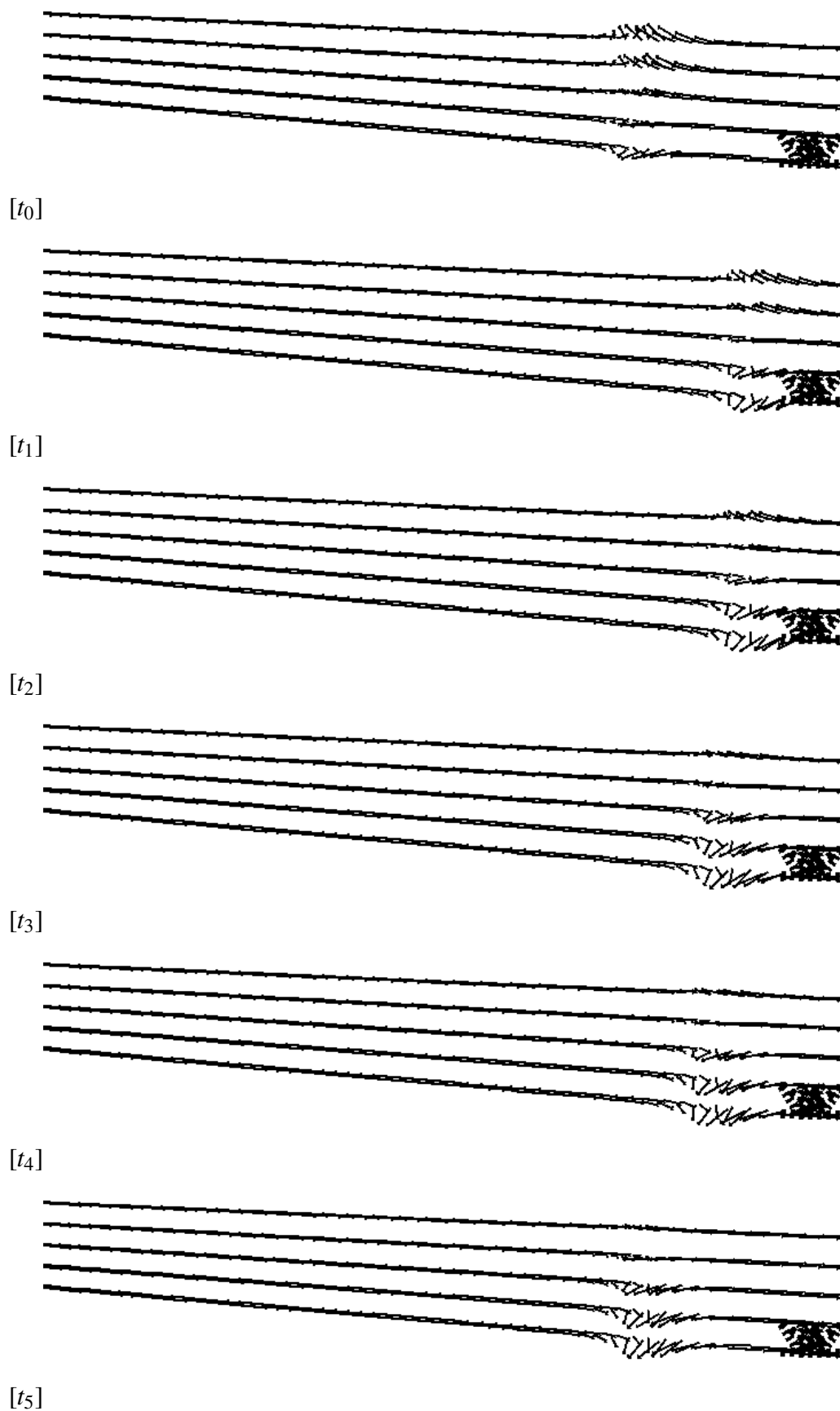


Figura 5.58: Sequência do mesmo movimento da PDT mostrado na figura 5.57 sob um ângulo que nos mostra a magnetização em z . A inversão da polarização da PDT pela impureza magnética também é visualizada nesta figura.

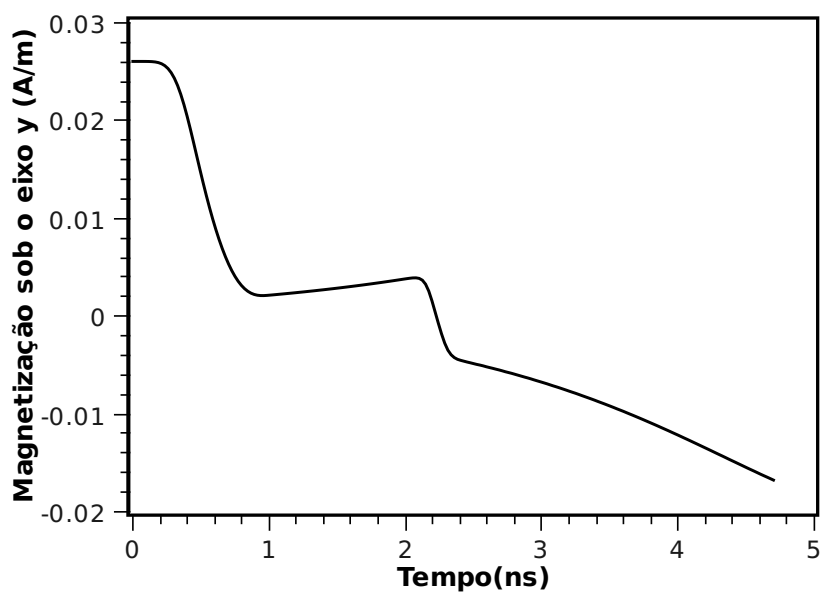


Figura 5.59: Magnetização do nanofio no eixo y em função do tempo, enquanto a PDT se move devido um pulso magnético de amplitude de 9 mT.

6 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

As paredes de domínio correspondem a ferramentas importantes no desenvolvimento de mídias magnéticas que podem ser desenvolvidas a partir de nanofios magnéticos. Memórias ultra-rápidas e de alta densidade e dispositivos lógicos já foram propostos através da utilização da dinâmica das paredes de domínio [4, 5, 6, 8, 9]. Nossos estudos demonstram as peculiaridades do movimento da PDT em nanofios magnéticos sob a ação de um campo magnético e propõe uma forma de controle do seu posicionamento e alteração da sua velocidade através da inserção de impurezas magnéticas no fio.

Através de dinâmica de spin e da simulação micromagnética, simulamos nossos nanofios com comprimento fixo em $1,255 \mu\text{m}$ e variamos sua espessura e largura. Quanto menor a espessura do fio percebemos que maiores são as velocidades das paredes de domínio, o que é desejável em mídias ultra-rápidas. O aumento da largura do nanofio é favorável a uma alta velocidade da PDT apenas para campos magnéticos até cerca de 3,0 mT. Campos de amplitude acima desse valor aceleram a PDT a altos valores de velocidade máxima em um intervalo de tempo menor que 1,0 ns, porém uma queda brusca na velocidade faz com que ela percorra o nanofio com velocidades muito reduzidas após esse aumento inicial.

A possibilidade de inclusão de uma impureza magnética no nanofio ocorre através da mudança da constante de troca J entre a impureza e suas células vizinhas por um outro valor J' . Essa modificação permite mudar a interação da célula que contém a impureza com as demais células vizinhas. Verificamos que a impureza magnética atua na PDT como um sítio de espalhamento ou um sítio de aprisionamento dependendo da relação J'/J . Para $J'/J < 1$, a impureza magnética atrai a PDT e a aprisiona. Se, por outro lado, $J'/J > 1$, a impureza magnética age sobre a PDT repelindo-a. Uma vez que esses efeitos são percebidos, calculamos o potencial da interação entre a PDT e a impureza magnética, movendo a impureza sobre o nanofio ao longo do seu comprimento (eixo x) e largura (eixo y). Independente do seu posicionamento sobre o eixo y , à medida que afastamos a impureza magnética da PDT no eixo x , a energia de interação entre elas diminui tendendo a zero. O alcance dessa interação depende de dois fatores: da posi-

ção da impureza em relação ao eixo y e da largura do nanofio. O formato em “V” da parede de domínio transversal faz com que o alcance da interação seja maior se a impureza magnética for inserida próxima ao polo norte de magnetização da PDT. Além disso, uma vez que a largura da PDT, Δ , aumenta com a largura do nanofio, w , logicamente nanofios mais largos apresentarão um maior alcance na interação.

Por outro lado, uma maior amplitude do potencial de interação é proporcionada quando a impureza magnética é inserida na região de polo sul de magnetização da PDT. Este resultado nos mostra que, para efeitos de controle da posição da PDT, um efeito intensificado no fenômeno de atração ou repulsão provocado pela impureza é obtido inserindo-a na posição $-w/a$ sobre o eixo y do nanofio, ou próximo a esse valor. No desenvolvimento de mídias ultra-rápidas, esse efeito é de grande importância no movimento da PDT.

A impureza magnética pode ser utilizada para variar a velocidade da PDT quando esta se move sob a ação de um campo magnético. Amplitudes de campo magnético até 2,5 mT movem a PDT sob o nanofio, a qual ao atravessar a região de uma impureza magnética atrativa, inicialmente acelera, aumentando a sua velocidade, e posteriormente apresenta uma pequena desaceleração, representando o momento em que a PDT vence o poço de potencial ao sair dele. Se a impureza presente for repulsiva, o oposto acontece, ou seja, a PDT apresenta uma diminuição na sua velocidade de propagação (momento em que está ultrapassando a barreira de potencial) e posteriormente, apresenta uma pequena aceleração (momento em que acaba de ultrapassar o pico da barreira de potencial). Os resultados predominantes na alteração da velocidade da PDT são: impurezas atrativas provocam um aumento instantâneo na velocidade da PDT, enquanto impurezas repulsivas provocam uma redução instantânea nessa velocidade.

Na utilização da impureza magnética atrativa como fator de determinação da posição da PDT através do seu aprisionamento, estudamos os valores de campo magnético necessários ao seu desprendimento. Fixamos o valor da impureza J' e encontramos a dependência entre o campo de “*depinning*” da PDT com a largura do nanofio. Uma função exponencial determina a amplitude de campo magnético necessária para liberar a PDT do poço de potencial. Em qualquer aplicação tecnológica utilizando-se de impurezas magnéticas atrativas como posições de aprisionamento da PDT é fundamental conhecer o campo magnético ou a corrente elétrica necessária a sua liberação. Desta forma, a PDT pode ser manipulada entre duas posições pré-definidas, sendo aprisionada e liberada com precisão variando as dimensões dos domínios magnéticos, podendo gerar dessa forma, bits de armazenamento.

A impureza magnética repulsiva também pode ser utilizada na manipulação da posição da PDT. Nesse caso, a PDT pode ser aprisionada entre duas impurezas repulsivas, ou próxima a

uma única impureza repulsiva. Da mesma forma que para impurezas atrativas, também é possível controlar a posição da PDT variando-se as amplitudes de campo magnético. As alterações nas dimensões dos domínios magnéticos opostos podem representar a criação de um bit.

Outro estudo considerando a aplicação de campos magnéticos mais altos na direção x do nanofio revelou a possibilidade da inversão da polarização da PDT por uma impureza magnética atrativa. Através da identificação de um campo magnético que, apesar de introduzir um antivórtice na PDT, é capaz de movê-la na direção $+x$, conseguimos fazer com que a PDT ao atingir a impureza magnética, inverta a sua polarização e se mova no sentido oposto. Em nanofios mais largos esse efeito só ocorre com a introdução de um “*cluster*” de impurezas magnéticas atrativas. Este efeito poderia ser utilizado como uma forma de introdução de “bits” no nanofio, onde por exemplo, poderíamos associar a polaridade para cima como “0” e a polaridade para baixo como “1”. A impureza magnética seria o fator que proporciona o surgimento do “bit”. Além disso, dispositivos lógicos podem ser criados através da inserção de impurezas magnéticas atrativas ou repulsivas ao longo do comprimento do nanofio. As impurezas magnéticas atrativas atuam no sentido de inverter a polarização da PDT enquanto impurezas repulsivas não provocam essa inversão. Esses dois fenômenos associados poderiam gerar algum tipo de operação lógica. Um inconveniente a essa aplicação, que ainda deve ser superado, é o fato de campos magnéticos mais altos proporcionarem uma velocidade da PDT bastante reduzida.

De uma maneira geral, as impurezas magnéticas podem ser de grande importância na manipulação das PDTs em nanofios magnéticos utilizados em mídias magnéticas como memórias e dispositivos lógicos. Nesse trabalho apresentamos algumas formas de controlar a posição da PDT e peculiaridades em sua dinâmica.

Dentre as possíveis continuações desse trabalho está o estudo do campo magnético que controla a posição da PDT em um nanofio com duas impurezas magnéticas. Havendo a possibilidade de variar a posição da PDT entre as duas regiões de impurezas, controla-se a dimensão dos domínios adjacentes, o que implica na manipulação de “bits” definidos pela magnetização. Outra proposta na mesma linha de aplicabilidade seria o controle da polaridade da parede de domínio, também utilizando-se de duas impurezas magnéticas e campos magnéticos para movê-las entre uma posição e outra. Desta forma o “bit” seria identificado pela polaridade da PDT. A redução na velocidade da PDT devido a precessão da sua magnetização sob campos magnéticos altos pode ser anulada identificando-se a posição ideal onde a impureza magnética atrativa deve ser inserida no nanofio. A substituição da aplicação de campos magnéticos por correntes de spin-polarizado também oferece vantagens na manipulação de várias PDTs em um mesmo nanofio.

Um estudo semelhante pode ser realizado com nanofios que apresentem parede de domínio do tipo vórtice, estendendo a aplicabilidade da PDT a PDV em nanofios de maiores dimensões. Uma infinidade de estudos no que se refere ao controle do posicionamento das paredes de domínio ainda pode ser realizada para o desenvolvimento de mídias magnéticas baseadas na sua dinâmica.

APÊNDICE A –

A.1 OPERADORES DE SPIN

As regras de comutação para operadores de momento angular do tipo S_n^a com $a = x, y$ ou z resultam em outros operadores de spin. Da mecânica quântica temos que as seguintes regras de comutação são respeitadas [71],

$$[S_m^a, S_n^b] = i\hbar \varepsilon^{abc} \delta_{mn} S_n^c \quad (\text{A.1.1})$$

onde a, b, c referem-se às componentes x, y, z e os índices inferiores m, n referem-se aos sítios, e δ_{mn} é o delta de Kronecker, definido por:

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & \text{se } m = n \\ 0, & \text{se } m \neq n \end{cases}$$

e ε^{abc} é o símbolo anti-simétrico de Levi-Civita definido da seguinte forma:

$$\varepsilon^{abc} = \begin{cases} 1, & \text{se } abc \text{ estão em ordem cíclica positiva} \\ 0, & \text{se dois ou mais deles são repetidos} \\ -1, & \text{se } abc \text{ estão em ordem cíclica negativa.} \end{cases}$$

A.2 EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT

Como já foi dito a equação de L.L.G. rege a dinâmica micromagnética, mas utilizaremos essa seção para entender como isso acontece fisicamente no sistema magnético. A equação que descreve a precessão de um momento em torno de um campo magnético é,

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} = \vec{m} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{m} \times \vec{H} . \quad (\text{A.2.1})$$

Como sabemos da equação 4.6.19, a razão giromagnética γ é negativa para o elétron e ela determina o sentido de rotação do momento magnético durante a sua precessão na presença de um campo magnético. O módulo do torque sobre o momento magnético é máximo se \vec{m} e a indução magnética \vec{H} forem perpendiculares e nulo se os vetores forem paralelos e ainda, a frequência de precessão ω_0 não depende do ângulo entre \vec{m} e \vec{H} .

Apesar do momento magnético precessar na direção do campo magnético, o torque responsável por essa precessão, $\vec{T} = \mu_0 \vec{m} \times \vec{H}$ não é capaz de realizar o alinhamento entre os dois, uma vez que ele é perpendicular a \vec{H} . A figura A.1 mostra um torque adicional, perpendicular a \vec{m} e a \vec{T} concomitantemente, que deve ser incluído na equação A.2.1 para explicar esse alinhamento. Vemos pela figura A.1 que esse torque pode ser escrito como

$$\vec{T}_A = \frac{\alpha}{m\gamma} \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right), \quad (\text{A.2.2})$$

o qual é denominado torque de amortecimento e a constante α é apenas fenomenológica, análoga ao coeficiente de atrito. O torque de precessão $\vec{T} = \frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt}$ faz o momento magnético girar no sentido de $\frac{d\vec{m}}{dt}$ para $\gamma < 0$, e o torque T_A faz o momento girar no sentido do campo para $\alpha > 0$.

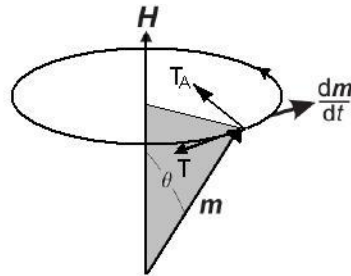


Figura A.1: Torque de precessão e torque de amortecimento sobre o momento angular de um elétron em uma região de campo estático \vec{H} .

Landau e Lifshitz apresentaram em seus estudos um torque diferente de T_A apresentado, mas que descrevia com maior perfeição a variação do momento magnético. Tal torque substitui a equação A.2.2 por:

$$\vec{T}_A = \frac{\alpha\mu_0}{m} \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}), \quad (\text{A.2.3})$$

o qual acrescido na equação A.2.1 nos fornece a equação L.L:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} = \mu_0 (\vec{m} \times \vec{H}) + \frac{\alpha\mu_0}{m} \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}). \quad (\text{A.2.4})$$

Essa equação de L.L. descrevia com precisão a evolução temporal do momento magnético apenas para materiais com baixos valores de amortecimento, $\alpha \ll 1$. Para resolver o problema em materiais com α maiores, Gilbert em 1955, modificou o termo de amortecimento da equação A.2.4 transformando-a em:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} = \mu_0 \vec{m} \times \vec{H} + \frac{\alpha}{m\gamma} \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \quad (\text{A.2.5})$$

a qual ficou conhecida como L.L.G. implícita.

Para escrevê-la de uma forma semelhante à equação de L.L., tomamos o produto vetorial com \vec{m} em ambos os lados da equação

$$\begin{aligned} \vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} &= \gamma \mu_0 \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) + \frac{\alpha}{m} \vec{m} \times \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \\ &= \gamma \mu_0 \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}) - \alpha m \frac{d\vec{m}}{dt} \end{aligned} \quad (\text{A.2.6})$$

O produto vetorial duplo que aparece na equação pode ser resolvido usando-se a identidade:

$$\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C}. \quad (\text{A.2.7})$$

Fazendo $\vec{A} = \vec{B} = \vec{m}$ e $\vec{C} = \frac{d\vec{m}}{dt}$, temos que:

$$\begin{aligned} \vec{m} \times \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) &= \left(\vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \vec{m} - (\vec{m} \cdot \vec{m}) \frac{d\vec{m}}{dt} \\ &= -m^2 \frac{d\vec{m}}{dt}. \end{aligned} \quad (\text{A.2.8})$$

Como a taxa de variação do momento magnético é sempre perpendicular a ele próprio, temos,

$$\vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} = 0 \quad (\text{A.2.9})$$

Substituindo-se a equação A.2.6 na equação L.L.G, A.2.5, obtemos

$$\frac{1 + \alpha^2}{\gamma} \frac{d\vec{m}}{dt} = \mu_0 \vec{m} \times \vec{H} + \frac{\alpha \mu_0}{m} \vec{m} \times \left(\vec{m} \times \vec{H} \right), \quad (\text{A.2.10})$$

que é a forma explícita da equação L.L.G. Vemos que para $\alpha \ll 1$, $\alpha^2 \sim 0$, o que faz com as equações A.2.5 e A.2.10 se tornem muito próximas.

A figura A.2 mostra a precessão do momento magnético de um elétron no tempo submetido a um campo estático, resolvendo tanto a equação L.L. quanto a equação L.L.G. para $\alpha > 0$. As equações L.L. e L.L.G. mostram que o módulo de momento \vec{m} é preservado durante a precessão, variando apenas sua direção. Para isso iremos tomar o produto escalar com \vec{m} em ambos os lados da equação A.2.5

$$\begin{aligned}
 \vec{m} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} &= \gamma \mu_0 \vec{m} \cdot (\vec{m} \times \vec{H}) + \frac{\alpha}{m} \vec{m} \cdot \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \\
 &= \gamma \mu_0 \vec{m} \cdot (\vec{H} \times \vec{m}) + \frac{\alpha}{m} \vec{m} \cdot \left(\frac{d\vec{m}}{dt} \times \vec{m} \right) \\
 &= \gamma \mu_0 \vec{H} \cdot (\vec{m} \times \vec{m}) + \frac{\alpha}{m} \frac{d\vec{m}}{dt} \cdot (\vec{m} \times \vec{m}) \\
 &= 0 .
 \end{aligned} \tag{A.2.11}$$

onde utilizou-se o produto misto

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B} \cdot (\vec{C} \times \vec{A}) = \vec{C} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) \tag{A.2.12}$$

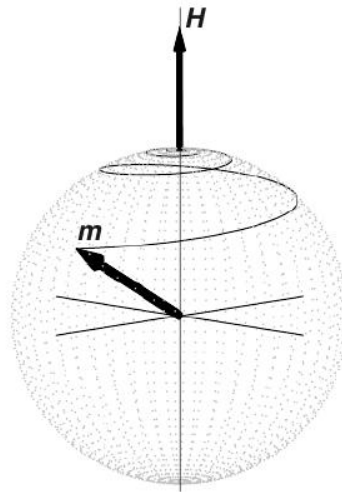


Figura A.2: Precessão do momento magnético de um elétron na presença de um campo estático \vec{H} e com um parâmetro de amortecimento positivo. O módulo de \vec{m} permanece constante até se alinhar com o campo. Figura retirada de [73].

E ainda, utilizando as identidades vetoriais, através da derivada do produto escalar

$$\frac{d}{d\tau}(\vec{A} \cdot \vec{B}) = \frac{d\vec{A}}{d\tau} \cdot \vec{B} + \vec{A} \cdot \frac{d\vec{B}}{d\tau} \quad (\text{A.2.13})$$

na equação de L.L.G., temos que:

$$\vec{m} \frac{d\vec{m}}{dt} = \frac{1}{2} \left(\frac{d\vec{m}}{dt} \cdot \frac{d\vec{m}}{dt} \right) = \frac{1}{2} \left| \frac{d\vec{m}}{dt} \right|^2 = 0 . \quad (\text{A.2.14})$$

Logo, podemos verificar que o momento de \vec{m} evolui com módulo constante.

Durante a precessão amortecida o momento magnético espirala na direção do campo. Pela lei da conservação do momento angular essa mudança durante a precessão é compensada pela transferência do momento para dentro do próprio sistema através da excitação de ondas de spin ou para a rede [74].

REFERÊNCIAS

- [1] LAUTERBUR, P. C. Image Formation by Induced Local Interactions: Examples Employing Nuclear Magnetic Resonance. **Nature**, v. 242, p. 190-191, 1973.
- [2] INSTITUTE OF TECHNOLOGY (Cambridge, MA). Mrkus Zahn, T. Alan Hatton, Shahrar Rohinton Khushrushahi. **Magnetic Colloid Petroleum Oil Spill Clean-up of Ocean Surface, Depth, and Shore Regions US**. n. 20120211428, 14 fev. 2012, 30 ago. 2012.
- [3] KNOBEL, M. Aplicações do magnetismo. *Ciência Hoje*, Rio de Janeiro, v. 36, n. 215, p. 18-26, 2005.
- [4] NAGAI, K. et al. Binary data coding with domain wall for spin wave based logic devices. **J. Appl. Phys**, v. 111, p. 07D130, 2012.
- [5] ALLWOOD, D. A. et al. Magnetic Domain-Wall Logic. **Science**, v. 309, p. 1688-1692, 2005.
- [6] PARKIN, S. S. P.; HAYASHI, M.; THOMAS, L. Magnetic Domain-Wall Racetrack Memory. **Science**, v. 320, p. 190-194, 2008.
- [7] PARKIN, S. S. P. Magnetically Engineered Spintronic Sensors and Memory. **Proc. IEEE**, v. 91, p. 661-680, 2003.
- [8] HAYASHI, M. et al. Current-Controlled Magnetic Domain-Wall Nanowire Shift Register. **Science**, v. 320, p. 209-211, 2008.
- [9] TRETIAKOV, O. A.; LIU, Y.; ABANOV, A. Domain wall dynamics in translationally non-invariant nanowires: theory and applications. **Phys. Rev. Lett.**, v. 108, p. 247201, 2012.
- [10] ATKINSON, D. et al. Magnetic domain-wall dynamics in a submicrometre ferromagnetic structure. **Nature**, v. 424, p. 85-87 2003.
- [11] YOU, C.-Y. Equation of motion for a domain wall movement under a nonuniform transverse magnetic field. **Appl. Phys. Lett.**, v. 92, n. 192514 p. 1-3 2008.
- [12] NEGOITA, M.; HAYWARD, T. J.; ALLWOOD, D. A. Controlling domain walls velocities in ferromagnetic ring shaped nanowires. **Appl. Phys. Lett.**, v. 100, p. 072405, 2012.
- [13] GOUSSEV, A; ROBBINS, J. M.; SLASTIKOV, V. Domain-Wall Motion in Ferromagnetic Nanowires Driven by Arbitrary Time-Dependent Fields An Exact Result. **Phys. Rev. Lett.**, v. 104, p. 147202, 2010.
- [14] BEACH, G. S. D. et al. Dynamics of field-driven domain-wall propagation in ferromagnetic nanowires. **Nature**, v. 438, p. 741-744, 2005.

- [15] He, J.; LI, Z.; ZHANG, S. Current-driven vortex domain wall dynamics by micromagnetic simulations. **Phys. Rev. B**, v. 73, p. 184408, 2006.
- [16] HAYASHI, M. Current Driven Domain Wall Velocities Exceeding the Spin Angular Momentum Transfer Rate in Permalloy Nanowires. **Phys. Rev. Lett.**, v. 98, p. 037204, 2007.
- [17] BEACH, G. S. D.; TSOI, M. J. L. Erskine; Current-induced domain wall motion. **J. Magn. Magn. Mat.**, v. 320, p. 1272-1281, 2008.
- [18] FUKAMI, S. et al. Current-induced domain wall motion in perpendicularly magnetized CoFeB nanowire. **Appl. Phys. Lett.**, v. 98, p. 082504, 2011.
- [19] WIESER, R. et al. Manipulation of domain walls using a spin-polarized STM. **E. P. L.**, v. 97, p. 17009, 2012.
- [20] MOORE, T. A. et al. Magnetic-field-induced domain-wall motion in permalloy nanowires with modified Gilbert damping **Phys. Rev. B**, v. 82, p. 094445, 2010.
- [21] PIAO, H.-G. Condition of the ratchet effect of a magnetic domain wall motion under an asymmetric potential energy. **J. Appl. Phys.**, v. 111, p. 07D301, 2012.
- [22] THIAVILLE, A.; GARCÍA, J. M.; MILTAT J. Domain wall dynamics in nanowires. **Magn. Magn. Mat.**, v. 242-245, p. 1061-1063, 2002.
- [23] PORTER, D. G.; DONAHUE, M. J. Velocity of transverse domain wall motion along thin, narrow strips. **J. Appl. Phys.**, v. 95, n. 11, p. 6729-6731, 2004.
- [24] KUNZ, A. Simulated domain wall dynamics in magnetic nanowires. **J. Appl. Phys.**, v. 99, p. 08G107, 2006.
- [25] SCHRYER, N. L., WALTER, L. R. The motion of 180° domain walls in uniform dc magnetic fields. **J. Appl. Phys.**, v. 45, p. 5409, 1974.
- [26] BEDAU, D., et al. Quantitative Determination of the Nonlinear Pinning Potential for a Magnetic Domain Wall. **Phys. Rev. Lett.**, v. 101, p. 256602, 2008.
- [27] ÓVARI, T.-A., CORODEANU, S., CHIRIAC, H. Domain wall velocity in submicron amorphous wires. **J. Appl. Phys.**, v. 109, p. 07D502, 2011.
- [28] VOGEL, A. Field- and current-induced domain-wall motion in permalloy nanowires with magnetic soft spots. **Appl. Phys. Lett.**, v. 98, p. 202501, 2011.
- [29] SANCHEZ, F. G. et al. Effect of crystalline defects on domain wall under field and current in nanowires with perpendicular magnetization. **Phys. Rev. B.**, v. 81, p. 134408, 2010.
- [30] BEDAU, D. et al. Detection of Current-Induced Resonance of Geometrically Confined Domain Walls. **Phys. Rev. Lett.**, v. 99, p. 146601, 2007.
- [31] IM M.-Y. et al. Direct Observation of Stochastic Domain-Wall Depinning in Magnetic Nanowires. **Phys. Rev. Lett.**, v. 102, p. 147204, 2009.
- [32] AHN, S.-M. et al. Geometric dependence of static and kinetic pinning of domain walls on ferromagnetic nanowires. **J. Appl. Phys.**, v. 111, p. 07D309, 2012.

- [33] TOSCANO, D. et al. Vortex core scattering and pinning by impurities in nanomagnets **J. Appl. Phys.**, v. 109, p. 076104, 2011.
- [34] BUSCHOW, K.; BOER, F. R. *Physics of Magnetism and Magnetic Materials*. New York: Kluwer Academic Publishers, 2003. 191 p.
- [35] GETZLAFF, M. *Fundamentals of Magnetism*. Germany: Springer, 2007, 384 p.
- [36] CULLITY, B. D.; GRAHAM, C. D. *Introduction to Magnetic Materials*. 2. ed. New Jersey: John Wiley, 2008, 544 p.
- [37] LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. M. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. **Phys. Z.**, v. 8, p. 153, 1935.
- [38] BOHN, F. *Propriedades estatísticas do ruído Barkhausen em materiais magnéticos artificialmente estruturados*. 2009. 122 f. Tese (Doutorado em Física) - Centro de Ciências Naturais e Exatas, Universidade Federal de Santa Maria, Rio Grande do Sul, 2009.
- [39] HILLEBRAND, C. D. Nobel Century: a biographical analysis of physics laureates. **Interdisciplinary Science Reviews** n. 2. p.87-93, 2002.
- [40] BITTER, F. On Inhomogeneities in the Magnetization of Ferromagnetic Materials. **Phys. Rev. Lett.**, v. 38, p. 1903, 1931.
- [41] KITTEL, C. *Introdução a Física do Estado Sólido*. Rio de Janeiro: LTC, 2006. 578 p.
- [42] HUBERT, A.; SCHAFER, R. *Magnetic domains: The analysis of Magnetic Microstructures*. New York: Springer, 2009. 686 p.
- [43] RUBINSTEIN, H.; SPAIN, R. J. Cross-Tie Walls in Thin Films. **J. Appl. Phys.** v. 31, p. S306, 1960.
- [44] GUIMARÃES, A. P. *Principles of Nanomagnetism*. New York: Springer, 2005. 221 p.
- [45] KRONMULLER, H.; FHNLE, M. *Micromagnetism and the Microstructure of Ferromagnetic Solids*. Cambridge: Cambridge University Press, 2003. 452 p.
- [46] VÁZQUEZ, M. Advanced Magnetic Nanowires. In: KRONMULLER, H.; PARKIN, S. (Ed.). *Magnetism and Advanced Magnetic Materials*. Chichester: Wiley, 2007. v. 4, p. 2193-2226.
- [47] MCMICHAEL, R. D.; DONAHUE, M. J. Head to head domain wall structures in thin magnetic strips. **IEEE Trans. Magn.** v. 33, p. 4167, 1997.
- [48] NAKATANI, Y.; THIAVILLE, A.; MILTAT, J. Head-to-head domain walls in soft nanostrips: a refined phase diagram. **J. Magn. Magn. Mat.** v. 290-291, p. 750-753, 2005.
- [49] TCHERNYSHYOV, O.; CHERN, G. Fractional Vortices and Composite Domain Walls in Flat Nanomagnets. **Phys. Rev. Lett.** v. 95, p.197204, 2005.
- [50] THIAVILLE, A.; NAKATANI, Y. Micromagnetics of Domain-Wall Dynamics in Soft Nanostrips. In: SHINJO, T. (Ed.). *Nanomagnetism and Spintronics*. Amsterdam: Elsevier, 2009. p. 231-276.

- [51] LAUFENBERG, M. et al. Observation of thermally activated domain wall transformations. **Appl. Phys. Lett.** v. 88, p. 052507, 2006.
- [52] BECK, F. et al. Stress dependence of the domain wall dynamics in the adiabatic regime. **J. Magn. Magn. Mat.** v. 323, p. 268-271, 2011.
- [53] DORING, W. On the inertia of the walls between Weiss domains. **Z. Naturforsch. A**, Berlin, v. 3, p. 373-379, 1948.
- [54] THIELE, A. A. Steady-State Motion of Magnetic Domains. **Phys. Rev. Lett.** v. 30, p. 230-233, 1973.
- [55] FORSTER, H. et al. Micromagnetic simulation of domain wall motion in magnetic nanowires. **Magn. Magn. Mater.** v. 249, p. 181-186, 2002.
- [56] NAKATANI, Y.; THIAVILLE, A.; MILTAT, J. Faster magnetic walls in rough wires. **Nat. Mater.**, v. 2, p. 521-523, 2003.
- [57] YAMAGUCHI, A. et al. Reduction of Threshold Current Density for Current-Driven Domain Wall Motion using Shape Control. **Jpn. J. Appl. Phys.**, v. 45, p. 3850-3853, 2006.
- [58] Ferre, J. Dynamics of Magnetization Reversal: From Continuous to Patterned Ferromagnetic Films. In HILLEBRANDS, B.; OUNADJELA, K.(eds.). *Spin Dynamics in Confined Magnetic Structures I*. Berlin: Springer-Verlag, 2002, p. 127-165.
- [59] YANG, J. et al. Magnetic domain-wall velocity oscillations in permalloy nanowires. **Phys. Rev. B**, v. 77, p. 014413, 2008.
- [60] KONDOU, K. et al. Experimental detection of domain wall propagation above the Walker field. **J. Phys. Cond. Mat.** v. 24, p. 024217, 2012.
- [61] BEACH, G. S. D. et al. Dynamics of field-driven domain-wall propagation in ferromagnetic nanowires. **Nat. Mater.**, v.4, p. 741-744, 2005.
- [62] HAYASHI, M. et al. Influence of Current on Field-Driven Domain Wall Motion in Permalloy Nanowires from Time Resolved Measurements of Anisotropic Magnetoresistance. **Phys. Rev. Lett.**, v. 96, p.197207, 2006.
- [63] HAYASHI, M. et al. Direct observation of the coherent precession of magnetic domain walls propagating along permalloy nanowires. **Nat. Phys.**, v. 3, p. 21-25, 2006.
- [64] THOMAS, L.; PARKIN, S. S. Current Induced Domain-Wall Motion in Magnetic Nanostructures. In: KRONMULLER H.; PARKIN, S. S. (eds.). *Magnetism and Advanced Magnetic Materials*. Inglaterra: Wiley-Chichester, 2007, p. 942-982.
- [65] BECK F.; RIGUE, J. N.; CARARA, M. Effect of Electric Current on Domain Wall Dynamics. **IEEE Tr. Mag.**, v. 49. n. 8, p. 4699-4702, 2013.
- [66] HE, J.; LI, Z.; ZHANG, S. Current-driven vortex domain wall dynamics by micromagnetic simulations. **Phys. Rev. B**, v. 73, p. 184408, 2006.
- [67] NAKATANI, Y. ICMFS 06 Conference, Sendai, Japan (unpublished data).

- [68] TATARA, G.; KOHNO, H. Theory of Current-Driven Domain Wall Motion: Spin Transfer versus Momentum Transfer. **Phys. Rev. Lett.**, v. 92, p. 086601-086604, 2004.
- [69] TOSCANO, D. *Estudo via simulação computacional da formação de vórtice e do modo girotrópico em nanodiscos magnéticos*. 2011. 70 fl. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Ciências Exatas, UFJF, Juiz de Fora, 2011.
- [70] SILVA, J. H. *Estudo via Simulação Computacional do Efeito de Impurezas no Modo Girotrópico em Nanodisco Magnético*. 2011. 50 fl. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Ciências Exatas, UFJF, Juiz de Fora, 2011.
- [71] SAKURAY, J. *Modern Quantum Mechanics*. [S.l.]: Addison-Wesley, 1994.
- [72] TSAI, S.-H.; KRECH, M.; LANDAU, D. P. Symplectic integration methods in molecular and spin dynamics simulations. **Brazilian Journal of Physics**, v. 34, n. 2A, 2004.
- [73] STOHR, J.; SIEGMANN, H. *Magnetism from fundamentals to nanoscale dynamics*. [S.l.]: Springer, 2006.
- [74] RAABE, J. et al. Magnetization pattern of ferromagnetic nanodisks. **Journal of Applied Physics**, v. 88, n. 7, 2000.
- [75] TOSCANO, D. et al. Magnetic vortex formation and gyrotropic mode in nanodisks. **J. Appl. Phys.**, v.109, p. 014301, 2011.
- [76] MEHROTRA, J. On the implementation of a primal-dual interior point method. **SIAM Journal on Optimization**, v. 2, n. 4, p. 575, 1992.
- [77] BOYCE, W.; DIPRIMA, R. *Elementary differential equations and boundary value problems*. 6. ed. Nova Jersey: John Willey, 1997.
- [78] JIANG, X. et al. Discrete Domain Wall Positioning Due to Pinning in Current Driven Motion along Nanowires. **Nano Lett.**, v. 11, p. 96, 2011.
- [79] AHARONI, A. *Surface anisotropy in micromagnetics*. **J. Appl. Phys.**, v. 61, p. 3302-3304, 1987.
- [80] ALBERT, M. Domain wall motion in perpendicular anisotropy nanowires with edge roughness. **J. Phys. Cond. Matt.**, v. 24, p.024219, 2012 .
- [81] FERREIRA, V. A. et al. Transverse domain wall scattering and pinning by magnetic impurities in magnetic nanowires. **J. Phys. Appl.** v.114, p. 013907, 2013.

ANEXO A - ARTIGO PUBLICADO

Transverse domain wall scattering and pinning by magnetic impurities in magnetic nanowires

V. A. Ferreira, D. Toscano, S. A. Leonel, P. Z. Coura, R. A. Dias et al.

Citation: *J. Appl. Phys.* **114**, 013907 (2013); doi: 10.1063/1.4812562

View online: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4812562>

View Table of Contents: <http://jap.aip.org/resource/1/JAPIAU/v114/i1>

Published by the **AIP Publishing LLC**.

Additional information on *J. Appl. Phys.*

Journal Homepage: <http://jap.aip.org/>

Journal Information: http://jap.aip.org/about/about_the_journal

Top downloads: http://jap.aip.org/features/most_downloaded

Information for Authors: <http://jap.aip.org/authors>

ADVERTISEMENT



AIPAdvances

Now Indexed in Thomson Reuters Databases

Explore AIP's open access journal:

- Rapid publication
- Article-level metrics
- Post-publication rating and commenting

Transverse domain wall scattering and pinning by magnetic impurities in magnetic nanowires

V. A. Ferreira,^{a)} D. Toscano,^{b)} S. A. Leonel,^{c)} P. Z. Coura,^{d)} R. A. Dias,^{e)} and F. Sato^{f)}

Laboratório de Simulação Computacional, Departamento de Física, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Minas Gerais 36036-330, Brazil

(Received 25 April 2013; accepted 13 June 2013; published online 1 July 2013)

We used numerical simulations to study the dynamical behavior of the transverse domain wall (TDW) in nanowires made of Permalloy-79 contaminated by pointlike magnetic impurities. It was observed that the magnetic impurities can behave both as pinning (attractive) and as scattering (repulsive) sites for the TDW. We have found that the nearer to the bottom edge of the nanowire is located the magnetic impurity, the larger is the magnitude of the pinning and the scattering energy, which agrees with experimental observation. We also observed that the interaction energy and the range of the interaction potential depend on the width of the nanowire. The presence of magnetic impurity affects the motion of the TDW. © 2013 AIP Publishing LLC.

[<http://dx.doi.org/10.1063/1.4812562>]

I. INTRODUCTION

Recently, magnetic nanostructures such as magnetic nanowires, that exhibit domain walls (DW), have been investigated for applications in logic devices^{1,2} and in high speed random access memories (high speed RAM).^{3,4} Magnetic domains and DWs can be used for logic and memory operations. For the development of such technologies, it is crucial to understand the process of magnetization of these ferromagnetic structures as well as control the movement of DWs. Particularly in magnetic nanowires, the relation between the thickness and width provides two types of DWs, the vortex domain wall (VDW) and the transverse domain wall (TDW).^{5,6} The competition between exchange energy and magnetostatic energy is responsible for the predominance of one of these structures. For smaller widths, the magnetostatic energy is minimized by forming a transverse domain wall. If the width increases, this energy also increases due to the appearance of many free magnetic charges, which favors the formation of one closure structure, characteristic of vortex domain wall.

The manipulation of DWs in the nanowire is made by using applied magnetic fields^{7–11} or spin-polarized currents.^{12–16} For the applicability of DWs, their mobility should be large and possible to be controlled. Applying an external magnetic field along the magnetization axis of the nanowire moves the DW to minimize the Zeeman energy. The maximum velocity achieved by DW depends on the material damping parameter,^{12,17} the intensity and the type of the external applied field,^{8,11,18} and the dimensions of the nanowire.^{19–21} This velocity is limited by the Walker field²²

and above this field the internal structure of DW is modified by the precession of the magnetization, which leads to a reduction in its velocity. This fact has been confirmed experimentally.^{23,24}

The position control of the DW is proposed by various forms of pinning.^{9,17,25–28} Experimentally, artificial defects as constrictions and protrusions which alter the local geometry of the nanowire are used to generate a potential that acts as a pinning site for DW.^{29–31} In Ref. 17, the authors alter the damping constant through Ho doping in nanowires of Permalloy, which changes the pinning field of DWs and their velocity. The micromagnetic simulations show that the increase of damping constant makes the structure of the DW more rigid. In Ref. 28, the irradiation of chromium ions in a sample of Permalloy induces the formation of soft magnetic spots square in the nanowire, which generate pinning sites without the need to modify its geometry. Through topological defects, experimental measurements determine the velocity and position of the VDW in spin valve by measuring the change in giant magnetoresistance.³² Studies of a single DW in a magnetic wire show the possibility of controlling the velocity and trapping the DW experimentally by varying local fields.³³ To determine and understand the pinning potential of DWs generated by intrinsic defects or created in their geometry is of paramount importance to understand and control the dynamics of DWs.

In this work, we use spin dynamic simulation to study the effect of magnetic impurities in the DW dynamics. We consider nanowires made of Permalloy with length $L = 1.3 \mu\text{m}$, width w between 10.0 nm and 65.0 nm, and thickness $t = 10 \text{ nm}$, with a TDW as shown in Fig. 1. Following Ref. 34, we consider the interaction between the magnetic sites in the nanowires and the impurities depending only on the exchange energy. We analyze the interaction energy between the magnetic impurity and TDW. Finally, we consider an applied magnetic field on the axis of magnetization of the nanowire and verify the changes in the velocity of TDW due to the presence of an impurity.

^{a)}Electronic mail: vanesaferreira@fisica.ufjf.br

^{b)}Electronic mail: danielotoscانو@fisica.ufjf.br

^{c)}Author to whom correspondence should be addressed. Electronic mail: sidney@fisica.ufjf.br

^{d)}Electronic mail: pablo@fisica.ufjf.br

^{e)}Electronic mail: radias@fisica.ufjf.br

^{f)}Electronic mail: sjfsato@fisica.ufjf.br

II. MODEL AND METHODOLOGY

The magnetic nanowires are modeled by magnetic moments with dipole-dipole and exchange interactions. The model Hamiltonian for the nanowires in the presence of the magnetic impurities can be written as³⁴

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{(i \neq i', j)} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{J'}{2J} \sum_{(i', j)} \hat{m}_{i'} \cdot \hat{m}_j \right. \\ \left. + \frac{D}{2J} \sum_{ij} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right. \\ \left. - \frac{Z}{J} \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{\text{ext}} \right\}, \quad (1)$$

where i and j represent sites of the pure sample and i' is for sites containing impurities; \hat{m}_i , \hat{m}_j , and $\hat{m}_{i'}$ are dimensionless vectors that satisfy the condition $|\hat{m}| = 1$ representing the magnetic moments located in the sites i , j , and i' , respectively; r_{ij} is the distance between the sites i and j measured in units of length, a is the lattice parameter of the material; and J (in units of energy) is the exchange coupling constant between \hat{m}_i and \hat{m}_j . The exchange interactions between magnetic sites and that one containing the impurity were modelled by ferromagnetic coupling with the exchange constant strength J' differing its value for sites without defects J . J' is the exchange coupling constant between $\hat{m}_{i'}$ and \hat{m}_j , and D is the dipole strength. Z is the Zeeman energy of the system and b_i^{ext} is the external magnetic field. The lattice parameter a represents the distance between the first neighbors sites in a cubic lattice. The sums in the first and second terms are over nearest neighbors. The first term represents the ferromagnetic coupling only for sites without impurities, whereas the second takes into account the exchange interaction between sites with and without impurities. The Hamiltonian (1) can be rewritten as $H = J\mathcal{H}$, where \mathcal{H} is the dimensionless term in curly brackets. The system energy is measured in units of J . The dynamics of the system is followed, as in Refs. 34 and 35, by solving numerically the discrete version of the Landau-Lifshitz-Gilbert equation given by

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = -\frac{1}{1+\alpha^2} [\hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i)], \quad (2)$$

where τ is the dimensionless time defined as $\tau = t \cdot \omega_0$, where t is the Hamiltonian time, measured in seconds,³⁶ α is the material damping parameter, and $\vec{b}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{m}_i}$ is the dimensionless effective field at site i , containing individual contributions from the exchange, dipolar, and Zeeman fields.

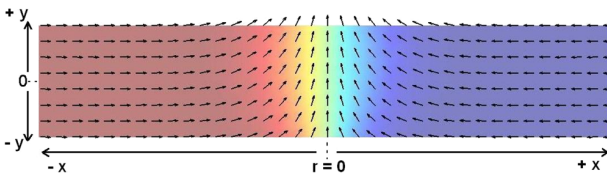


FIG. 1. Schematic view of the nanowire with length L along x -axis, width ω along y -axis, and thickness t along z -axis. Initially, the TDW is considered in the center of the nanowire at $r=0$.

We used the reference value $\omega_0 = 2.13 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ for Permalloy-79.³⁵ We integrated the equations of motion (2) using a fourth-order predictor-corrector scheme with a damping parameter $\alpha = 0.01$ and time step $d\tau = 0.01$ ($dt = 4.7 \times 10^{-14} \text{ s}$ for Permalloy-79).

In the micromagnetic approach, the interaction constants depend on the material parameters and also the manner in which the system is partitioned into cells. As in Refs. 34, 37, and 38, we have chosen to use cubic cells of edge length a . In this case, the interaction constants between the cells are given by $J = 2A/a$ and $\frac{D}{J} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{g}{\mu_0}\right)^2$. If there is an external applied magnetic field, the coefficient of Zeeman interaction is $\frac{Z}{J} = \left(\frac{g}{\mu_0}\right)^2$. We have used the typical parameters for Permalloy-79: the saturation magnetization $M_S = 8.6 \times 10^5 \text{ A/m}$ and the exchange stiffness constant $A = 1.3 \times 10^{-11} \text{ J/m}$. Using these parameters, we have estimated the exchange length as $\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}} \approx 5.3 \text{ nm}$ and the unit cell size was chosen as $5 \times 5 \times 5 \text{ nm}^3$. The simulations were performed with no cutoff in the dipolar energy term.

As for vortex core in the nanodisks,³⁴ we describe two possible types of magnetic impurities acting as pinning ($J' < J$) or scattering ($J' > J$) sites for the TDW in the nanowires.

The application of a field pulse b_i^{ext} along the nanowire axis (x -axis) moves the TDW. The field pulse is given by

$$b_i^{\text{ext}}(t) = b_i^{\text{ext}} [1 - \cos(2\pi f t)], \quad (3)$$

where we used the frequency $f = 1 \text{ GHz}$. The domain wall velocity $v(t)$ can be calculated from the derivative of the average magnetization of the nanowire²⁰

$$v(t) = \frac{L d\langle m_x(t) \rangle}{2 dt}, \quad (4)$$

where m_x represents the magnetization in the x direction.

III. RESULTS AND DISCUSSIONS

Initially, the TDW was set at the center of the nanowire in the presence of a magnetic impurity a few sites away. We observed that if $J'/J < 1$, the TDW moves toward the magnetic impurity site and is trapped by it due to an effective attractive potential of interaction between the TDW and the magnetic impurity, as shown in Fig. 2. If we consider $J'/J > 1$, the TDW moves away of the magnetic impurity site due to an effective repulsive potential of interaction between the TDW and the magnetic impurity, as shown in Fig. 3.

Since the TDW is asymmetrical with respect to the y -axis (see Fig. 1), we analyzed the behavior of the potential of interaction between the TDW and the magnetic impurity considering different positions to the magnetic impurity along the y -axis. In this work, “bottom edge” refers to the edge where the TDW magnetization points toward the inside of the nanowire and “top edge” refers to the edge where the TDW magnetization points toward the outside of the nanowire (see Fig. 4). Figure 5 shows the interaction energy behavior as a function of the relative distance (r/a) between

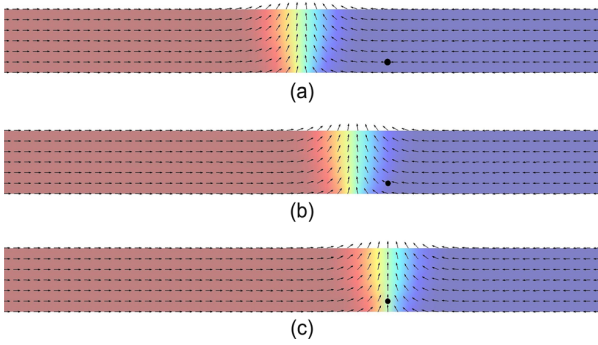


FIG. 2. Snapshots of the dynamical behavior of the TDW near an attractive magnetic impurity $J'/J < 1$ in the nanowire with $\omega = 25$ nm. The black circle symbol represents a magnetic impurity. (a) A typical initial configuration with the TDW at the center of the nanowire and the magnetic impurity located eight sites away from the center. (b) Configuration after 7 ns. (c) Configuration after 14 ns showing TDW pinning at the magnetic impurity.

the center of the TDW and the magnetic impurity for each y position considered. First, we considered an attractive impurity with $J'/J = 0.1$ in the nanowire with $\omega = 45$ nm.

We have found that the nearer to the bottom edge is located the magnetic impurity, the larger is the magnitude of the pinning energy. From the experimental view point, the introduction of magnetic impurity near to the bottom edge of the nanowire is more favorable to pinning TDW. This also happens for ring-shaped nanowires where topological edge defects confine VDW.³⁰ If the impurity is located very near to the bottom edge of the nanowire, the interaction energy has a Gaussian profile, as shown in Fig. 5 for $y/a = -4.5$ and -3.5 . If the impurity is located not very near to the bottom edge of the nanowire, the profile of the interaction energy presents two minimum points, as shown in Fig. 5 for $y/a \geq -2.5$.

Figure 6 shows the results considering repulsive impurity with $J'/J = 2.5$ in the nanowire with $\omega = 45$ nm. Figure 7 shows the results considering attractive impurity with $J'/J = 0.1$ in the nanowire with $\omega = 25$ nm. It is observed from Figure 6 that for repulsive impurity, the interaction energy presents the same behavior. Comparing the results of Figures 5 and 7, we observed that the interaction

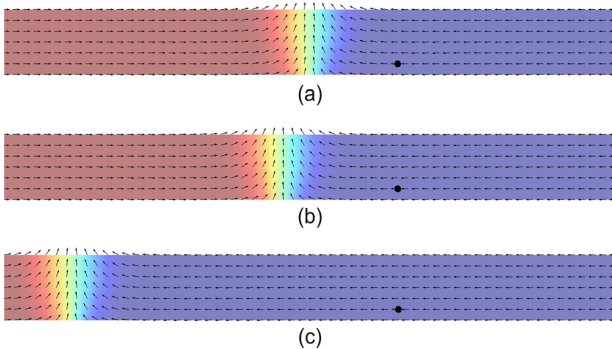


FIG. 3. Snapshots of the dynamical behavior of the TDW near a repulsive magnetic impurity $J'/J > 1$ in the nanowire with $\omega = 25$ nm. The black circle symbol represents a magnetic impurity. (a) A typical initial configuration with the TDW at the center of the nanowire and the magnetic impurity located eight sites away from the center. (b) Configuration after 7 ns. (c) Configuration after 14 ns showing TDW scattering by the magnetic impurity.

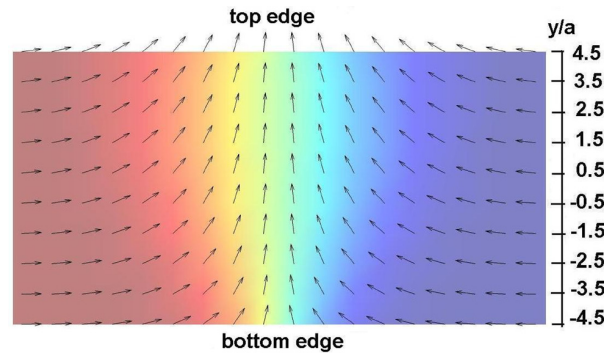


FIG. 4. Schematic view of how we consider the y position of the magnetic impurity in the nanowire. In this example, the nanowire has $\omega = 9a$. Bottom edge refers to the edge where the TDW magnetization points toward the inside of the nanowire, and top edge refers to the edge where the TDW magnetization points toward the outside of the nanowire.

energy and the interaction range depend on the width of the nanowire. For example, considering the magnetic impurity on the bottom edge, for $\omega = 45$ nm, the interaction range is $\approx 9a = 45$ nm and for $\omega = 25$ nm, the interaction range is $\approx 8a = 40$ nm. This is due to the fact that the wall-width parameter Δ depends on the ω .^{6,19} It can also be observed from Figures 5 and 7 that the interaction range r/a depends on the y position of the magnetic impurity in the nanowire. We have found that the nearer to the bottom edge is located the magnetic impurity, smaller is the interaction range. For $\omega = 45$ nm and $y/a = -4.5$, the interaction range is $\approx 9a = 45$ nm and for $\omega = 45$ nm and $y/a = 4.5$, the interaction range is $\approx 12a = 60$ nm. This is due to the fact that the TDW is narrower on the bottom edge.

We also analysed the behavior of the potential of interaction between the TDW and the magnetic impurity as a function of the relative distance (r/a) between them for various values of J'/J (see Fig. 8). We consider $\omega = 25$ nm and the magnetic impurity located on the bottom edge of the nanowire. We observed from Figure 8 that the interaction range does not depend on the ratio J'/J and the interaction energy has a Gaussian profile.

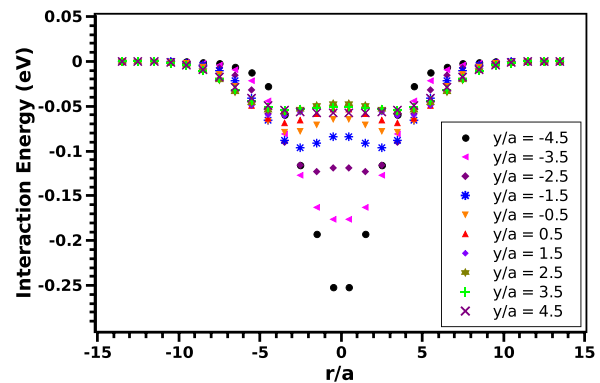


FIG. 5. Interaction energy as a function of the relative distance (r/a), between TDW and magnetic impurity considering the TDW located at the center of the nanowire ($r = 0$). The interaction energy was calculated for several values of the position to the magnetic impurity along the y -axis (y/a). Here, we consider $J'/J = 0.1$ and $\omega = 45$ nm.

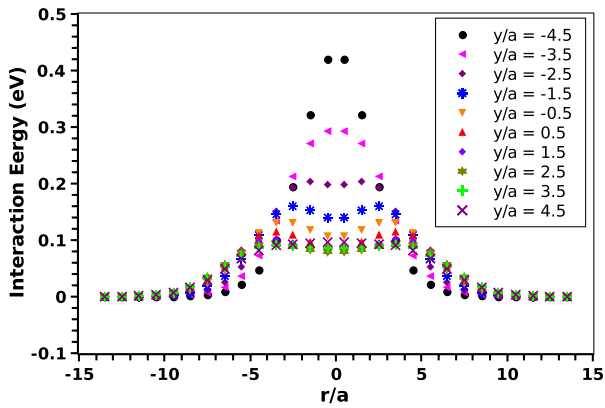


FIG. 6. Interaction energy as a function of the relative distance (r/a), between TDW and magnetic impurity considering the TDW located at the center of the nanowire ($r=0$). The interaction energy was calculated for several values of the position to the magnetic impurity along the y -axis (y/a). Here, we consider $J'/J = 2.5$ and $\omega = 45$ nm.

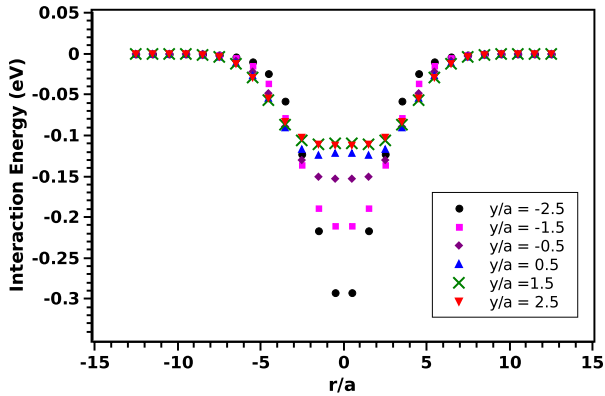


FIG. 7. Interaction energy as a function of the relative distance (r/a), between TDW and magnetic impurity considering the TDW located at the center of the nanowire ($r=0$). The interaction energy was calculated for several values of the position to the magnetic impurity along the y -axis (y/a). Here, we consider $J'/J = 0.1$ and $\omega = 25$ nm.

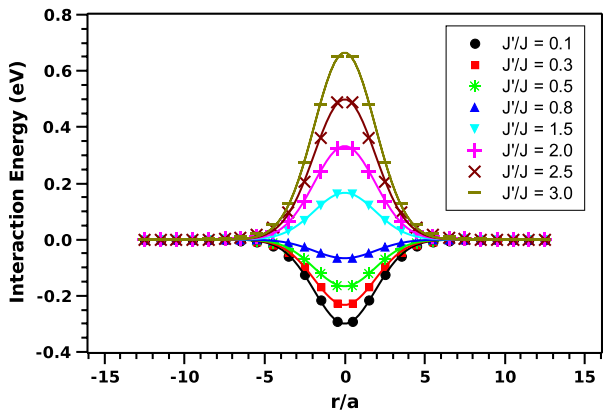


FIG. 8. Interaction energy as a function of the relative distance (r/a), between TDW and magnetic impurity considering the TDW located at the center of the nanowire ($r=0$). The interaction energy was calculated for several values of the J'/J . Here, we consider $\omega = 25$ nm and the impurity located on the bottom edge of the nanowire at $y/a = -2.5$.

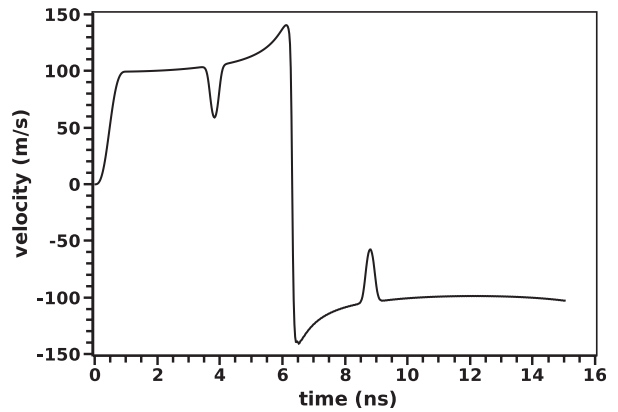


FIG. 9. TDW velocity as a function of time in a nanowire with $\omega = 10$ nm and a magnetic impurity ($J'/J = 1.5$) at $r/a = 70$, $y/a = -1.5$. The applied magnetic field pulse has the amplitude 2 mT and 1.0 ns.

Finally, we consider the application of a magnetic field pulse given by Eq. (3) with $b_i^{ext} = 2$ mT and 1.0 ns along the positive x -axis of a nanowire with $\omega = 25$ nm and a magnetic impurity at $r/a = 70$ and $y/a = -1.5$. During the field pulse, the TDW reaches a velocity of 100 m/s and continues the movement along the positive x -axis direction of the nanowire, as shown in Figure 9. At 3.90 ns, the TDW passes through the magnetic impurity and due to its influence, we observed an instantaneous variation in the TDW velocity. At 6.40 ns, the TDW reaches the edge of the nanowire, where it is reflected and starts to move in the opposite direction (negative velocity).²⁰ We can also observe a similar instantaneous variation in the TDW velocity when it passes again through the magnetic impurity. Thus, we can observe that the presence of magnetic impurities affects the velocity of the TDW. A quantitative study of the effect of magnetic impurities on the TDW motion can be done in the future to further conclusions.^{39,40}

IV. CONCLUSION

In summary, we have used spin dynamics simulations to study the behavior of the interaction potential between TDW and magnetic impurities in magnetic nanowires. We use the model proposed in Ref. 34 for magnetic impurities. We observed that if the exchange constant strength J' between magnetic sites of the sample and that one containing the impurity is smaller than the exchange coupling constant J between magnetic sites in the sample ($J' < J$), the interaction potential between TDW and the impurity is attractive. If $J' > J$, the interaction potential between TDW and the impurity is repulsive. We used the known values of the parameters for the Permalloy-79. We have found that the interaction range and the interaction energy between TDW and magnetic impurities depend on the position of the impurity along the transverse direction in the nanowire. The nearer to the bottom edge is located the magnetic impurity, the larger is the magnitude of the interaction energy, which agrees with experimental observations. The interaction energy and the interaction range depend on the width of the nanowire. We also observed that the presence of magnetic impurity affects

the motion of the TDW. A nonmagnetic defect, such as a cavity, has already been intentionally incorporated in Permalloy nanomagnets by using an image reversal electron beam lithography process.^{41,42} A cluster of magnetic impurities can be lithographically inserted in nanowires by depositing a ferromagnetic material into a cavity previously created. The inclusion of a cluster of magnetic impurities can induce changes in the magnetic properties locally. A local reduction of the magnetization saturation by the insertion of soft magnetic material acts as a pinning region for the TDW²⁸ and we believe that a local increase would act as a scattering region. The insertion of hard magnetic material besides inducing a local variation of the magnetization saturation can also affect locally the magnetocrystalline anisotropy. As the exchange energy dominates, we believe that a local variation in the magnetocrystalline anisotropy should not affect qualitatively our results, but a quantitative study can be done to further conclusions. We observe that a potential technological application in memory devices can be the use of magnetic impurities lithographically inserted in magnetic nanowires to control the positions of the domain walls.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by CNPq and FAPEMIG (Brazilian Agencies). Numerical works were done at the Laboratório de Simulação Computacional do Departamento de Física da UFJF.

- ¹D. A. Allwood, G. Xiong, C. C. Faulkner, D. Atkinson, D. Petit, and R. P. Cowburn, *Science* **309**, 1688 (2005).
- ²K. Nagai, Y. Cao, T. Tanaka, and K. Matsuyama, *J. Appl. Phys.* **111**, 07D130 (2012).
- ³S. S. P. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, *Science* **320**, 190 (2008).
- ⁴M. Hayashi, L. Thomas, R. Moriya, C. Rettner, and S. S. P. Parkin, *Science* **320**, 209 (2008).
- ⁵R. D. McMichael and M. J. Donahue, *IEEE Trans. Magn.* **33**, 4167 (1997).
- ⁶Y. Nakatani, A. Thiaville, and J. Miltat, *J. Magn. Magn. Mater.* **290**, 750 (2005).
- ⁷D. Atkinson, D. A. Allwood, G. Xiong, M. D. Cooke, C. C. Faulkner, and R. P. Cowburn, *Nature Mater.* **2**, 85 (2003).
- ⁸C.-Y. You, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 192514 (2008).
- ⁹M. Negoita, T. J. Hayward, and D. A. Allwood, *Appl. Phys. Lett.* **100**, 072405 (2012).
- ¹⁰A. Goussev, J. M. Robbins, and V. Slustikov, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 147202 (2010).
- ¹¹G. S. D. Beach, C. Nistor, C. Knutson, M. Tsoi, and J. L. Erskine, *Nature Mater.* **4**, 741 (2005).
- ¹²J. He, Z. Li, and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **73**, 184408 (2006).
- ¹³M. Hayashi, L. Thomas, C. Rettner, R. Moriya, Y. B. Bazaly, and S. S. P. Parkin, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 037204 (2007).
- ¹⁴G. S. D. Beach, M. Tsoi, and J. L. Erskine, *J. Magn. Magn. Mater.* **320**, 1272 (2008).
- ¹⁵S. Fukami, T. Suzuki, Y. Nakatani, N. Ishiwata, M. Yamanouchi, S. Ikeda, N. Kasai, and H. Ohno, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 082504 (2011).
- ¹⁶R. Wieser, T. Stapelfeldt, E. Y. Vedmedenko, and R. Wiesendanger, *EPL* **97**, 17009 (2012).
- ¹⁷T. A. Moore, P. Mohrke, L. Heyne, A. Kaldun, M. Klau, D. Backes, J. Rhensius, L. J. Heyderman, J.-U. Thiele, G. Woltersdorf, A. F. Rodriguez, F. Nolting, T. O. Menten, M. A. Nio, A. Locatelli, A. Potenza, H. Marchetto, S. Cavill, and S. S. Dhesi, *Phys. Rev. B* **82**, 094445 (2010).
- ¹⁸H.-G. Piao, X. Zhang, H.-C. Choi, D.-H. Kim, and C.-Y. You, *J. Appl. Phys.* **111**, 07D301 (2012).
- ¹⁹A. Thiaville, J. M. Garcia, and J. Miltat, *J. Magn. Magn. Mater.* **242**, 1061 (2002).
- ²⁰D. G. Porter and M. J. Donahue, *J. Appl. Phys.* **95**, 6729 (2004).
- ²¹A. Kunz, *J. Appl. Phys.* **99**, 08G107 (2006).
- ²²N. L. Schryer and L. R. Walker, *J. Appl. Phys.* **45**, 5406 (1974).
- ²³J. Yang, C. Nistor, G. S. D. Beach, and J. L. Erskine, *Phys. Rev. B* **77**, 014413 (2008).
- ²⁴K. Kondou, N. Ohshima, D. Chiba, S. Kasai, K. Kobayashi, and T. Ono, *J. Phys. Condens. Matter.* **24**, 024217 (2012).
- ²⁵D. Bedau, M. Klau, M. T. Hau, S. Krzyk, and U. Rudiger, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 256602 (2008).
- ²⁶T.-A. Óvari, S. Corodeanu, and H. Chiriac, *J. Appl. Phys.* **109**, 07D502 (2011).
- ²⁷F. G. Sanchez, H. Szabolcs, A. P. Mihai, L. Vila, A. Marty, J.-P. Attan, J. C. Toussaint, and L. D. B. Prejbeanu, *Phys. Rev. B* **81**, 134408 (2010).
- ²⁸A. Vogel, S. Wintz, T. Gerhardt, L. Bocklage, T. Strache, M.-Y. Im, P. Fisher, J. Fassbender, J. McCord, and G. Meier, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 202501 (2011).
- ²⁹M.-Y. Im, L. Bocklage, P. Fisher, and G. Meier, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 147204 (2009).
- ³⁰D. Bedau, M. Klau, S. Krzyk, and U. Rudiger, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 146601 (2007).
- ³¹S.-M. Ahn, K.-W. Moon, D.-H. Kim, and S.-B. Choe, *J. Appl. Phys.* **111**, 07D309 (2012).
- ³²X. Jiang, L. Thomas, R. Moriya, and S. S. P. Parkin, *Nano Lett.* **11**, 96 (2011).
- ³³M. Vsqez, G. A. Basheed, G. Infante, and R. P. D. Real, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 037201 (2012).
- ³⁴D. Toscano, S. A. Leonel, R. A. Dias, P. Z. Coura, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **109**, 076104 (2011).
- ³⁵D. Toscano, S. A. Leonel, R. A. Dias, P. Z. Coura, J. C. S. Rocha, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **109**, 014301 (2011).
- ³⁶L. Berger, Y. Labaye, M. Tamine, and J. M. D. Coey, *Phys. Rev. B* **77**, 104431 (2008).
- ³⁷J. H. Silva, D. Toscano, F. Sato, P. Z. Coura, B. V. Costa, and S. A. Leonel, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3083–3086 (2012).
- ³⁸D. Toscano, S. A. Leonel, P. Z. Coura, F. Sato, R. A. Dias, and B. V. Costa, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 252402 (2012).
- ³⁹B. N. Filippov, M. N. Dubovik, and L. G. Korzunin, *Phys. Met. Metallogr.* **112**, 330 (2011).
- ⁴⁰I. M. Miron, T. Moore, H. Szabolcs, L. D. B. Prejbeanu, S. Auffret, B. Rodmacq, S. Pizzini, J. Vogel, M. Bonfim, A. Schuhl, and G. Gaudin, *Nature Mater.* **10**, 419 (2011).
- ⁴¹M. Rahm, J. Biberger, V. Umansky, and D. Weiss, *J. Appl. Phys.* **93**, 7429 (2003).
- ⁴²M. Rahm, R. Hillinger, V. Umansky, and D. Weiss, *J. Appl. Phys.* **95**, 6708 (2004).

