

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

Antonio Kaeliton Ferro da Silva

**ESTUDO DO PROBLEMA PADRÃO NÚMERO 3 VIA SIMULAÇÃO
MICROMAGNÉTICA UTILIZANDO INTERAÇÃO DIPOLAR.**

Juiz de Fora

2024

Antonio Kaeliton Ferro da Silva

**ESTUDO DO PROBLEMA PADRÃO NÚMERO 3 VIA SIMULAÇÃO
MICROMAGNÉTICA UTILIZANDO INTERAÇÃO DIPOLAR.**

Dissertação apresentada ao Programa Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física. Área de concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura

Juiz de Fora

2024

Ficha catalográfica elaborada através do Modelo Latex do CDC da UFJF
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Silva, Antonio Kaeliton Ferro da.

ESTUDO DO PROBLEMA PADRÃO NÚMERO 3 VIA SIMULAÇÃO
MICROMAGNÉTICA UTILIZANDO INTERAÇÃO DIPOLAR. / Antonio
Kaeliton Ferro da Silva. – 2024.

83 f. : il.

Orientador: Pablo Zimmermann Coura

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Instituto
de Ciências Exatas. Programa Pós-Graduação em Física, 2024.

1. Simulação Micromagnética. 2. Problema Padrão Número 3. 3.
Campo Desmagnetizante. 4. Interação Dipolar I. Coura, Pablo Zimmer-
mann, orient. II. Título.

Antonio Kaeliton Ferro da Silva

Estudo do Problema Padrão Número 3 via simulação Micromagnética utilizando interação dipolar

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física. Área de concentração: Física.

Aprovada em 24 de abril de 2024.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura - Orientador

Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Julio Cesar Siqueira Rocha

Universidade Federal de Ouro Preto

Prof. Dr. Sócrates de Oliveira Dantas

Universidade Federal de Juiz de Fora

Juiz de Fora, 11/04/2024.



Documento assinado eletronicamente por **Pablo Zimmermann Coura, Membro**, em 24/04/2024, às 16:20, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Socrates de Oliveira Dantas, Professor(a)**, em 24/04/2024, às 16:21, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Julio Cesar Siqueira Rocha, Usuário Externo**, em 24/04/2024, às 19:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Uffj (www2.uff.br/SEI) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **1778855** e o código CRC **DOC3D465**.

Dedico este trabalho à minha irmã, Maria Paula, por ser a pessoa mais importante para mim.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Marilúcia Silva Ferro e Antônio Carlos da Silva, por estarem sempre ao meu lado, oferecendo apoio incondicional e as condições necessárias para a realização dos meus objetivos. Sou profundamente grato pela vida que me proporcionaram e pelo amor constante.

A todos os meus familiares, em especial a Reginalda Silva, Maria Silva, Evaldo César e Clara dos Anjos, pela assistência e carinho durante a minha graduação, bem como pelo incentivo e suporte que me ajudaram a alcançar o nível de mestrado.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura, pela orientação e aprendizado fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho, além dos valiosos ensinamentos e conselhos que contribuíram significativamente para minha formação acadêmica.

À Universidade Federal de Juiz de Fora, por toda a infraestrutura necessária que permite que nós, alunos do programa, possamos desenvolver nossas pesquisas. Expresso também minha gratidão aos professores do Departamento de Física, em especial ao Prof. Dr. José Paulo, Prof. Dr. Fernando Sato, Prof^a. Dra. Maria Cristina, Prof. Dr. Maikel Yusat e Prof. Dr. Virgílio de Carvalho, pelo conhecimento compartilhado ao longo desses dois anos, contribuindo diretamente para minha formação acadêmica. Também aos servidores do Departamento de Física, em especial o Sr. Domingos e o Sr. Gustavo.

Ao Laboratório de Simulação Computacional do Departamento de Física da UFJF, pelo fornecimento dos equipamentos necessários para a execução das simulações presentes neste trabalho.

Aos colegas do meu grupo de pesquisa, Diego Carvalho, Isaac Santece e Henrique Santiago, pela colaboração na produção deste trabalho, assim como pelo o conhecimento compartilhado e pela parceria.

Aos colegas de doutorado e mestrado da UFJF, Anna Luísa, André Lucas, Marina Totti, Yuri Apaza, Jhannes Toledo, Benny Guedes, Alan Diniz, Alessandro de Oliveira, Andrezza Arêas, Gabriel Souza, Cristian Camilo e Marlon Modesto pela parceria e pelo compartilhamento de conhecimentos nas disciplinas e nos momentos de descontração.

Aos meus queridos colegas e ex-professores da graduação do Departamento de Física da Universidade Estadual do Piauí.

Aos meus amigos e colegas, Fábio, Sidiney, Dona Tereza, Thiago, William, Neto, Aldeilson, Helber e Bruno, pelos incentivos e conselhos construtivos que sempre me encorajaram a seguir em frente na busca pelos objetivos. Agradeço também as pessoas que, de alguma forma, contribuíram indiretamente para a minha formação acadêmica.

À FAPEMIG, pelo apoio financeiro, e à CAPES e CNPq, pelo suporte oferecido aos demais alunos do programa de Pós-Graduação em Física da UFJF.

"O sujeito que não for pelo menos um dia FLAMENGO não viveu. O FLAMENGO é uma força da natureza. Quando o FLAMENGO espirra, é o futebol brasileiro que fica resfriado."

-Nelson Rodrigues

RESUMO

O micromagnetismo é uma teoria de campo de sistemas magnéticos que trata, de forma semi-clássica, materiais magnéticos na escala nanométrica. Através dessa metodologia, podemos estudar estados de mínima energia de partículas magnéticas cúbicas de volume L^3 , com anisotropia uniaxial relativa à densidade de energia magnetostática de valor igual a $Q = 0, 1$, ao longo de um dos eixos cúbicos. Esses sistemas são investigados em função do número de células de simulação N^3 dessas partículas. Neles, é possível encontrar três configurações: o estado de flor (flower state), o estado de flor torcida (twisted flower state) e o estado de vórtice (vortex state). Esse estudo é referido como o problema padrão número 3 (μ MAG Standard Problem #3), proposto pelo Grupo de Modelagem Micromagnética do NIST, sendo utilizado como referência para comparação entre diferentes métodos em simulações micromagnéticas. Neste trabalho, comparamos nossos resultados obtidos via técnicas de simulação micromagnética, utilizando interação dipolar, com os resultados da literatura que empregam campo desmagnetizante. Sabe-se que o comprimento de borda crítico, definido pela razão entre o comprimento L e o comprimento de troca l_{tr} , tem um valor aproximado de 8,40 para a mudança de estados (flor \Rightarrow vórtice e flor torcida \Rightarrow vórtice), conforme relatado na literatura. Em nossos estudos, variamos o comprimento $L = Na$, em função do número de células N de simulação e da distância a entre as células, para obter a razão L/l_{tr} para cada N . Verificamos que, a partir de $N \geq 15$, a razão L/l_{tr} converge para o valor aproximado de 8,43, não variando significativamente para tamanhos N maiores.

Palavras-chave: Simulação Micromagnética. Problema Padrão Número 3. Campo Desmagnetizante. Interação Dipolar.

ABSTRACT

Micromagnetism is a field theory of magnetic systems that use the semi-classically approximation to magnetic materials at the nanoscale. We can study the minimum energy states of cubic magnetic particles with a volume of L^3 , and a uniaxial anisotropy relative to the magnetostatic energy density of value equal to $Q = 0.1$, along one of the cubic axes. These systems are investigated as a function of the number of simulation cells N^3 . In them, it is possible to find three configurations: the flower state, the twisted flower state, and the vortex state. This study is referred to as the μ MAG Standard Problem #3, proposed by the NIST Micromagnetic Modeling Group, and is used as a reference for comparison between different methods in micromagnetic simulations. In this work, we compare our results obtained via micromagnetic simulation techniques, using dipolar interaction, with results found in the literature using demagnetization field. It is known that the critical edge length, defined by the ratio between the length L and the exchange length l_{tr} , has an approximate value of 8.40 for the state changes (flower \Rightarrow vortex and twisted flower \Rightarrow vortex), as reported in the literature. In our studies, we vary the length $L = Na$, as a function of the number of simulation cells N and the distance a between the cells, to obtain the ratio L/l_{tr} for each N . We verify that, starting from $N \geq 15$, the ratio L/l_{tr} converges to the approximate value of 8.43, not significantly varying for larger N sizes.

Keywords: Micromagnetic Simulation. μ MAG Standard Problem #3. Demagnetization Field. Dipolar Interaction.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1.1 – Ilustração de um sistema cúbico micromagnético em função de células antes de ser relaxado ao equilíbrio. Cada célula contém um momento magnético resultante local.	14
Figura 2.1 – Acoplamento entre \vec{J} , \vec{L} e \vec{S} da interação spin-órbita.	19
Figura 2.2 – Momentos sendo orientados pelo campo externo em um material paramagnético.	21
Figura 2.3 – Domínios magnéticos em um material ferromagnético. Cada um deles tem sua magnetização e orientação preferencial devido a interação entre vários momentos próximos e distantes.	22
Figura 2.4 – Ilustração do ordenamento magnético de materiais (a) ferromagnéticos, (b) antiferromagnéticos e (c) ferrimagnéticos a temperatura $T = 0$	22
Figura 2.5 – A curva de histerese para materiais ferromagnéticos.	23
Figura 2.6 – Campo externo aplicado a um material, orientando os momentos na direção de \vec{H}^{ext}	24
Figura 2.7 – Spins em uma interação de troca. Somente primeiros vizinhos com cores vermelha e azul interagem entre si.	26
Figura 2.8 – Campo Desmagnetizante orientado antiparalelamente a magnetização.	28
Figura 2.9 – Interação dipolar entre dois momentos magnéticos, localizados respectivamente nos sítios 1 e 2.	30
Figura 2.10 – Representação da interação dipolar em uma rede com N momentos. Em azul, o momento interage com todos os outros momentos em vermelho.	30
Figura 3.1 – (a) Precessão do momento com $\alpha = 0$ não amortecida: O $\vec{\mu}$ não para de precessionar. (b) Precessão do momento com $\alpha > 0$: $\vec{\mu}$ precessiona até se alinhar ao campo efetivo.	35
Figura 3.2 – Representação dos vetores atuantes sobre o momento magnético $\vec{\mu}$, em (a) sem amortecimento, $\alpha = 0$ e (b) com amortecimento, $\alpha > 0$	35
Figura 4.1 – Esquema do método da simulação micromagnética em duas dimensões. (a) Representa um sistema magnético real e (b) um sistema discretizado em células através da aproximação do método micromagnético, em que ele prevê com eficiência o cálculo das propriedades físicas.	37
Figura 4.2 – Domínios uniformes a serem encontrados: (a) é o estado de flor, (b) o estado de flor torcida e (c) o estado de vórtice em um cubo com as mesmas dimensões.	42
Figura 5.1 – Orientação inicial dos momentos magnéticos. (a) Os momentos magnéticos estão paralelos ao eixo fácil e (b) metade dos momentos estão antiparalelos ao eixo fácil.	44

Figura 5.2 – Domínio uniforme encontrado, conhecido como estado de flor. Para a menor grade é mostrado em (a) com $N = 5$, para (b) com $N = 15$ e para a maior grade em (c) com $N = 21$	48
Figura 5.3 – (a) Perspectiva da base do cubo ($z = -L/2$) com os momentos convergindo para dentro. (b) Para o topo ($z = +L/2$), os momentos saem do plano do cubo.	49
Figura 5.4 – Recorte da face lateral do cubo em $x = +L/2$. A magnetização é não homogênea nas bordas. Essa perspectiva também se aplica para $y = \pm L/2$	50
Figura 5.5 – Domínio uniforme encontrado, conhecido como estado de flor torcida, para a menor grade (a) $N = 5$, para (b) $N = 15$, e para a maior grade (c) $N = 21$	51
Figura 5.6 – (a) Projeção do topo do cubo ($z = +L/2$) e a (b) base do cubo ($z = -L/2$) no estado de flor torcida.	52
Figura 5.7 – (a) Lateral do cubo no estado de flor torcida para ($x = +L/2$). (b) Lateral do cubo ($x = -L/2$). Essas seções transversais também se aplicam para $y = \pm L/2$	53
Figura 5.8 – Seção transversal no meio do cubo em $x = 0$ para o estado de flor torcida em uma rede com $N = 15$. Obtemos também essa mesma perspectiva para $y = 0$	54
Figura 5.9 – Seção transversal do meio do cubo em $z = 0$ para o estado de flor torcida em uma rede com $N = 15$. Temos uma espiral ou vórtice simétrico.	55
Figura 5.10 – Componente da magnetização m_z em função da razão L/l_{tr} para a menor rede ($N = 5$) evidenciando a mudança do estado de flor para estado de flor torcida.	55
Figura 5.11 – Componente da magnetização m_z em função da razão L/l_{tr} para a maior rede ($N = 21$) evidenciando a mudança do estado de flor para estado de flor torcida.	56
Figura 5.12 – Minimização da energia total em função do tempo do cubo para uma rede $N = 15$ do estado de flor na razão $L/l_{tr} = 7, 80$	57
Figura 5.13 – Minimização da energia total em função do tempo do cubo para uma rede $N = 15$ do estado de flor e flor torcida na razão $L/l_{tr} = 8, 20$, onde obtemos uma curva.	57
Figura 5.14 – Estado de flor torcida em $L/l_{tr} = 12, 0$ para uma rede $N = 15$. Nesse tamanho, ao iniciar a simulação, ele é o único estado obtido.	58
Figura 5.15 – Seção transversal da lateral do cubo em (a) $x = \pm L/2$ e (b) $z = 0$, com os momentos saindo para fora do plano.	59
Figura 5.16 – Domínio uniforme encontrado, conhecido como estado de vórtice, para a menor grade (a) $N = 5$, para (b) $N = 15$, e para a maior grade (c) $N = 21$	61
Figura 5.17 – Seção transversal da lateral do cubo em (a) $x = +L/2$ e (b) $x = -L/2$ para o estado de vórtice em uma rede $N = 15$	62

Figura 5.18–Seção transversal da lateral do cubo em (a) $y = +L/2$ e (b) $y = -L/2$ para o estado de vórtice em uma rede $N = 15$. Também obtemos essa mesma perspectiva para $z = \pm L/2$	63
Figura 5.19–Perspectiva do centro do cubo em (a) $x = 0$ e (b) $y = 0$ para o estado de vórtice na grade $N = 15$	64
Figura 5.20–Energia total em função do tempo para maior rede $N = 21$, onde mostra o estado de vórtice mais energético que o estado de flor comum em $L/l_{tr} = 8,00$	65
Figura 5.21–Energia total em função do tempo para maior rede $N = 21$, onde mostra o estado de vórtice mais energético que o estado de flor comum e do estado de flor torcida, sendo que este último aparece após o primeiro platô na razão $L/l_{tr} = 8,40$	66
Figura 5.22–Energia total em função do tempo para maior rede $N = 21$, onde mostra somente o estado de flor mais energético que o estado de vórtice na razão $L/l_{tr} = 8,43$. O estado de flor torcida é o que tem menor energia nesse comprimento de borda.	66
Figura 5.23–Razão L/l_{tr} em função do número N de células de simulação para a mudança energética entre o estado de flor e o estado de vórtice.	67
Figura 5.24–Energia total em função do tempo para maior rede $N = 21$. O estado de flor torcida está mais energético que o estado de vórtice na razão $L/l_{tr} = 8,46$. A partir desse comprimento de borda, o estado de vórtice é o mais favorável energeticamente.	69

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1 – Grandezas Magnéticas utilizadas para a simulação do cubo. As grandezas estão em unidades reduzidas.	47
Tabela 5.2 – Parâmetros utilizados na simulação para descrever a evolução temporal.	56
Tabela 5.3 – Conjunto de soluções para o comprimento de borda crítico, onde as energias do estado de flor passam a ser maiores que o estado de vórtice. É destacado em vermelho o nosso resultado.	68

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	16
2.1	PROPRIEDADES FUNDAMENTAIS DO MAGNETISMO	16
2.1.1	Diamagnetismo e Paramagnetismo	20
2.1.2	Magnetismo Coletivo	21
2.2	INTERAÇÕES MAGNÉTICAS	24
2.2.1	Efeito Zeeman	24
2.2.2	Interação de Troca	25
2.2.3	Interação de Anisotropia Magnetocristalina	27
2.2.4	Anisotropia de Forma e Campo Desmagnetizante	27
2.2.5	Interação Dipolar	29
2.3	HAMILTONIANA DO SISTEMA E CAMPO MAGNÉTICO EFETIVO	31
3	DINÂMICA DE SPINS - A EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ- GILBERT (LLG)	33
4	METODOLOGIA - SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA . .	37
4.1	SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA	37
4.2	HAMILTONIANA MICROMAGNÉTICA	39
4.3	O PROBLEMA PADRÃO NÚMERO 3	41
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	44
5.1	CONDIÇÕES INICIAIS	44
5.2	ESTADO DE FLOR	47
5.3	ESTADO DE FLOR TORCIDA	50
5.4	ESTADO DE VÓRTICE	60
6	CONCLUSÕES	70
	REFERÊNCIAS	71
	APÊNDICE A - Demonstração da Energia Magnetostática Através do Campo Desmagnetizante	77
	APÊNDICE A - Conservação do Momento Magnético da Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG)	82

1 INTRODUÇÃO

Desde os tempos antigos, a humanidade tem sido intrigada pelos fenômenos magnéticos, cujas raízes remontam aos primórdios da história. A descoberta dos materiais magnéticos teve início na província de Magnésia, na Grécia antiga, com o reconhecimento da magnetita (1). Esse material desempenhou um papel fundamental na história da humanidade, desde sua utilização inicial na construção das bússolas primitivas na China antiga, até o desenvolvimento das modernas tecnologias que empregam os materiais magnéticos. No entanto, a compreensão profunda desses materiais demandou um longo período de investigação e estudo. Vários campos de estudo e pesquisa foram desenvolvidos para a compreensão dos materiais magnéticos, entre eles o micromagnetismo. Nas últimas décadas, a humanidade presenciou um salto tecnológico sem precedentes, impulsionado em grande parte pelos avanços no campo do micromagnetismo.

A frase "micromagnetismo" foi inicialmente definida por Brown em 1958 e hoje é amplamente reconhecida como a teoria predominante para o magnetismo aplicado computacional (1). Trata-se de uma teoria que fornece uma descrição contínua dos materiais magnéticos, permitindo o cálculo das configurações de spins em amostras com formas arbitrárias (2). Existem várias possíveis aplicações tecnológicas derivadas da teoria do micromagnetismo, como a gravação magnética, que inclui os discos rígidos (HDs) (3, 4, 5, 6), as memórias de acesso aleatório (RAMs) (7, 8), skyrmions magnéticos para dispositivos lógicos, nanofios magnéticos e aplicações biomédicas (9).

Para o estudo e compreensão do micromagnetismo, bem como para o entendimento dessas aplicações mencionadas, é primordial a utilização das simulações micromagnéticas, uma vez que elas são amplamente empregadas no estudo de fenômenos relacionados à dinâmica dos momentos magnéticos (10). Elas são de suma importância para a compreensão de características microestruturais. Na literatura, existe uma variedade de pesquisas sobre os materiais magnéticos por meio de simulações computacionais. Cada vez mais, a comunidade científica está empenhada em desenvolver softwares micromagnéticos confiáveis, a fim de obter cada vez mais precisão no estudo dos fenômenos relacionados aos materiais magnéticos. Alguns solucionadores micromagnéticos disponíveis na literatura para pesquisa de materiais magnéticos nanoestruturados são o OOMMF (11), Mumax³ (12), MagTense (13), FIDIMAG (14) e o MicroMagnum (15).

Um software micromagnético, por exemplo, simula um sistema magnético escrevendo todas as energias de um sistema e, em seguida, minimiza toda essa energia através da dinâmica dos momentos magnéticos, que são calculados pela equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (16, 17), determinando assim as configurações de estruturas magnéticas. Para verificar se um software micromagnético possui uma boa previsão dos fenômenos, verificação de dados teóricos e experimentais, é comum que este solucionador seja validado

através dos chamados problemas padrões do micromagnetismo (μ MAG Standard Problems) (18). Um exemplo de problema padrão é a minimização de energia de partículas cúbicas, que são definidas com uma anisotropia uniaxial em direção ao seu eixo fácil, com volume L^3 e escrita em função do número de células N^3 do sistema, como ilustra a figura (1.1).

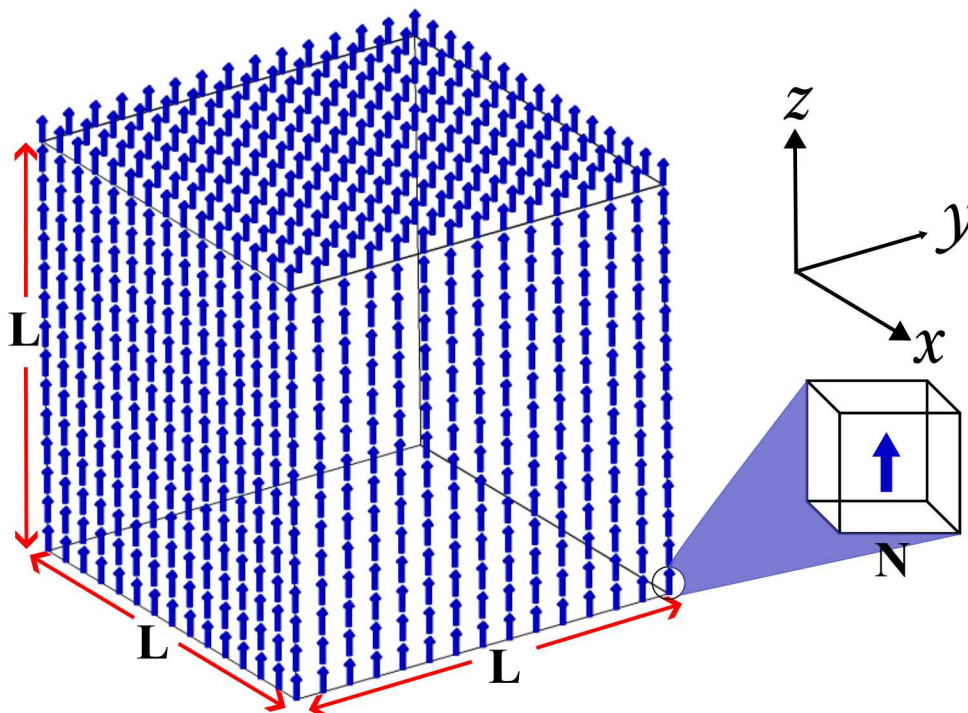


Figura 1.1 – Ilustração de um sistema cúbico micromagnético em função de células antes de ser relaxado ao equilíbrio. Cada célula contém um momento magnético resultante local.

Fonte: Produzida pelo autor.

Ao encontrar os estados de mínima energia dessas partículas, obtemos três configurações de domínio único conhecidas como estados de flor, flor torcida e vórtice. Além dos domínios únicos, o objetivo é encontrar o comprimento de borda crítico, que é dado pela razão entre o comprimento de aresta L do cubo e o comprimento de troca l_{tr} , onde este mede uma indicação do alcance da interação entre os momentos magnéticos. Essa razão nos fornecerá em qual valor do tamanho do sistema esses três estados se tornam mais favoráveis energeticamente entre si.

Neste trabalho, propomos uma solução utilizando um código micromagnético próprio desenvolvido pelo Grupo de Física da Matéria Condensada da Universidade Federal de Juiz de Fora (GFMC - UFJF) para encontrar esses domínios únicos e o comprimento de borda crítico. As interações usadas são: interação de troca, interação de anisotropia uniaxial e interação dipolar, sendo esta última uma alternativa que substitui a interação usual na literatura, conhecida como campo desmagnetizante. Através da nossa solução, faremos uma comparação com os resultados da literatura, com o objetivo de verificar se nosso método, através da interação dipolar, é adequado e preciso.

No capítulo 2, apresentamos resumidamente as propriedades do magnetismo, desde a origem dos fenômenos magnéticos até os tipos de materiais magnéticos. Em seguida, apresentamos as interações que estarão presentes em nossas simulações, bem como as energias respectivas e, conseqüentemente, resultando no campo efetivo do nosso sistema.

No capítulo 3, discutiremos um pouco da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, responsável pela dinâmica da magnetização que será resolvida através de métodos de integração numérica em nosso programa.

No capítulo 4, faremos a aproximação das interações presentes no nosso sistema para o método micromagnético e discutiremos o problema padrão número 3.

No capítulo 5, apresentaremos as condições iniciais do problema padrão número 3 aplicadas à nossa metodologia, e em seguida, discutiremos os resultados obtidos das nossas simulações, fazendo o comparativo desenvolvido pela literatura.

No capítulo 6, abordaremos as considerações finais dos resultados e as perspectivas futuras.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A teoria do micromagnetismo possui uma variedade de aplicações na engenharia e física. Um dos desafios mais importantes dessa teoria está relacionado à forma de discretização das células micromagnéticas (1). Uma possibilidade para analisar a discretização de um sistema micromagnético é estudar os estados de menor energia de partículas magnéticas cúbicas de volume L^3 com anisotropia magnética uniaxial de valor igual à $K_u = 0,1K_m$, onde K_m é a densidade de energia magnetostática, que está ao longo de um dos eixos cúbicos, em função do número de células de simulação N^3 dessas partículas. Nesses sistemas, é possível encontrar três configurações de mínima energia: flower state (estado de flor), twisted flower state (estado de flor torcida) e vortex state (estado de vórtice). Esse estudo é referido como o problema padrão número 3 (μ MAG Standard Problem #3) e é usado como referência para comparação entre diferentes métodos usados em simulações micromagnéticas e verificação de possíveis erros e "bugs" no software micromagnético. Em nossos resultados, utilizamos a interação dipolar e fazemos uma comparação com os resultados da literatura usando campo desmagnetizante.

Neste capítulo, apresentamos um resumo dos conceitos e definições básicas do magnetismo necessários para descrever essas partículas cúbicas magnéticas utilizadas em nossas simulações. Exploramos as interações magnéticas envolvidas na formulação do problema, para definir a Hamiltoniana efetiva total do sistema.

2.1 PROPRIEDADES FUNDAMENTAIS DO MAGNETISMO

O primeiro estudo genuinamente científico do magnetismo veio através de um livro intitulado "Sobre o Magnetismo", publicado pelo inglês William Gilbert (1540 - 1603). Ele realizou estudos experimentais com magnetitas e ímãs de ferro, formando imagens claras do campo magnético da Terra e dissipando muitas superstições que haviam obscurecido o assunto. Após os estudos de William Gilbert, houve contribuições significativas na fabricação de ímãs compostos de aço, que eram capazes de levantar até 28 vezes seu próprio peso de ferro (19). Naquela época, havia apenas uma maneira de fabricar ímãs: o ferro ou aço tinham que ser esfregados com uma magnetita, ou com outro ímã que por sua vez tivesse sido esfregado com magnetitas. Não havia outro método até que o primeiro eletroímã foi feito em 1825, seguindo a grande descoberta feita em 1820 por Hans Christian Oersted (1775– 1851) de que uma corrente elétrica produz um campo magnético (19). A invenção do eletroímã disponibilizou a criação de campos magnéticos mais intensos do que aqueles produzidos por magnetitas, proporcionando o desenvolvimento de pesquisas sobre os materiais magnéticos.

Quando um material magnético está sujeito a um campo de indução magnética \vec{B}^{ext} , as partículas presentes interagem de maneira complexa, resultando na indução de

momentos magnéticos e, conseqüentemente, na geração de campos adicionais na matéria (20). Para estudar o magnetismo na matéria, recorreremos às equações de Maxwell (21, 22):

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho, \quad (2.1a)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.1b)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.1c)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad (2.1d)$$

onde:

$$\vec{D} = \epsilon_r \vec{E}, \quad (2.2a)$$

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_r} \vec{B}. \quad (2.2b)$$

Essas equações descrevem as relações fundamentais entre campos elétricos e magnéticos, proporcionando uma base teórica sólida para compreender esses fenômenos. No conjunto das equações (2.1), \vec{D} representa o deslocamento elétrico [C/m^2], ρ a densidade de carga [C/m^3], \vec{B} o vetor indução magnética [$\text{T} = \text{N}/\text{A}\cdot\text{m}$], \vec{E} é o campo elétrico [$\text{N}/\text{C} = \text{V}/\text{m}$], \vec{H} é o campo magnético [A/m] e \vec{J} é a densidade de corrente superficial [A/m^2].

Nas relações em (2.2), temos ϵ_r como a permissividade elétrica do meio material, medida em [$\text{C}^2/\text{N}\cdot\text{m}^2$] e μ_r como a permeabilidade magnética do meio¹ em unidades de [$\text{N}/\text{A}^2 = \text{T} \cdot \text{m}/\text{A}$].

Devido à interação do campo com muitas partículas na matéria, postula-se que o conjunto de equações (2.1) é aplicável também microscopicamente em todo o espaço, assim como no vácuo (20). Dentro desse contexto, ao considerarmos as equações de Maxwell e a compreensão dos momentos magnéticos, podemos estabelecer uma ligação vital entre a teoria eletromagnética fundamental e a teoria quântica, com o intuito de compreender as propriedades observáveis nos materiais magnéticos.

Estudos ao longo dos anos revelaram que esses materiais apresentam propriedades magnéticas significativas sob a ausência ou presença de campo magnético. Tais propriedades se dão ao fato da existência dos momentos magnéticos em sua estrutura. A origem desses momentos se dá devido a dois movimentos atribuídos ao elétron: o momento angular orbital e o momento angular de spin. Cada um deles tem um momento magnético associado, e que, somados, formam o momento magnético total (23).

¹ Aqui usamos μ_r para permeabilidade magnética do meio para não confundir com momento magnético atômico $\vec{\mu}$.

Escrevemos o momento magnético associado ao momento angular orbital de um sistema com muitos elétrons da seguinte forma:

$$\vec{\mu}_l = -g_l \frac{e}{2m_e} \vec{L}, \quad (2.3)$$

onde $g_l = 1$ é o fator de Landé orbital, e juntamente com m_e representam respectivamente a carga e a massa do elétron, e \vec{L} é o momento angular orbital total, dado por

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i, \quad (2.4)$$

uma vez que a soma inclui todos os elétrons do sistema (23). Se o momento angular do elétron tem sua componente orbital em uma direção qualquer, ela é quantizada, podendo assumir valores de $n\hbar$ (com $n = 1, 2, 3, \dots$) (24, 25), onde \hbar é a constante de Planck normalizada $\hbar = h/2\pi = 1,05 \times 10^{-34} [\text{J}\cdot\text{s}]$. Por exemplo, se o momento angular está associado a direção z , o menor valor de L , é $L_z = \hbar$.

No contexto do momento angular de spin, classicamente, não é possível determinar o momento magnético da mesma maneira que realizamos para o momento angular orbital. Portanto, é necessário utilizar os princípios da mecânica quântica para obter uma equação que advém da solução da equação de Dirac (26). O momento magnético associado ao momento angular de spin em uma distribuição com muitos elétrons é expressado como:

$$\vec{\mu}_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S} = -\gamma \vec{S}, \quad (2.5)$$

em que $g_s \approx 2,00$ é o fator de Landé para o elétron livre, uma correção que surge da teoria quântica, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,27 \times 10^{-34} [\text{A}\cdot\text{m}^2]$ é o magneton de Bohr, γ é a razão giromagnética, com valores para o elétron $\gamma = 1.76 \times 10^{11} [\text{C}/\text{Kg} = \text{T}/\text{s}]$, e \vec{S} é o momento angular total de spin, definido como

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i, \quad (2.6)$$

considerando também a soma sobre todos os elétrons do sistema. O momento magnético orbital e de spin interagem entre si de maneira bastante complexa (23). Na figura (2.1), é ilustrado como ocorre o acoplamento entre momento magnético e momento angular.

Nessa interação, os momentos angulares orbital e spin formam um momento angular total resultante:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (2.7)$$

A partir do momento angular total \vec{J} , calculamos o momento magnético total:

$$\vec{\mu} = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{J} = \gamma \vec{J}, \quad (2.8)$$

onde γ como já visto é a razão giromagnética e g o fator de Landé, sendo este último uma grandeza adimensional, obtido a partir da seguinte expressão:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \quad (2.9)$$

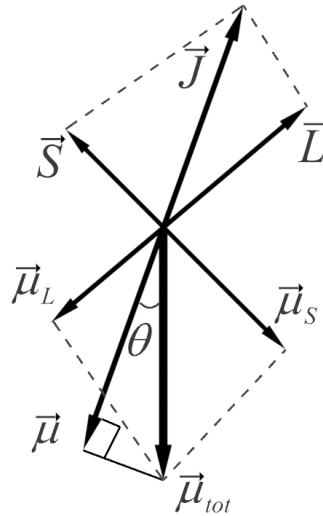


Figura 2.1 – Acoplamento entre \vec{J} , \vec{L} e \vec{S} da interação spin-órbita.
Fonte: Produzida pela referência (23) e modificada pelo autor.

com $J = |\vec{J}|$, $L = |\vec{L}|$ e $S = |\vec{S}|$ sendo os números quânticos totais (momento angular total, momento angular orbital e momento angular de spin). Esses números podem ser calculados a partir das regras de Hund (27).

Determinamos algumas propriedades dos materiais magnéticos a partir de grandezas macroscópicas como a magnetização \vec{M} , campo magnético \vec{H} , vetor indução magnética \vec{B} e a suscetibilidade magnética χ_m (28). Em um volume V , uma certa quantidade de átomos possui vários momentos magnéticos $\vec{\mu}$. A soma desses momentos totais é definida como a magnetização ou densidade de momento magnético por unidade de volume (21):

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i, \quad (2.10)$$

onde o somatório contém todos os momentos pelo volume da amostra, caracterizando-se como uma grandeza vetorial com unidades no S.I [A/m]. A intensidade de magnetização não apenas descreve o grau em que um corpo está magnetizado, mas também fornece informações sobre a interação desse material com um campo magnético externo \vec{H}^{ext} . O nível de magnetização do material é influenciado pela intensidade do campo magnético ao qual está sujeito (19, 28). Assim, na presença de magnetização, conforme as equações de Maxwell (2.1), estabelecemos relações entre \vec{B} , \vec{H} e \vec{M} (29) da seguinte forma:

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}). \quad (2.11)$$

É importante notar que a unidade de \vec{M} é a mesma de \vec{H} [A/m]. A relação entre a magnetização e o campo magnético é dada por

$$\vec{M} = \chi_m \vec{H}, \quad (2.12)$$

onde χ_m descreve a capacidade de um material se magnetizar sob a influência de um campo magnético externo, sendo uma grandeza adimensional. Amostras que obedecem

a expressão (2.12) podem ser consideradas pertencentes a meios lineares, isotrópicos e homogêneos, pois as propriedades físicas não dependem da direção e são constantes. Em casos de meios não-lineares, temos uma relação constitutiva para χ_m que envolve tensores (22).

Combinando as equações (2.11) com (2.12), obtemos a equação (2.2b)

$$\vec{B} = \mu_0(1 + \chi_m)\vec{H}, \quad (2.13)$$

$$\vec{B} = \mu_r\vec{H}, \quad (2.14)$$

onde μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo, e possui a mesma unidade de μ_r ($[\mu_0] = [\text{T} \cdot \text{m}/\text{A}]$). Podemos ainda escrever:

$$\kappa_r = (1 + \chi_m) = \frac{\mu_r}{\mu_0}. \quad (2.15)$$

Aqui, κ_r é a permeabilidade magnética relativa. Se χ_m for zero, o que representa um material não magnético (onde não há átomos ou íons com momentos para serem influenciados pelo campo magnético), então temos $\mu_r = \mu_0$ e conseqüentemente, $\vec{B} = \mu_0\vec{H}$, retornando a relação original.

2.1.1 Diamagnetismo e Paramagnetismo

A partir das propriedades físicas apresentadas até aqui, podemos classificar os materiais magnéticos conforme sua interação com um campo externo. Como mostrado, o momento magnético total de um material é a soma vetorial de todos os seus momentos eletrônicos, mas com algumas particularidades a serem consideradas. Dependendo do material, podem ocorrer diferentes tipos de fenômenos magnéticos.

Todos os fenômenos magnéticos são devidos a cargas elétricas em movimento, onde os elétrons não apenas giram, mas também orbitam ao redor do núcleo. Normalmente, essas órbitas do elétron tem orientação aleatória, resultando no cancelamento dos momentos magnéticos orbitais. No entanto, na presença de um campo magnético, cada átomo adquire um momento de dipolo adicional, e esses incrementos podem ser antiparalelos ao campo. Esse é o sistema responsável pelo fenômeno chamado **diamagnetismo** (22). Em vista disso, o campo externo aplicado induz os dipolos da amostra de acordo com a regra de Lenz, produzindo momentos magnéticos orientados antiparalelamente ao próprio campo aplicado (19). Dessa forma, o valor da suscetibilidade é negativo e muito pequeno ($-\chi_m \ll 1$). O diamagnetismo é uma propriedade de todos os materiais, no entanto, o fenômeno é obscurecido por outras interações mais intensas como o paramagnetismo e ferromagnetismo. Na ausência de campo externo, a magnetização resultante no diamagnetismo é nula (28).

Outra particularidade que observamos é que, normalmente, em materiais com átomos de número ímpar de elétrons, há a presença de um momento magnético permanente,

ao contrário do diamagnetismo, que ocorre na maioria dos casos em átomos com número par de elétrons (22). No entanto, para materiais com elétrons desemparelhados, cada átomo tem um dipolo magnético devido ao spin desse elétron, resultando em um momento magnético líquido. Chamamos esse estado de **paramagnetismo**. Na ausência de um campo externo em um material paramagnético, os momentos magnéticos estão distribuídos de maneira aleatória, não apresentando uma orientação preferencial. Conseqüentemente, a magnetização resultante é nula nesse cenário (28). Todavia, na presença de um campo externo, devido a esses dipolos permanentes, o campo tem a função de alinhar os momentos na direção do campo aplicado (ver figura 2.2), refletindo em uma característica desses materiais com suscetibilidade positiva, porém pequena ($\chi_m > 1$) e que pode variar com a temperatura (23). O paramagnetismo é observado em materiais como o alumínio (Al), Bário (Ba), Platina (Pt), sendo uma propriedade mais forte que o diamagnetismo, mas significativamente mais fraca em comparação ao ferromagnetismo.

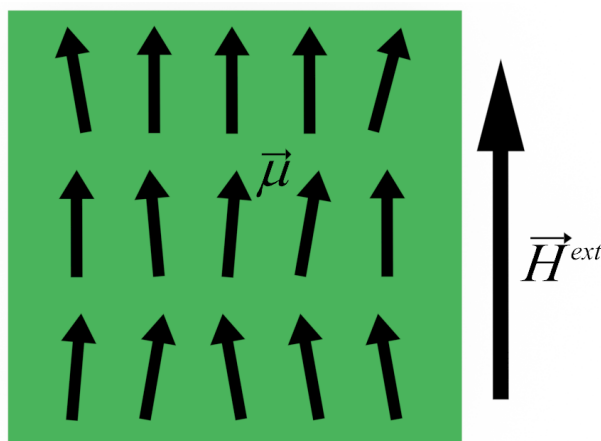


Figura 2.2 – Momentos sendo orientados pelo campo externo em um material paramagnético.
Fonte: Produzida pelo autor.

2.1.2 Magnetismo Coletivo

Existem materiais nos quais a suscetibilidade e a permeabilidade magnética não são constantes, mas sim funções do campo, temperatura e de como a amostra foi preparada. Definimos estes como pertencentes a meios não-lineares. Um exemplo notável é o magnetismo coletivo, em que surge devido a uma interação de troca entre os dipolos permanentes, que é apenas explicado pela teoria quântica (20, 22). Além do meio pertencente, o que diferencia o magnetismo coletivo do paramagnetismo, é que os dipolos apontam preferencialmente na direção dos seus vizinhos, formando uma interação de curto alcance muito forte, além da interação fraca de longo alcance. Essas duas interações são conhecidas como interação de troca e interação dipolar. Como essas duas interações competem entre si, originam várias pequenas áreas no material, chamadas de domínios magnéticos (ver figura (2.3)).

Em um magneto, existem vários domínios, e a orientação de cada um deles é aleatória, e dentro dos domínios, existem bilhões de momentos magnéticos (22), todos alinhados em uma só direção.

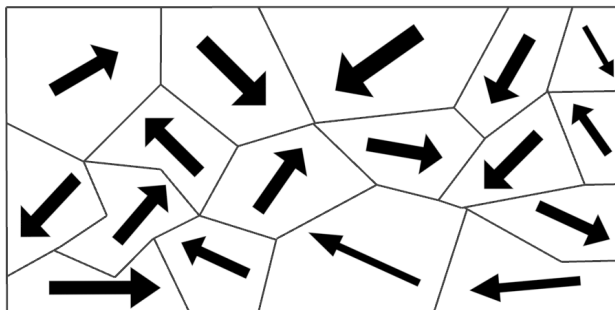


Figura 2.3 – Domínios magnéticos em um material ferromagnético. Cada um deles tem sua magnetização e orientação preferencial devido a interação entre vários momentos próximos e distantes.

Fonte: Produzida pelo autor.

Materiais que exibem magnetismo coletivo apresentam uma temperatura crítica T_c , caracterizada pela presença de magnetização espontânea abaixo de T_c , significando que os dipolos magnéticos exibem uma orientação que não é imposta por campos externos (20). Dentro do magnetismo coletivo, existem três subclasses: O ferromagnetismo, ferrimagnetismo e antiferromagnetismo.

No **ferromagnetismo**, há inúmeras aplicações tecnológicas devido à sua propriedade extremamente forte. Eles já possuem uma magnetização espontânea, o que explica sua suscetibilidade ser muito grande ($\chi_m \gg 1$). A temperatura crítica é conhecida como temperatura de Curie (T_c) e para uma temperatura abaixo de T_c , os momentos magnéticos tem uma orientação preferencial, e à temperatura absoluta $T = 0$, todos os momentos estão orientados paralelamente uns aos outros, como na figura 2.4(a). Acima de T_c , o material torna-se paramagnético.

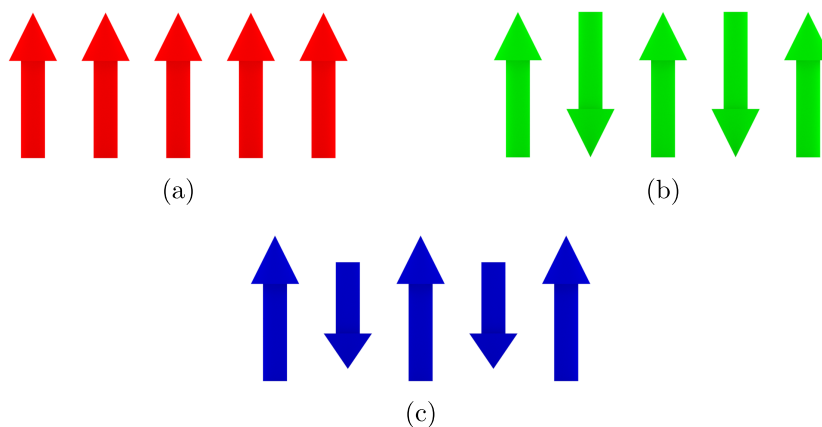


Figura 2.4 – Ilustração do ordenamento magnético de materiais (a) ferromagnéticos, (b) anti-ferromagnéticos e (c) ferrimagnéticos a temperatura $T = 0$.

Fonte: Produzida pelo autor.

Quando aplicamos um campo externo em um ferromagneto, sua magnetização atinge seu valor máximo. Ao desligarmos esse campo, a magnetização decai, mas ainda permanece com um valor residual no material (22). Esse fenômeno é conhecido como ciclo de histerese, apresentado na figura (2.5). A explicação para os ferromagnetos possuírem magnetização espontânea está relacionada ao fato deles terem uma "memória magnética", ou seja, seu valor depende do que ocorreu anteriormente.

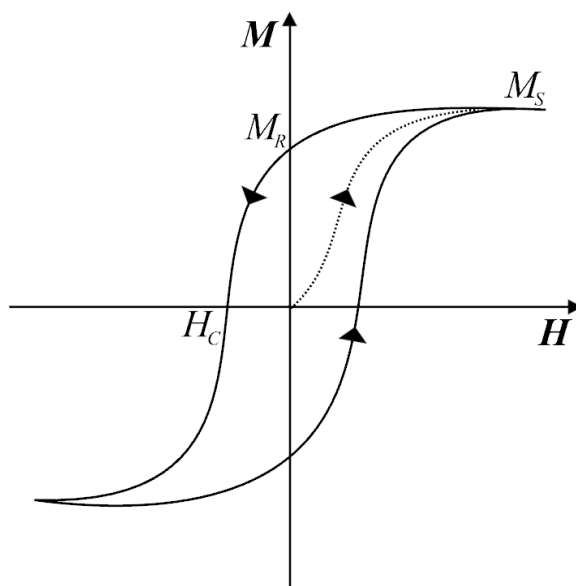


Figura 2.5 – A curva de histerese para materiais ferromagnéticos. Produzida pela referência (30) e modificada pelo autor.

Mesmo aumentando o campo externo, o valor da magnetização de saturação M_s não muda. A remanência ou magnetização remanescente M_r é o restante de magnetização no material após a retirada do campo externo. Por último a coercividade H_c indica o campo externo necessário para anular a magnetização do ferromagneto. Elementos como Ferro (Fe), Níquel (Ni) e Cobalto (Co) fazem parte do ferromagnetismo.

Quanto ao **antiferromagnetismo**, há um acoplamento antiparalelo dos momentos na amostra, mas com a mesma magnitude, diferente do ferrimagnetismo (ver a figura 2.4(b)). Abaixo da temperatura crítica de Néel, a sua magnetização total é zero (23), enquanto que acima, o material também se torna paramagnético. Exemplos de antiferromagnetos incluem Óxido de Níquel (NiO), Fluoreto de Manganês (MnF_2) e Óxido de Cobalto (CoO).

O **ferrimagnetismo** representa uma posição intermediária entre o ferromagnetismo e o antiferromagnetismo. Uma magnetização espontânea ocorre abaixo da temperatura crítica T_c , porém os momentos magnéticos são desiguais, em outras palavras, eles se alinham em sentidos contrários com intensidades diferentes como ilustra a figura 2.4(c), de forma que a magnetização total é diferente de zero (31). Alguns exemplos de materiais ferrimagnéticos são Óxido de Ferro (Fe_2O_3), Ilmenita ($FeTiO_3$) e Titanomagnetita ($Fe^{2+}(Fe^{3+},Ti)_2O_4$).

Os materiais diamagnéticos e paramagnéticos podem ser entendidos como respostas fundamentais dos elétrons à presença de um campo magnético externo, mesmo sem interações magnéticas diretas entre as partículas individuais. No entanto, essa descrição não se aplica aos materiais ferromagnéticos, ferrimagnéticos e antiferromagnéticos, pois esses apresentam uma orientação espontânea dos momentos magnéticos no material a uma temperatura inferior a T_c . Assim, não conseguimos explicar esses fenômenos sem levar em consideração as interações, uma vez que ocorrem efeitos cooperativos ou coletivos entre os vários momentos magnéticos presentes no sistema, resultando em uma resposta macroscópica (20). A seguir, exploraremos algumas das interações importantes que estão presentes no desenvolvimento do nosso trabalho.

2.2 INTERAÇÕES MAGNÉTICAS

2.2.1 Efeito Zeeman

Ao aplicarmos um campo externo a um ferromagneto, por exemplo, ocorre uma interação com os momentos magnéticos presentes no material. A energia total resultante dessa interação em um sistema discreto é dada por

$$U^{zm} = \sum_{i=1}^N -\vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_i^{ext} = -\mu_0 \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{H}_i^{ext}, \quad (2.16)$$

em que denominamos a expressão (2.16) como energia de interação Zeeman. Haverá um trabalho realizado sobre os momentos, buscando minimizar a sua energia de interação ao se orientarem na direção do campo externo, como ilustra a figura (2.6).

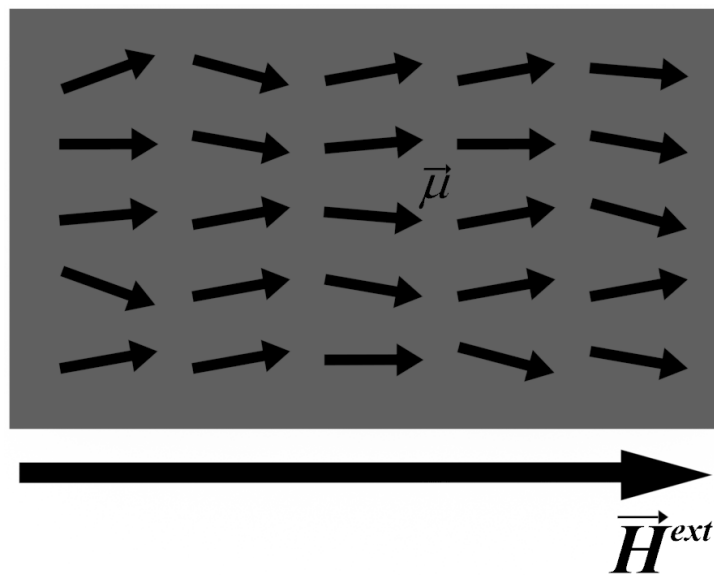


Figura 2.6 – Campo externo aplicado a um material, orientando os momentos na direção de \vec{H}^{ext} .

É possível representar os momentos magnéticos através de seus versores utilizando:

$$\hat{\mu}_i = \frac{1}{|\vec{\mu}_i|} \vec{\mu}_i = \frac{1}{\mu} \vec{\mu}_i, \quad (2.17)$$

e ainda definir um campo adimensional em termos dos parâmetros do material (32),

$$\vec{h}_i^{ext} = \frac{\vec{H}_i^{ext}}{M_s}, \quad (2.18)$$

onde M_s é a magnetização de saturação do material, obtida a partir de uma curva de histerese, como a da figura (2.5). Combinando (2.17), (2.18) com (2.16), obtemos:

$$U^{zm} = -\mu_0 M_s \sum_{i=1}^N |\vec{\mu}_i| \left(\hat{\mu}_i \cdot \vec{h}_i^{ext} \right). \quad (2.19)$$

De acordo com (2.17), o módulo do momento magnético não muda no sistema, visto que $|\vec{\mu}_i| = \mu$. Logo

$$U^{zm} = -\mu_0 \mu M_s \sum_{i=1}^N \left(\hat{\mu}_i \cdot \vec{h}_i^{ext} \right), \quad (2.20)$$

identificando:

$$Z_{zm} = \mu_0 \mu M_s, \quad (2.21)$$

que é conhecido como parâmetro de Zeeman e tem dimensão de energia [J]. Por fim, expressamos a energia de Zeeman em termos de Z_{zm} :

$$U^{zm} = -Z_{zm} \sum_{i=1}^N \left(\hat{\mu}_i \cdot \vec{h}_i^{ext} \right). \quad (2.22)$$

Como o parâmetro de Zeeman é positivo, significa que a energia associada a esse termo é minimizada quando os momentos se alinham paralelamente à direção do campo magnético externo (32, 33).

2.2.2 Interação de Troca

Descoberta por Dirac e Heisenberg em 1926, a interação de troca é decisiva para magnetismo coletivo em materiais ferromagnéticos, antiferromagnéticos e ferrimagnéticos. Ela é a principal responsável pelo ordenamento dos elétrons, seguindo o princípio de exclusão de Pauli. Em uma interação entre dois spins, podemos escrever a energia de troca como:

$$U_{12}^{tr} = -\frac{2J'_{12}}{\hbar^2} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2. \quad (2.23)$$

J'_{12} é a constante de acoplamento de troca, com unidade de energia [J]. Definimos a equação (2.23) pela interação entre dois elétrons, no entanto um material magnético possui vários elétrons em sua estrutura (28), o que nos leva a definição do modelo de Heisenberg. É importante destacar também que a interação de troca ocorre entre átomos que são

primeiros vizinhos. Logo, considerando um sistema com inúmeros elétrons que interagem entre vizinhos imediatos, temos:

$$U^{tr} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \frac{2J'_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \frac{J_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (2.24)$$

Aqui, \vec{S}_i é o spin no sítio i e \vec{S}_j é o spin no sítio j , ambos com dimensão de momento angular [J·s]. As constantes de acoplamento de troca J'_{ij} , J_{ij} tem dimensão de energia [J], e, por praticidade, utilizamos $J_{ij} = 2J'_{ij}$. Para evitar a dupla contagem da mesma interação, colocamos o fator 1/2 na frente do somatório, e a notação com parênteses angulares $\langle i, j \rangle$ indica que a soma é feita exclusivamente sobre os primeiros vizinhos. A figura (2.7), demonstra a interação de troca em um sistema.

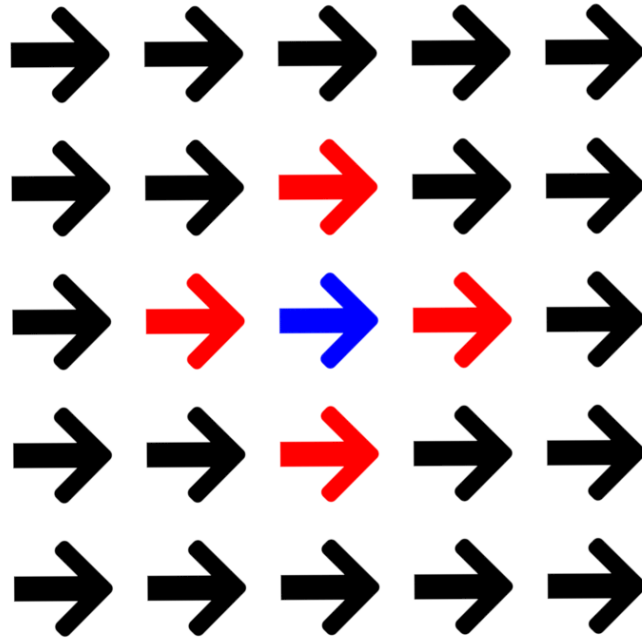


Figura 2.7 – Spins em uma interação de troca. Somente primeiros vizinhos com cores vermelha e azul interagem entre si.

Fonte: Produzida pelo autor.

Obtemos a seguinte aproximação ao considerarmos que

$$J_{ij} = J_{ji} = \begin{cases} J, & \text{se } i, j \text{ são primeiros vizinhos,} \\ 0, & \text{para outros casos.} \end{cases} \quad (2.25)$$

Essa aproximação simplificadora assume que J_{ij} é não nula apenas entre átomos vizinhos, simplificando o modelo para casos específicos de interesse. Logo temos

$$U^{tr} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \frac{J}{\hbar^2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.26)$$

no qual em conjunto com o vínculo não linear dado por

$$S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2, \quad (2.27)$$

é a expressão referida como o **modelo de Heisenberg isotrópico**, o qual descreve a orientação coletiva de todos os spins em um sistema magnético, porém sem especificar uma direção preferencial (34). Por fim, substituindo as relações de momento angular e magnético (2.5) na equação (2.26), obtemos:

$$U^{tr} = -\frac{1}{2} \frac{J}{\gamma^2 \hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j. \quad (2.28)$$

Analisando, para o caso em que $J < 0$, temos o acoplamento antiferromagnético, uma vez que a energia do sistema torna-se mínima quando os momentos ficam alinhados antiparalelamente ($\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j = -1$). Já quando temos $J > 0$, estamos no acoplamento ferromagnético, uma vez que agora a configuração de menor energia do sistema ocorre quando os momentos estão alinhados paralelamente ($\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j = +1$).

2.2.3 Interação de Anisotropia Magnetocristalina

A anisotropia magnética é uma propriedade intrínseca de materiais ferromagnéticos, que resulta em variações das propriedades magnéticas em diferentes direções, tornando-as dependentes da orientação em que são medidas (35). Um dos tipos de anisotropia é a magnetocristalina, onde a energia interna depende da direção da sua magnetização espontânea, associada a uma direção preferencial ao longo de um dos eixos cristalográficos chamado de eixo fácil ou eixo de magnetização fácil (23, 28, 36). Sua energia é dada por:

$$U^{an} = - \sum_{i=1}^N K_i (\hat{\mu}_i \cdot \hat{n})^2, \quad (2.29)$$

onde K_i é constante de anisotropia característica do material, e \hat{n} é a direção do eixo fácil, que no nosso caso representa o eixo \hat{z} (37, 38).

De maneira geral, materiais anisotrópicos também podem ser classificados como materiais magnéticos duros ou moles, conforme apresentem anisotropia magnetocristalina respectivamente alta ou baixa (34, 39, 40). Existem outros tipos de anisotropia (19), como por exemplo a anisotropia de forma, discutida na próxima subseção. É possível que um sistema físico apresente mais de um tipo de anisotropia, logo a expressão da energia de anisotropia efetiva será a soma da energia de cada parcela.

2.2.4 Anisotropia de Forma e Campo Desmagnetizante

Em materiais que apresentam anisotropia de forma, as suas propriedades físicas estão intrinsecamente ligadas à sua geometria. Tal anisotropia contribui para a energia total do sistema por meio da energia magnetostática, a qual está associada à um campo desmagnetizante (3). Podemos utilizar um modelo através da teoria eletromagnética para explicar que esse campo surge devido ao cancelamento dos dipolos no interior da amostra.

A partir disso, podemos escrever o resultado por meio de cargas magnéticas na superfície, gerando assim um campo que age no sentido contrário à magnetização, como ilustrado na figura (2.8).

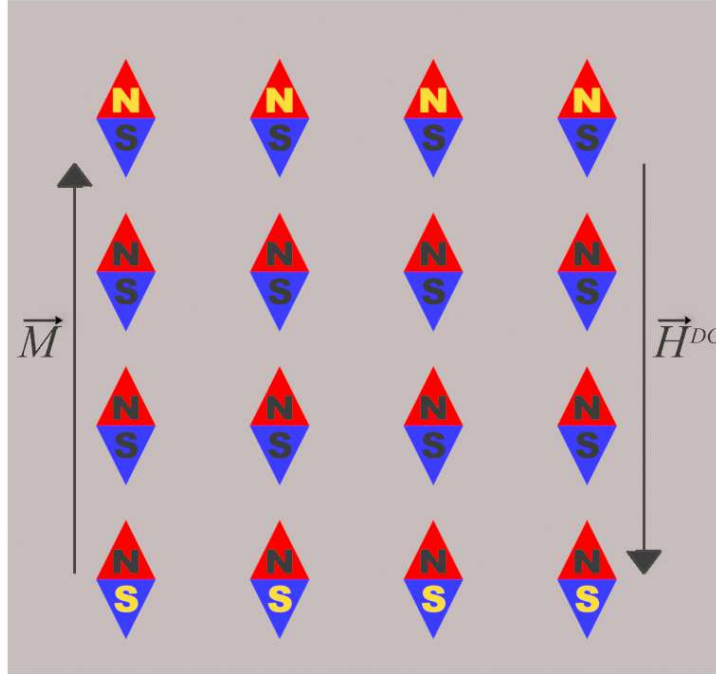


Figura 2.8 – Campo Desmagnetizante orientado antiparalelamente a magnetização.
Fonte: Produzida pelo autor.

Podemos demonstrar que o campo desmagnetizante é uma função da magnetização \vec{M} (21). Essa relação pode ser expressa como:

$$\vec{H}^{dg} = -N_d \vec{M}. \quad (2.30)$$

Aqui, N_d é o fator desmagnetizante, uma quantidade adimensional que varia de 0 a 1. Salientamos que \vec{H}^{dg} não deve ser confundido com \vec{H}^{ext} , uma vez que, quando o material está submetido a um campo externo, \vec{H}^{dg} também atuará no sentido contrário a \vec{H}^{ext} .

É possível calcular a energia magnetostática através de \vec{H}^{dg} . Definimos o campo desmagnetizante em função do potencial escalar:

$$\vec{H}^{dg} = -\vec{\nabla} \phi_M, \quad (2.31)$$

onde ϕ_M é definido como (21):

$$\phi_M = \frac{1}{4\pi} \int_V \vec{M}(\vec{r}) \cdot \frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} dV'. \quad (2.32)$$

Aplicando o gradiente ($-\vec{\nabla}$) em (2.32) obtemos:

$$\vec{H}^{dg} = \frac{1}{4\pi} \int_V \left[3 \frac{(\vec{M}(\vec{r}') \cdot (\vec{r} - \vec{r}'))(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^5} - \frac{\vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \right] dV', \quad (2.33)$$

conforme apresentado nas referências (3, 32) e no apêndice A. Nesse campo, já está incluída toda a contribuição dos momentos presentes no ferromagneto, onde na integral aparece a interação entre todos os momentos. A energia magnetostática é então definida como (3):

$$U^{dg} = -\frac{1}{2}\mu_0 \int_V \vec{M}(\vec{r}) \cdot \vec{H}^{dg} dV, \quad (2.34)$$

em que o fator 1/2 foi inserido para evitar a dupla contagem do par de dipolos, semelhante à interação de troca. Fazendo a combinação de (2.33) com (2.34), temos a energia magnetostática do sistema:

$$\begin{aligned} U^{dg} &= -\frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V dV \int_{V'} \vec{M}(\vec{r}) \cdot \left[3 \frac{(\vec{M}(\vec{r}') \cdot (\vec{r} - \vec{r}'))(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^5} - \frac{\vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \right] dV' \\ U^{dg} &= \frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V dV \int_{V'} \left\{ \frac{\vec{M}(\vec{r}) \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} - 3 \frac{[\vec{M}(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] [\vec{M}(\vec{r}') \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] }{|\vec{r} - \vec{r}'|^5} \right\} dV'. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Na literatura, essa energia também é referida como energia da interação dipolar, cujo o termo entre chaves em (2.35) é a definição da interação dipolar (32). No micromagnetismo, para calcular a energia magnetostática do sistema através do campo de desmagnetização, é necessário considerar um modelo que utiliza o tratamento com densidades de cargas magnéticas volumétricas e superficiais efetivas. Isso é expresso através da equação abaixo:

$$U^{dg} = \frac{\mu_0}{2} \int_V \rho_M \phi_M dV + \frac{\mu_0}{2} \oint_S \sigma_M \phi_M dS, \quad (2.36)$$

onde ρ_M e σ_M são, respectivamente, a densidade de carga volumétrica e superficial, e ϕ_M é o potencial escalar. A equação (2.36) é amplamente utilizada no micromagnetismo para o cálculo da energia magnetostática, uma vez que a variação direta em relação a magnetização fornece o campo desmagnetizante médio do sistema (3). Para a solução desta equação, geralmente, é necessário recorrer a métodos numéricos para calcular a energia magnetostática. Alguns exemplos de métodos numéricos incluem o Método dos Elementos Finitos, o Método das Diferenças Finitas e o Método do Momento (41, 42, 43). No apêndice A, demonstramos como utilizar as densidades de cargas magnéticas ρ_M e σ_M em função de \vec{H}^{dg} para encontrar (2.36), bem como os detalhes de como encontrar a expressão (2.35).

Na abordagem com interação dipolar, discretizamos o sistema, realizamos a interação entre todos os elementos e calculamos a energia magnetostática total.

2.2.5 Interação Dipolar

Definida como uma interação de natureza clássica, a interação dipolar ocorre entre os momentos magnéticos separados por uma distância, caracterizando-se como uma

interação de longo alcance, conforme a figura (2.9). Essa interação resulta na energia de interação dipolar, sendo uma abordagem alternativa para calcular a energia magnetostática, semelhante ao campo desmagnetizante (3). Em um material, cada momento magnético gera um campo dipolar, e, por sua vez, cada momento é influenciado pelo campo magnético criado por todos os outros dipolos presentes no material.

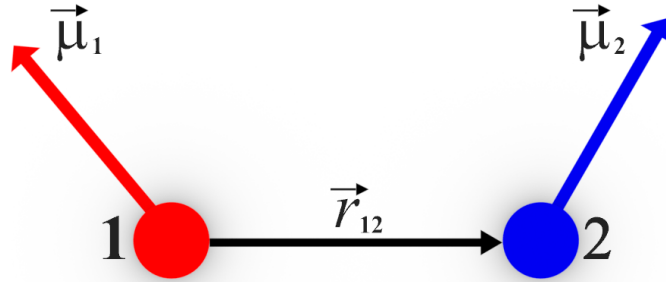


Figura 2.9 – Interação dipolar entre dois momentos magnéticos, localizados respectivamente nos sítios 1 e 2.

Fonte: Produzida pelo autor.

A interação dipolar entre dois momentos é definida como

$$U_{12}^{dp} = -\frac{\mu_0}{4\pi r_{12}^3} \left[-\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2 + \frac{3}{r_{12}^2} (\vec{\mu}_1 \cdot \vec{r}_{12})(\vec{\mu}_2 \cdot \vec{r}_{12}) \right], \quad (2.37)$$

onde, de acordo com a figura (2.9), $\vec{\mu}_1$ e $\vec{\mu}_2$ são, respectivamente, os momentos magnéticos das partículas 1 e 2, e \vec{r}_{12} o vetor distância entre os momentos 1 e 2. Podemos representar a energia de interação dipolar apenas por quantidades locais, uma vez que os momentos no magneto interagem com todos os outros momentos, mesmo a grandes distâncias (3).

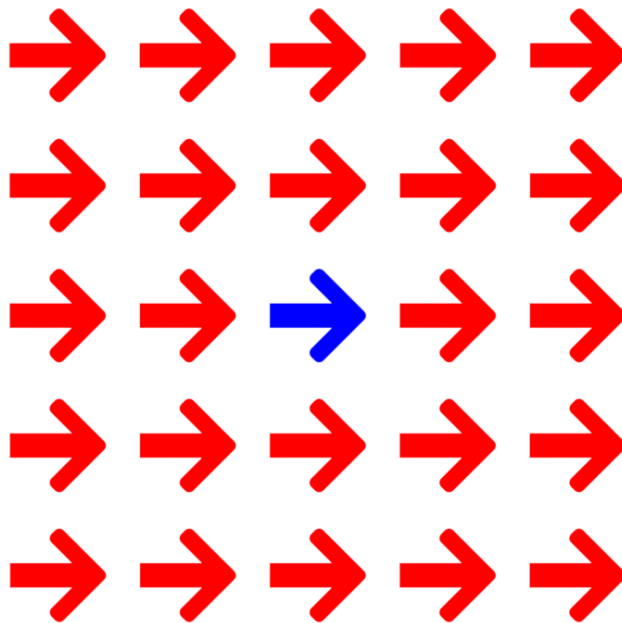


Figura 2.10 – Representação da interação dipolar em uma rede com N momentos. Em azul, o momento interage com todos os outros momentos em vermelho.

Fonte: Produzida pelo autor.

A partir disso, vamos generalizar a energia da interação dipolar para qualquer momento no sistema (ver figura (2.10)), cujo um momento no sítio i interage com todos os demais momentos presentes no sistema (40, 44):

$$U^{dp} = -\frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[-\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j + \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{\mu}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right]. \quad (2.38)$$

Aqui, inserimos o fator $1/2$ para evitar contar duas vezes a mesma interação. Representamos o vetor distância \vec{r}_{ij} através da relação:

$$\hat{r}_{ij} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}. \quad (2.39)$$

Além disso, é usual escrever a interação dipolar em termos do parâmetro de discretização da rede a , que é uma grandeza que mede a menor distância entre os sítios (45, 46). Combinando a relação (2.39) na energia dipolar, e multiplicando o denominador por (a^3/a^3) :

$$U^{dp} = -\frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi a^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{-\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j + 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \quad (2.40)$$

Observamos que a equação (2.40) é semelhante à equação (2.35) do campo desmagnetizante. A energia dipolar decai com o termo ao cubo, evidenciando ser uma interação de longo alcance entre todos os momentos do sistema. Já na expressão entre colchetes, o primeiro termo tem o papel de alinhar os momentos magnéticos antiparalelamente com o intuito de minimizar a energia, enquanto que o segundo termo os mantém alinhados ao longo da direção de \hat{r} , favorecendo assim o paralelismo dos momentos ao longo de materiais finos e compridos (anisotropia de forma, já que depende da geometria do material) (44, 47).

2.3 HAMILTONIANA DO SISTEMA E CAMPO MAGNÉTICO EFETIVO

A compreensão das propriedades magnéticas de um sistema é essencial para desvendar os comportamentos complexos que regem fenômenos físicos. Com o intuito de entender o comportamento de um sistema, precisamos da Hamiltoniana, que descreve a soma de todas as parcelas de energia presentes no nosso sistema. Em nosso estudo, a Hamiltoniana que é utilizada para descrever nosso sistema de partículas cúbicas é dada por:

$$\mathcal{H} = U^{tr} + U^{an} + U^{dp}. \quad (2.41)$$

Conforme apresentado nas seções anteriores, vamos substituir as energias em função do momento magnético, que equivale às interações de troca, anisotropia magnetocristalina e

dipolar, respectivamente as equações (2.28), (2.29), (2.40). Logo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{1}{2} \frac{J}{\gamma^2 \hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j + \\ & - \sum_{i=1}^N K_i (\hat{\mu}_i \cdot \hat{z})^2 + \\ & - \frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi a^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{-\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j + 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Essas são as energias presentes no sistema que serão minimizadas até atingirmos o equilíbrio das partículas cúbicas. No nosso sistema não temos aplicação de campo magnético externo, portanto não incluímos o termo de interação Zeeman como também optamos por utilizar a interação dipolar ao invés do campo desmagnetizante para calcular a energia magnetostática.

Um momento magnético $\vec{\mu}_{i,j}$ pertencente a uma rede, dará origem a um campo magnético proveniente das interações presentes. Para representar esse campo, partimos da Hamiltoniana (2.42) e utilizamos a seguinte expressão para calcular o campo:

$$\vec{B}_i^{ef} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{\mu}_i}. \quad (2.43)$$

Aplicando a equação (2.43) na Hamiltoniana em (2.42), obtemos:

$$\begin{aligned} \vec{B}_i^{ef} = & \frac{J}{\gamma^2 \hbar^2} \sum_{\langle j \rangle}^N \vec{\mu}_j + \\ & + 2K_i \hat{z} (\hat{\mu}_i \cdot \hat{z}) + \\ & + \frac{\mu_0}{4\pi a^3} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{-\vec{\mu}_j + 3\hat{r}_{ij}(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Chamamos \vec{B}_i^{ef} de campo efetivo local, que representa a soma do campo gerado das interações de troca, anisotropia e dipolar. Salientamos que o termo referente ao campo da anisotropia magnetocristalina, retiramos o somatório, pois se trata de uma interação de sítio único (46, 47). Através desse campo magnético efetivo local, é possível determinar a dinâmica dos momentos magnéticos da rede, por meio da equação de movimento Landau-Lifshitz-Gilbert.

3 DINÂMICA DE SPINS - A EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT (LLG)

Os princípios do micromagnetismo foram inicialmente formulados nos trabalhos publicados por Landau e Lifshitz, nos quais propuseram uma expressão de energia para materiais ferromagnéticos e uma equação de dinâmica de spins para analisar a parede de domínio de Bloch (16) chamada equação de Landau-Lifshitz (LL). Posteriormente, o cientista americano Thomas Gilbert adicionou o termo de amortecimento à equação (LL), utilizando a equação de Lagrange dissipativa com uma função de dissipação de Rayleigh, tornando-se assim a conhecida a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) (17).

Portanto, com o intuito de compreender a dinâmica de spins do nosso sistema, vamos partir de uma equação para o movimento rotacional de um corpo rígido na mecânica clássica, em que escrevemos como

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{T}, \quad (3.1)$$

uma vez que \vec{L} é o momento angular do corpo e \vec{T} é o torque atuando sobre o mesmo. Quando partimos para a mecânica quântica, a equação (3.1) permanece válida, com a condição de que o momento angular \vec{L} seja reinterpretado como um operador no espaço de Hilbert (48), sendo agora possível ser utilizado para sistemas com spins. Isto posto, substituímos o operador momento angular \vec{L} pelo operador momento angular de spin \vec{S} :

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{T}. \quad (3.2)$$

Como mencionado na subseção (2.2.1), há uma interação do campo magnético aplicado sobre um material, originando um trabalho realizado sobre os momentos magnéticos a fim de minimizar a energia. Temos então um torque sobre o momento $\vec{\mu}$ que sofre precessão devido a indução magnética aplicada. Esse torque escrevemos como

$$\vec{T} = \vec{\mu} \times \vec{B}^{ext}. \quad (3.3)$$

Substituindo o toque em (3.2)

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B}^{ext}. \quad (3.4)$$

A equação (2.5) nos dá a relação entre momento magnético e momento angular de spin. Substituímos também em (3.4):

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ext}. \quad (3.5)$$

A validade da equação (3.5) não é restrita apenas a um torque exercido pela indução magnética; ou seja, qualquer torque sobre $\vec{\mu}$ pode ser expresso na forma da equação (3.5).

A partir disso, podemos utilizar o campo efetivo local \vec{B}^{ef} definido na seção anterior (equação (2.44)) (32, 44, 45). Teremos então:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}, \quad (3.6)$$

que representa a equação de Landau-Lifshitz (LL) proposta em 1935 para sistemas conservativos de precessão contínua (16). Ela descreve bem a dinâmica de spins em materiais com um amortecimento muito pequeno, mas para grandes amortecimentos, ela não consegue prever o alinhamento dos momentos com o campo, uma vez que somente o torque de precessão é incapaz de realizar tal alinhamento. A partir disso, Thomas Gilbert em 1955 acrescentou à equação (LL) um torque de dissipação (17), que é dado por

$$\vec{T}_d = \frac{\alpha}{|\vec{\mu}|\gamma} \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right), \quad (3.7)$$

com α sendo denominado o parâmetro de amortecimento, também conhecido como "*damping*", e possui valores distintos para cada material sendo uma quantidade adimensional que caracteriza a intensidade do amortecimento na dinâmica de spins. Esse termo não é derivado de princípios básicos, mas sim introduzido fenomenologicamente para considerar a perda de energia devido a vários mecanismos, como interações spin-rede, acoplamento spin-órbita e outros processos de relaxamento (49). Portanto, adicionando o torque de dissipação à equação (LL), teremos

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{|\vec{\mu}|\gamma} \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right). \quad (3.8)$$

Essa é a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) (17). Ao observarmos a evolução temporal do momento magnético com amortecimento ($\alpha > 0$) em torno do campo, o momento magnético descreve uma precessão amortecida, tendendo a ficar alinhado com o campo. No entanto, se não houver dissipação ($\alpha = 0$), o momento magnético apenas precessiona. A figura (3.1) ilustra ambos os comportamentos, enquanto que a figura (3.2) mostra a direção dos vetores.

A equação de (LLG) está em sua forma implícita, uma vez que o termo $(d\vec{\mu}/dt)$ aparece nos dois lados da expressão. Podemos encontrar a forma explícita da equação (3.8) tomando o produto vetorial $\vec{\mu}$ em ambos os lados da equação. Logo

$$\left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right) = -\gamma \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) + \frac{\alpha}{|\vec{\mu}|} \vec{\mu} \times \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right). \quad (3.9)$$

No lado direito da equação, aplicamos a seguinte identidade vetorial:

$$\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B}(\vec{A} \cdot \vec{C}) - \vec{C}(\vec{A} \cdot \vec{B}). \quad (3.10)$$

Fazendo $\vec{A} = \vec{B} = \vec{\mu}$ e $\vec{C} = \frac{d\vec{\mu}}{dt}$. Reescrevemos (3.9) como:

$$\left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right) = -\gamma \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) + \frac{\alpha}{|\vec{\mu}|} \left[\left(\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right) \vec{\mu} - (\vec{\mu} \cdot \vec{\mu}) \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right], \quad (3.11)$$

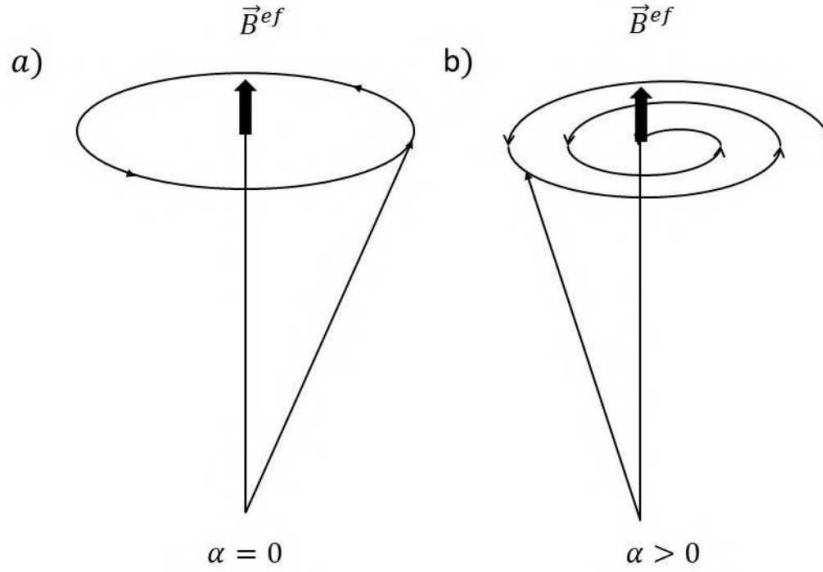


Figura 3.1 – (a) Precessão do momento com $\alpha = 0$ não amortecida: O $\vec{\mu}$ não para de precessionar. (b) Precessão do momento com $\alpha > 0$: $\vec{\mu}$ precessiona até se alinhar ao campo efetivo.

Fonte: Adaptado da referência (24).

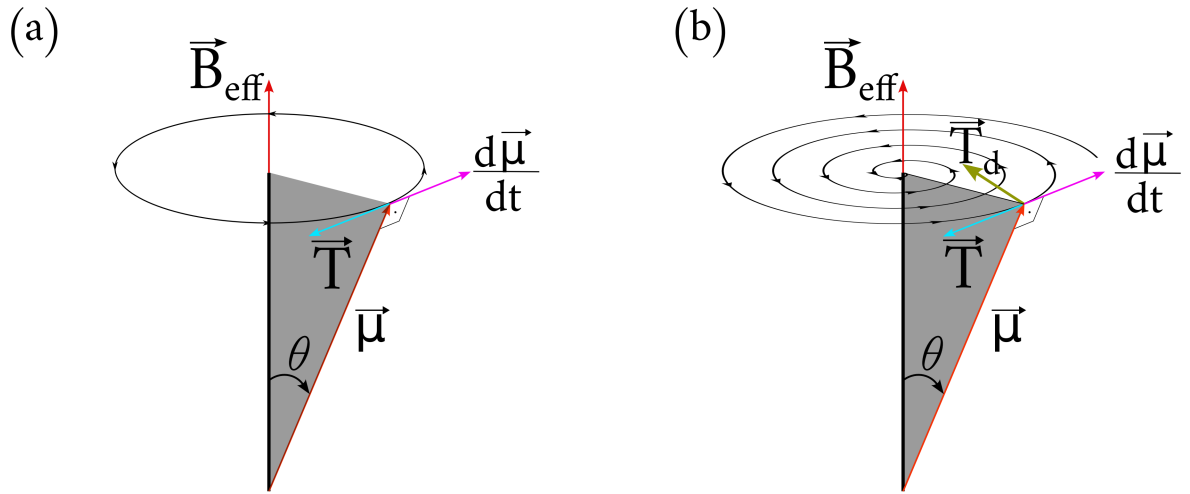


Figura 3.2 – Representação dos vetores atuantes sobre o momento magnético $\vec{\mu}$, em (a) sem amortecimento, $\alpha = 0$ e (b) com amortecimento, $\alpha > 0$.

Fonte: Produzida pelo autor.

O termo $\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = 0$ nos diz que a taxa de variação do momento magnético é perpendicular a ele mesmo (ver apêndice B, equação (B.6)). Isto posto, temos

$$\left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right) = -\gamma \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) - \alpha |\vec{\mu}| \frac{d\vec{\mu}}{dt}. \quad (3.12)$$

Substituímos a relação acima na forma implícita da equação de (LLG) (3.8) e organizando os termos:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{|\vec{\mu}| \gamma} \left[-\gamma \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) - \alpha |\vec{\mu}| \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right], \quad (3.13)$$

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} - \frac{\alpha}{|\vec{\mu}|} \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) - \frac{\alpha^2}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt}. \quad (3.14)$$

Evidenciando $\frac{d\vec{\mu}}{dt}$ e reorganizando, encontramos:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\frac{1}{1 + \alpha^2} \left[\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef} + \frac{\alpha}{|\vec{\mu}|} \vec{\mu} \times (\vec{\mu} \times \vec{B}^{ef}) \right]. \quad (3.15)$$

Essa é a forma explícita da equação (LLG). Importante ressaltar que a expressão acima caracteriza a evolução temporal de apenas um momento magnético. Como os materiais possuem uma coleção de N momentos com 3 componentes vetoriais em cada rede, precisamos resolver um sistema com $3N$ equações diferenciais que são acopladas entre si. Portanto, a equação de (LLG) que descreve a dinâmica de cada momento da rede é:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}_i}{dt} = -\frac{1}{1 + \alpha^2} \left[\vec{\mu}_i \times \vec{B}_i^{ef} + \frac{\alpha}{|\vec{\mu}_i|} \vec{\mu}_i \times (\vec{\mu}_i \times \vec{B}_i^{ef}) \right], \quad (3.16)$$

em que \vec{B}_i^{ef} é o campo efetivo local definido em (2.44) que contém a contribuição dos termos de troca, dipolar e anisotropia magnetocristalina. Assim sendo, cada momento $\vec{\mu}_i$ faz uma precessão amortecida em torno do seu campo efetivo \vec{B}_i^{ef} respectivo (33, 47). Se o sistema possuir um campo externo, ele irá se acoplar ao campo efetivo local. Outra forma disso ocorrer é utilizando corrente polarizada em spin, onde será incrementado um termo de corrente na equação (LLG), como mostrado em (33, 44, 50, 51, 52). No nosso trabalho, não temos aplicação de campo externo nem corrente polarizada em spin, apenas a evolução temporal da equação.

A equação (LLG) é do tipo não linear e, em alguns casos, pode ser resolvida analiticamente. Todavia, os casos para essa solução analítica não são relevantes para a maioria das aplicações. Em vista disso, para casos mais complexos, ela é resolvida através de métodos de integração numérica no tempo utilizando o algoritmo Preditor-Corretor (53, 54) e o método de Runge-Kutta (55, 56), que foram utilizados em nosso trabalho.

4 METODOLOGIA - SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA

4.1 SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA

O conceito de micromagnetismo foi fundado inicialmente por Brown em 1958 com a publicação do seu livro (57), e posteriormente com suas contribuições em trabalhos publicados que envolvem aplicações de métodos computacionais (58). Trata-se de uma teoria contínua de materiais magnéticos que permite o cálculo das configurações de spin de materiais com diferentes formatos (2).

Os sistemas magnéticos consistem em uma grande quantidade de momentos distribuídos por toda a sua estrutura, com uma escala de comprimento que varia de dezenas de nanômetros até centenas de micrômetros (34). Para mensurar as interações nessa escala, fazemos uso da simulação micromagnética, a qual consiste em tratar o sistema através de uma aproximação semi-clássica, uma vez que abordar esses sistemas por meio da teoria quântica torna-se altamente complexo. O material magnético é representado por um campo de vetores clássicos $M(\vec{r}, t)$, os quais representam a média espacial dos momentos magnéticos atômicos $\vec{\mu}$ (24, 34, 46). O sistema é particionado em células de trabalho, onde cada célula é uma média total da quantidade de momentos atômicos presentes em cada uma delas, conforme ilustrado na figura (4.1) abaixo. Portanto, as simulações micromagnéticas não nos fornecem informações sobre a distribuição local dos momentos magnéticos atômicos, mas apenas a sua magnetização local.

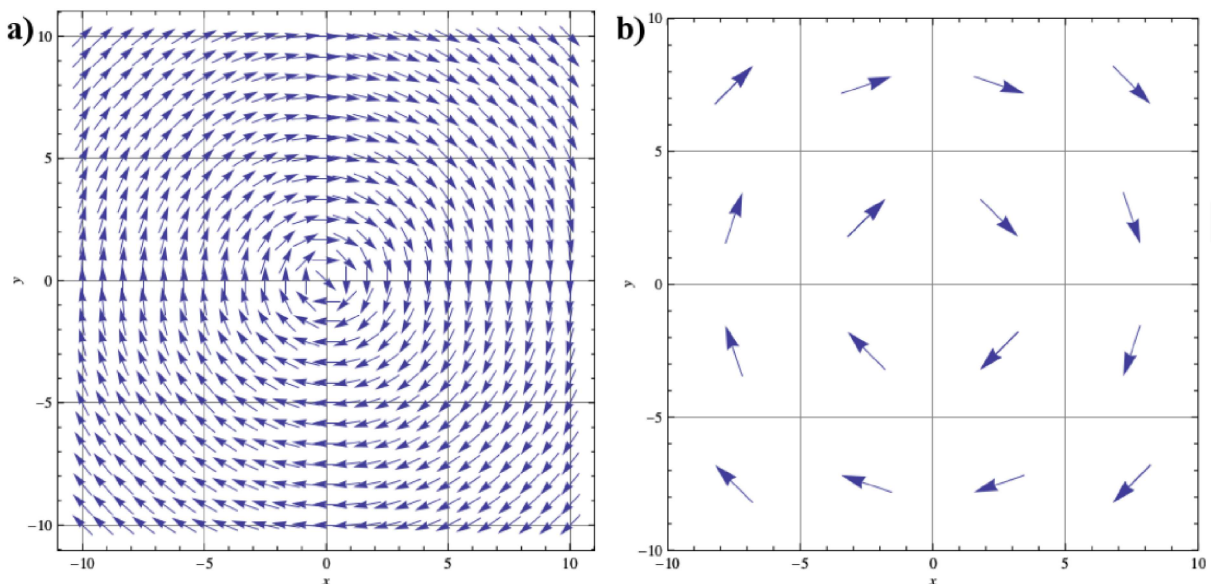


Figura 4.1 – Esquema do método da simulação micromagnética em duas dimensões. (a) Representa um sistema magnético real e (b) um sistema discretizado em células através da aproximação do método micromagnético, em que ele prevê com eficiência o cálculo das propriedades físicas.

Fonte: Adaptado da referência (39).

A vantagem de utilizar esse método reside na redução do grande número de interações a serem calculadas. As interações em uma única célula por si só já se tornam bastante trabalhosas, uma vez que estamos lidando com milhares de momentos atômicos. Assim, o método micromagnético nos faz economizar tempo, reduzindo a quantidade de uso da memória RAM dos computadores com ganho de desempenho computacional e eficiência na obtenção dos resultados. As células de trabalho, na maioria dos casos, são tridimensionais, com comprimento de aresta definido como parâmetro de rede a , e seu volume é $v_{cel} = a^3$. Os momentos magnéticos atômicos tendem a se alinhar em uma única direção dentro do volume da célula. O vetor magnetização local no volume da célula de trabalho em função do momento é dado por:

$$\vec{M}_i = \frac{1}{v_{cel}} \sum_{k=1}^N \vec{\mu}_k = \frac{1}{v_{cel}} \vec{\mu}_i. \quad (4.1)$$

A célula deve ter um volume pequeno de forma que os momentos atômicos no seu interior estejam todos alinhados e, ao mesmo tempo, deve ser grande em comparação com as grandes distâncias interatômicas, devido ao grande número de momentos atômicos. Por isso, a discretização do material não é feita de maneira arbitrária (34, 44). Para manter essas condições, consideramos uma grandeza importante do micromagnetismo conhecida como comprimento de troca, que oferece uma indicação do alcance da interação de troca entre os momentos atômicos, assegurando que eles permaneçam alinhados em uma determinada direção. O comprimento de troca é definido como (59, 60):

$$l_{tr} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}}. \quad (4.2)$$

Essa grandeza depende de parâmetros específicos de cada material. Temos como exemplo os números para o Permalloy-79 (Py-79), com a constante de troca $A = 13 \times 10^{-12}$ [J/m], magnetização de saturação $M_s = 8,6 \times 10^5$ [A/m], nos fornecendo um comprimento de troca aproximado de $l_{tr} = 5,33$ nm (37, 61). Temos por entendimento que na aproximação micromagnética, a discretização do material é regida pelo comprimento de troca (33, 44).

Se o tamanho do parâmetro de rede da célula de trabalho é menor ou igual ao comprimento de troca, $a \leq l_{tr}$, a interação é definida como suficientemente forte para manter o alinhamento dos momentos magnéticos em cada célula, mantendo assim a magnetização em seu valor máximo (M_s).

Quando uma célula possui todos os momentos magnéticos atômicos apontando em uma direção, consideramos que ela está com a magnetização saturada nessa direção. Expressamos essa relação como:

$$\vec{M}_i = M_s \hat{\mu}_i, \quad (4.3)$$

onde $\hat{\mu}_i$ é unitário na direção de M_s . Combinando (4.3) em (4.1) e fazendo $v_{cel} = a^3$, obtemos

$$\vec{\mu}_i = \vec{M}_i a^3 = M_s a^3 \hat{\mu}_i. \quad (4.4)$$

Ao escrevermos

$$\vec{\mu}_i = |\vec{\mu}_i| \hat{\mu}_i, \quad (4.5)$$

e compararmos com (4.4), percebemos que

$$|\vec{\mu}_i| = \mu_{cel} = M_s a^3 \quad \therefore \quad (4.6)$$

$$\vec{\mu}_i = \mu_{cel} \hat{\mu}_i. \quad (4.7)$$

4.2 HAMILTONIANA MICROMAGNÉTICA

As interações magnéticas que definimos na seção (2.2) permanecem as mesmas; no entanto, precisamos renormalizar as constantes de interações, pois alteramos o parâmetro de rede. Expressamos também as interações em termos dos momentos unitários, levando em consideração a relação (4.5), uma vez que o módulo do momento não muda na rede (32), ou seja

$$|\vec{\mu}_i| = |\vec{\mu}_j| = \mu_{cel}. \quad (4.8)$$

Pela interação de troca (2.28), temos:

$$U^{tr} = -\frac{J\mu_{cel}^2}{2\gamma^2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j. \quad (4.9)$$

substituindo a razão giromagnética ($\gamma = -\frac{g\mu_B}{\hbar}$), reescrevemos como:

$$U^{tr} = -\frac{J\mu_{cel}^2}{2g^2\mu_B^2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j. \quad (4.10)$$

Aqui, introduzimos um parâmetro adimensional σ dado por

$$\sigma = \frac{\mu_{cel}}{g\mu_B}, \quad (4.11)$$

que representa o módulo do momento magnético normalizado. Em seguida, acoplamos σ na constante de troca (32, 33, 62) ($J\sigma^2 \rightarrow J = J^{cel}$) e teremos:

$$U^{tr} = -\frac{J^{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j. \quad (4.12)$$

A partir do limite contínuo do modelo de Heisenberg isotrópico, as referências (37, 46, 62) demonstram que

$$J^{cel} = J = 2Aa. \quad (4.13)$$

J^{cel} é a constante de acoplamento de troca micromagnética, com unidade de energia [J] em função da constante de troca A [J/m], e do parâmetro de rede a [m].

Na interação dipolar em (2.40), substituímos a relação (4.7) e a reescrevemos como:

$$U^{dp} = -\frac{1}{2} \frac{\mu_0 \mu_{cel}^2}{4\pi a^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{-\hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j + 3(\hat{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \quad (4.14)$$

Definimos o parâmetro da interação dipolar D^{cel} micromagnético substituindo o momento magnético da célula (4.6) em (4.14):

$$D^{cel} = \frac{\mu_0 \mu_{cel}^2}{4\pi a^3} = \frac{\mu_0 M_s^2 a^3}{4\pi}. \quad (4.15)$$

Notamos que D^{cel} possui dimensão de energia [J]. Logo, a energia dipolar micromagnética é escrita como:

$$U^{dp} = -\frac{D^{cel}}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{-\hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j + 3(\hat{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right]. \quad (4.16)$$

Para a interação de anisotropia magnetocristalina (2.29), escrevemos como:

$$U^{an} = -\sum_{i=1}^N K_{cel} (\hat{\mu}_i \cdot \hat{z})^2, \quad (4.17)$$

onde definimos $\hat{n} = \hat{z}$ a direção do eixo fácil, K_{cel} é a constante de anisotropia magnetocristalina renormalizada para o modelo micromagnético, que é definida como

$$K^{cel} = K_u a^3, \quad (4.18)$$

a qual tem unidade de energia [J]. Aqui, K_u representa a constante de anisotropia uniaxial, que depende do material (45) com dimensão de energia por volume [J/m³].

Com o sistema discretizado e com as constantes renormalizadas, a Hamiltoniana micromagnética que representa o nosso sistema de partículas cúbicas em nossas simulações é a soma das equações (4.12), (4.16) e (4.17), resultando em:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{J^{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j + \\ & -\frac{D^{cel}}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{-\hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j + 3(\hat{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] + \\ & -K^{cel} \sum_{i=1}^N (\hat{\mu}_i \cdot \hat{z})^2. \end{aligned} \quad (4.19)$$

A partir desta Hamiltoniana, cada energia presente vai interagir no sistema através do campo efetivo local de cada célula, em seguida acontecerá a dinâmica dos momentos magnéticos através da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert de forma a minimizar a energia do sistema.

4.3 O PROBLEMA PADRÃO NÚMERO 3

Como mencionado anteriormente, a grande vantagem de trabalhar com simulações micromagnéticas, é o fato dela nos nortear em estudos de sistemas magnéticos próximos dos reais, evitando gasto de recursos e tempo no auxílio das validações experimentais desses mesmos sistemas. Entretanto, desenvolver um software micromagnético é um tanto desafiador, uma vez que estamos tratando com grandezas e interações em escala nano. Uma maneira de verificar um software micromagnético, é testá-lo por meio de alguns problemas padrões, a fim de comparar técnicas computacionais, identificar defeitos e possíveis "bugs". Na literatura, existem vários problemas padrões micromagnéticos propostos, como os do Grupo de Atividade de Modelagem Micromagnética - μ MAG (18). Esses problemas padrões do micromagnetismo tem características e condições únicas, proporcionando uma avaliação de cada aspecto físico e matemático do fenômeno a ser abordado pelo programa. Com o intuito de testar nosso código micromagnético, escolhemos o Problema Padrão Número 3 (μ MAG Standard Problem #3).

O problema foi proposto por Alex Hubert da Universidade de Erlangen-Nüremberg em 1998, quando inicialmente foi realizado um estudo sobre os estados de energia mais baixos em pequenas partículas cúbicas com anisotropia relativa $Q = K_u/K_m$, variando entre valores para materiais magnéticos muito macios ($Q \ll 1, 0$), intermediários ($0, 1 < Q < 1, 0$) e materiais magnético duros ($Q > 1, 0$), com volume L^3 em função do número de células de simulação N^3 (63). A partir desse estudo, o problema foi estabelecido apenas com anisotropia relativa em $Q = 0, 1$, onde precisamos encontrar os domínios únicos conhecidos como estado de flor (flower state), estado de flor torcida (twisted flower state) e estado de vórtice (vortex state). A figura (4.2) mostra esses domínios.

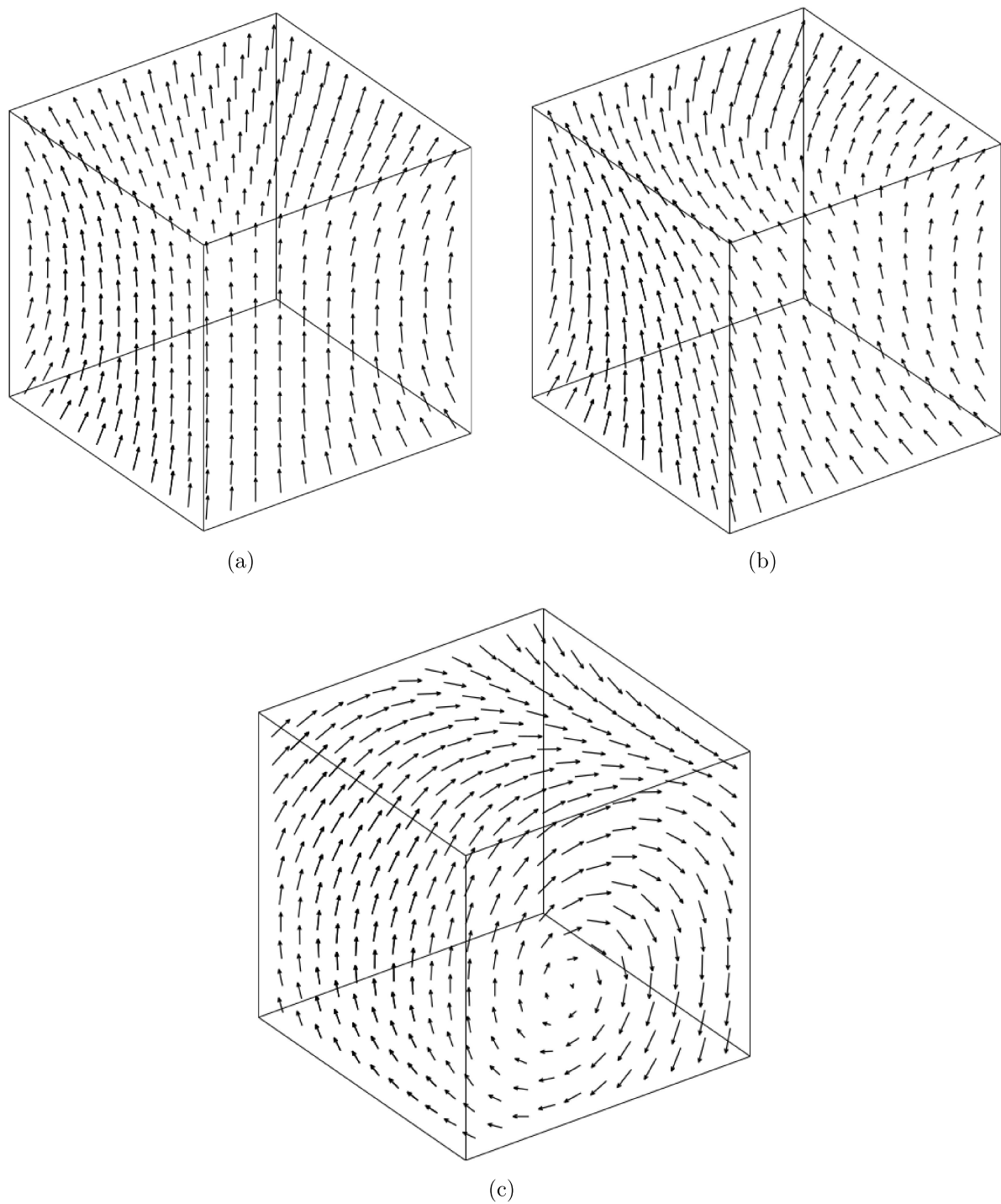


Figura 4.2 – Domínios uniformes a serem encontrados: (a) é o estado de flor, (b) o estado de flor torcida e (c) o estado de vórtice em um cubo com as mesmas dimensões.

Fonte: Adaptado da referência (64).

É requerida uma alta capacidade do programa micromagnético, já que as condições do problema consideram um magneto com três dimensões de comprimento significativas. Portanto, por padrão, a fim de definir a escala do nosso sistema 3D, o cubo a ser simulado deve ter sua aresta L escrita em função do comprimento de troca l_{tr} (4.2).

Os estados magnéticos de uma amostra ferromagnética são caracterizados pelos

mínimos da energia livre de Gibbs (64), logo o sistema se arranja de forma a minimizar a soma dos termos de energia mais relevantes até o equilíbrio. Precisamos encontrar na simulação o comprimento de borda crítico para quando um estado de mínima energia for igual ou mais favorável energeticamente em relação ao outro para as mudanças de estados entre: o **estado de flor** \Rightarrow **estado de vórtice** e o **estado de flor torcida** \Rightarrow **estado de vórtice**. Com L em função de l_{tr} , o valor aproximado para esse comprimento de borda estipulado pelo problema (18) a ser encontrado é dado como:

$$\frac{L}{l_{tr}} = 8,00. \quad (4.20)$$

As energias presentes a serem minimizadas são as mesmas apresentadas na Hamiltoniana micromagnética: energia de troca, energia de anisotropia uniaxial e energia magnetostática. As soluções propostas na literatura (35, 64, 65, 63, 66, 67) encontraram os domínios uniformes da figura (4.2). Para o comprimento de borda, para a mudança de estado de mínima energia entre o estado de flor e o estado de vórtice, bem como o estado de flor torcida e o estado de vórtice, a maioria concordou com $8,43 \leq L/l_{tr} \leq 8,56$. Os autores utilizaram diferentes técnicas e softwares micromagnéticos para encontrar o comprimento de borda e as energias. Contudo, para a energia magnetostática, optaram por calculá-la através do campo desmagnetizante e campo disperso (35, 64, 67). Para calcular o campo desmagnetizante e a energia magnetostática nesses solucionadores, eles utilizam a equação (2.36) (ver também o apêndice A) para encontrar a energia e campo médio da célula micromagnética através do método das diferenças finitas.

Os solucionadores micromagnéticos utilizados para resolver o problema padrão número 3 na literatura foram o OOMMF (11), MuMax³ (12), MagTense (13). Além desses, existem outros como FIDIMAG (14) e MicroMagnum (15) que empregam a mesma metodologia do campo desmagnetizante para resolver sistemas magnéticos.

Para a nossa solução, optamos por utilizar um código próprio desenvolvido pelo Grupo de Física da Matéria Condensada da Universidade Federal de Juiz de Fora (GFMC - UFJF), escrito em Fortran 90. Este código já foi utilizado em vários estudos em simulações micromagnéticas (37, 61, 68, 69, 70, 71, 72). Com base nas soluções já encontradas e a partir das condições iniciais do problema, vamos propor nossa solução utilizando a interação dipolar para o cálculo da energia magnetostática, e fazer um estudo comparativo com os resultados na literatura com objetivo de mostrar que os resultados através do campo desmagnetizante e interação dipolar se equivalem, e também demonstrar a eficiência do nosso código micromagnético.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 CONDIÇÕES INICIAIS

Por definição do problema, os estados de mínima energia definitivos dependerão apenas do comprimento de aresta do cubo. Para ocorrer tal minimização, é adicionada ao sistema uma anisotropia relativa, definida por:

$$Q = \frac{K_u}{K_m} = 0,1 \quad (5.1)$$

com K_u sendo a constante de anisotropia uniaxial, e K_m é definido como:

$$K_m = \frac{1}{2}\mu_0 M_s^2 \quad (5.2)$$

em que representa a densidade de energia magnetostática. A anisotropia uniaxial só varia até 0,1 na direção do eixo fácil, para ditar a preferência dos momentos magnéticos estarem alinhados a tal direção. Definida a anisotropia uniaxial, inicialmente o sistema partirá de dois estados ilustrados pela figura a seguir.

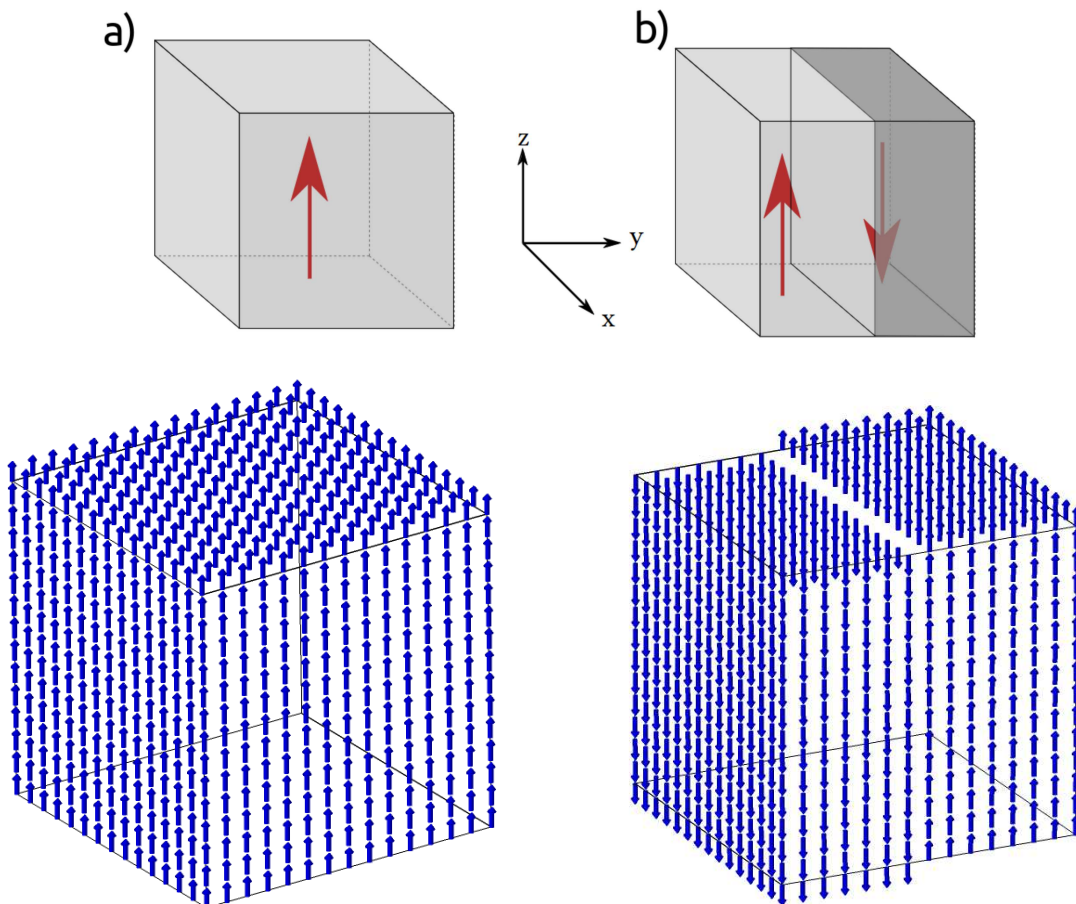


Figura 5.1 – Orientação inicial dos momentos magnéticos. (a) Os momentos magnéticos estão paralelos ao eixo fácil e (b) metade dos momentos estão antiparalelos ao eixo fácil.

Fonte: Produzida pelo autor.

A simulação deve começar de tal forma que todos esses momentos estejam alinhados na direção do eixo fácil, e a partir de uma minimização de energia do sistema, será possível encontrar os três estados apresentados. A Hamiltoniana micromagnética da equação (4.19) representa a energia total do sistema, onde as constantes J^{cel} , D^{cel} e K^{cel} representam as intensidades das interações na simulação micromagnética. Trabalharemos em unidades reduzidas e, portanto, precisamos dividir a energia total do sistema por $\mu_0 M_s^2 a^3$. Para isso, reescrevemos J^{cel} normalizado por:

$$\frac{1}{\mu_0 M_s^2 a^3} \times J^{cel} = 2Aa \times \frac{1}{\mu_0 M_s^2 a^3}, \quad (5.3)$$

Substituindo K_m na equação acima, expressamos:

$$\frac{J^{cel}}{\mu_0 M_s^2 a^3} = \left(\frac{A}{K_m} \right) \frac{1}{a^2}, \quad (5.4)$$

onde o termo entre parênteses é o comprimento de troca ao quadrado como em (4.2) (l_{tr}^2). Logo, normalizando J_{cel} :

$$J^{cel*} = \frac{l_{tr}^2}{a^2}. \quad (5.5)$$

Na constante de interação dipolar micromagnética D^{cel} , também fazemos a divisão por $\mu_0 M_s^2 a^3$:

$$\frac{D^{cel}}{\mu_0 M_s^2 a^3} = \frac{\mu_0 M_s^2 a^3}{4\pi \mu_0 M_s^2 a^3} \quad (5.6)$$

$$D^{cel*} = \frac{1}{4\pi}. \quad (5.7)$$

Por fim, normalizando K^{cel} (equação (4.18)):

$$\frac{K^{cel}}{\mu_0 M_s^2 a^3} = \frac{K_u a^3}{\mu_0 M_s^2 a^3}. \quad (5.8)$$

No lado direito da igualdade, substituindo por K_m , temos que:

$$K^{cel*} = \frac{1}{2} \frac{K_u}{K_m} = \frac{Q}{2} \quad (5.9)$$

As constantes K^{cel} e D^{cel} normalizadas não dependem das constantes μ_0 , M_s e a . Poderíamos definir essas três constantes como iguais a unidade. No entanto, a constante J^{cel} ainda depende de a . Como mencionado, o parâmetro de rede a precisa ser menor do que o comprimento de troca l_{tr} . Podemos relacionar a e l_{tr} através de:

$$a = \xi l_{tr}, \quad (5.10)$$

onde ξ uma constante de proporcionalidade. Logo, a equação (5.5) pode ser escrita como

$$J^{cel*} = \frac{1}{\xi^2}. \quad (5.11)$$

Agora todos os três termos da Hamiltoniana não dependem de μ_0 , M_s e a . Podemos escrever a energia total como:

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}}{\mu_0 M_s a^3} = \mathcal{H}^* = & -\frac{J^{cel*}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle}^N \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j + \\ & -\frac{D^{cel*}}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{-\hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j + 3(\hat{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] + \\ & -K^{cel*} \sum_{i=1}^N (\hat{\mu}_i \cdot \hat{z})^2. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Com as constantes de interações micromagnéticas de troca, dipolar e anisotropia normalizadas, notamos que o cubo depende apenas do seu comprimento L para minimizar sua energia total do sistema (18, 64). Espera-se que, ao aumentarmos o seu comprimento, o sistema possa favorecer diferentes estados de mínima energia, o que possibilita a identificação de diferentes estados de domínios únicos. A partir disso, para variar o comprimento L do cubo magnético no programa, levamos em consideração o tamanho do sistema, que é determinado pelo número de células de simulação. O comprimento do cubo L pode ser expressado em função do número de células N e do parâmetro de rede a como:

$$L = Na. \quad (5.13)$$

Combinando (5.10) em (5.13) obtemos uma relação semelhante à (4.20):

$$\frac{L}{l_{tr}} = N\xi. \quad (5.14)$$

Temos as interações micromagnéticas (relações (5.5), (5.7) e (5.9)) e as grandezas como mostra a tabela (5.1) em unidades reduzidas, enquanto que a equação (5.14) será utilizada para variar o tamanho do cubo. Vamos variar o tamanho do sistema no intervalo de $5 \leq N \leq 21$ células de simulação, utilizando números ímpares para manter a simetria do sistema. Além disso, variamos a constante de proporcionalidade ξ de forma que possamos ajustar a razão L/l_{tr} no intervalo de $7,50 \leq L/l_{tr} \leq 8,50$. Dentro desse intervalo, espera-se encontrar os estados de mínima energia, bem como determinar qual o estado é mais favorável energeticamente associados às mudanças entre: **estado de flor** \Rightarrow **estado de vórtice**, e **estado de flor torcida** \Rightarrow **estado de vórtice**, partindo dos estados iniciais ilustrado na figura (5.1). Destacando que, na literatura (35, 64, 65, 63, 66, 67), essas duas mudanças de energia entre os estados mencionados foram encontradas no intervalo de:

$$8,43 \leq \frac{L}{l_{tr}} \leq 8,56. \quad (5.15)$$

Parâmetros Magnéticos	Unidades Reduzidas
Constante de rigidez de troca (A)	1
Permeabilidade magnética do vácuo (μ_0)	1
Magnetização de saturação (M_s)	1
Parâmetro de rede (a)	1

Tabela 5.1 – Grandezas Magnéticas utilizadas para a simulação do cubo. As grandezas estão em unidades reduzidas.

5.2 ESTADO DE FLOR

Conforme a dinâmica dos momentos magnéticos ocorre, partindo da primeira configuração inicial na figura 5.1(a), o sistema como um todo minimiza a energia total até alcançar a primeira configuração de domínio único, que é o estado de flor, como mostrado na figura abaixo. As imagens geradas foram obtidas a partir de nossas simulações e renderizadas no programa de modelagem 3D *PovRay* (73).

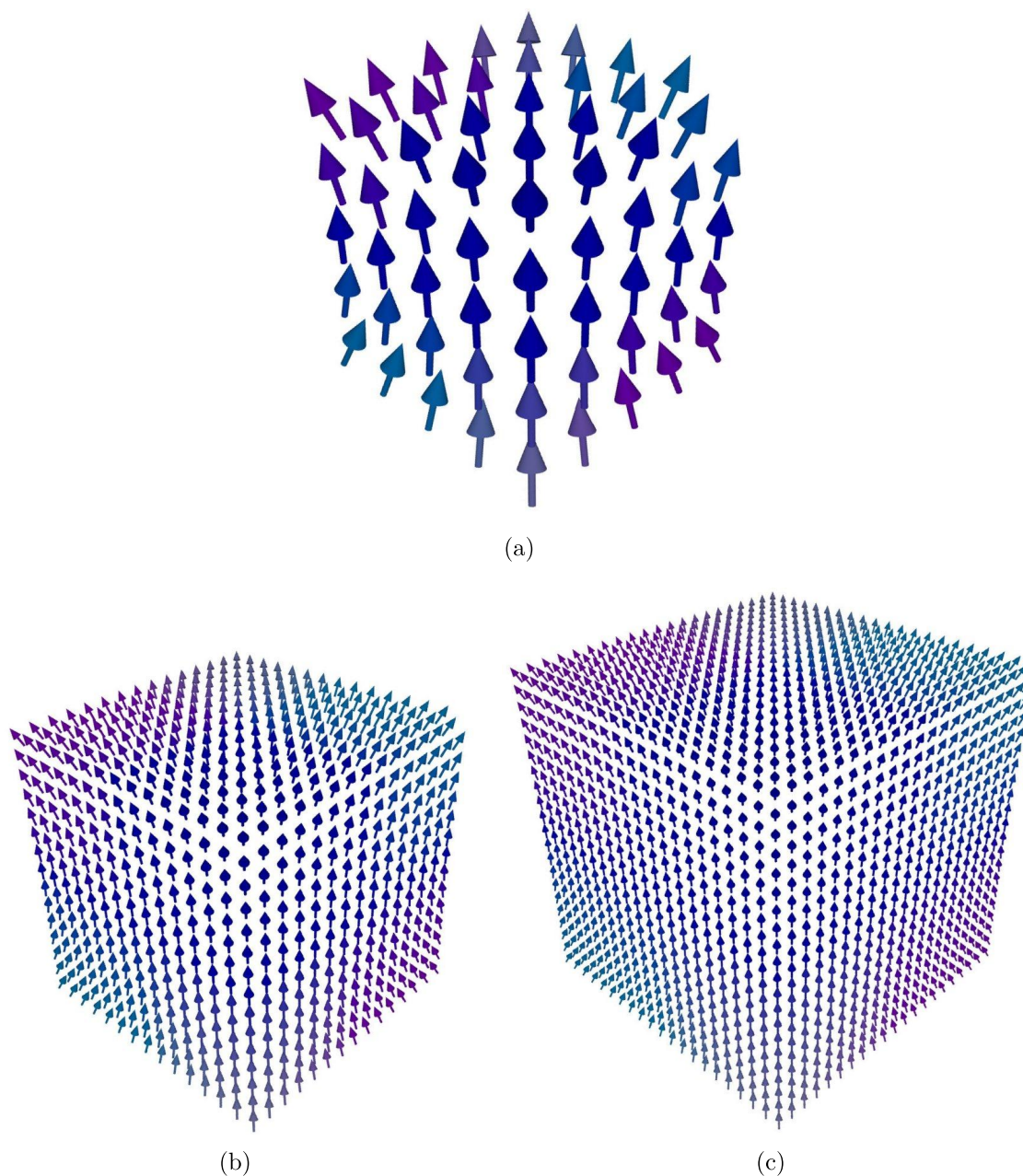
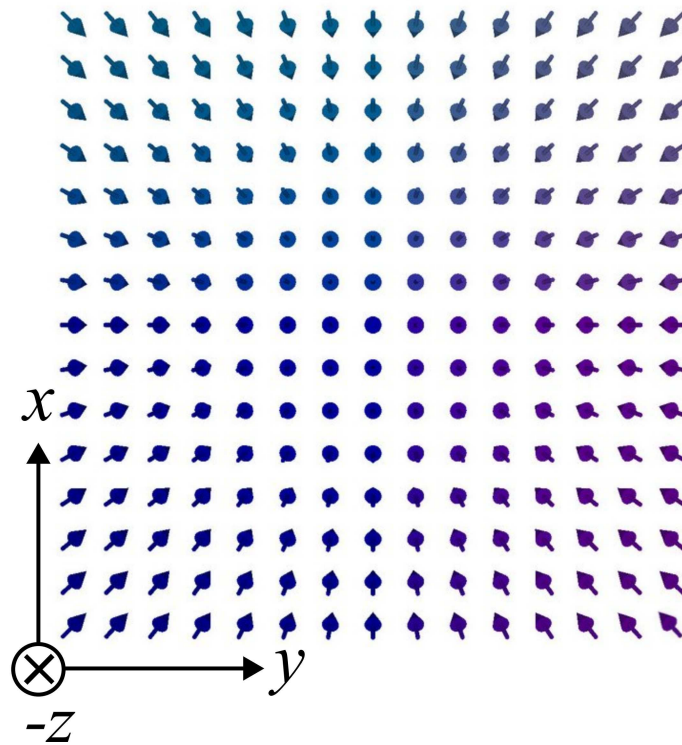


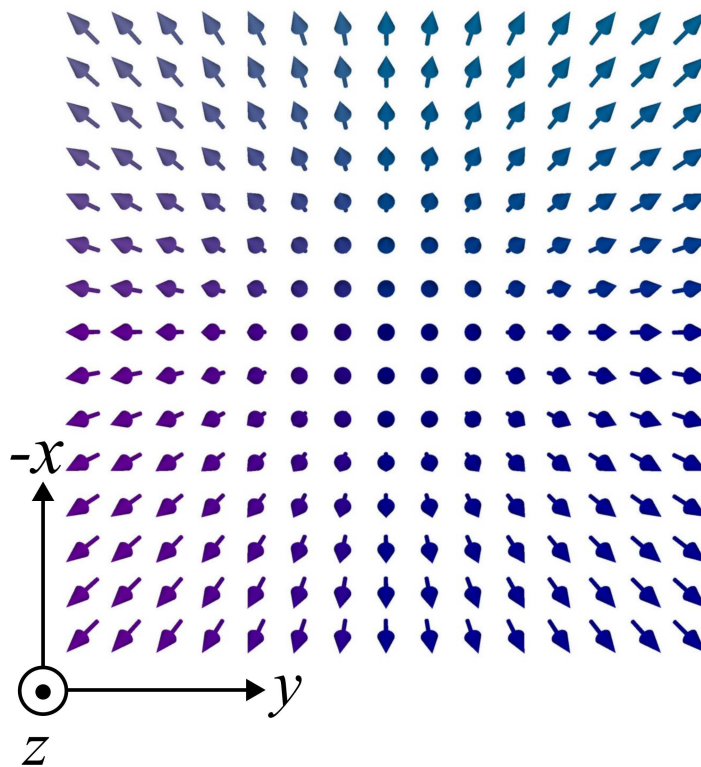
Figura 5.2 – Domínio uniforme encontrado, conhecido como estado de flor. Para a menor grade é mostrado em (a) com $N = 5$, para (b) com $N = 15$ e para a maior grade em (c) com $N = 21$.

Fonte: Produzida pelo autor.

O estado de flor é manifestado em todos os tamanhos dos nossos sistemas, onde notamos a proporção de que quanto maior o tamanho do sistema, mais momentos teremos na simulação, o que faz com que as interações de troca e dipolar fiquem cada vez mais intensas. Para o estado de flor, é esperado que seja o de maior energia comparado aos outros dois, uma vez que a magnetização total tende a se manter no eixo fácil \hat{z} . Conferimos com mais detalhes abaixo, as perspectivas das faces do cubo magnético.



(a)



(b)

Figura 5.3 – (a) Perspectiva da base do cubo ($z = -L/2$) com os momentos convergindo para dentro. (b) Para o topo ($z = +L/2$), os momentos saem do plano do cubo.

Fonte: Produzida pelo autor.

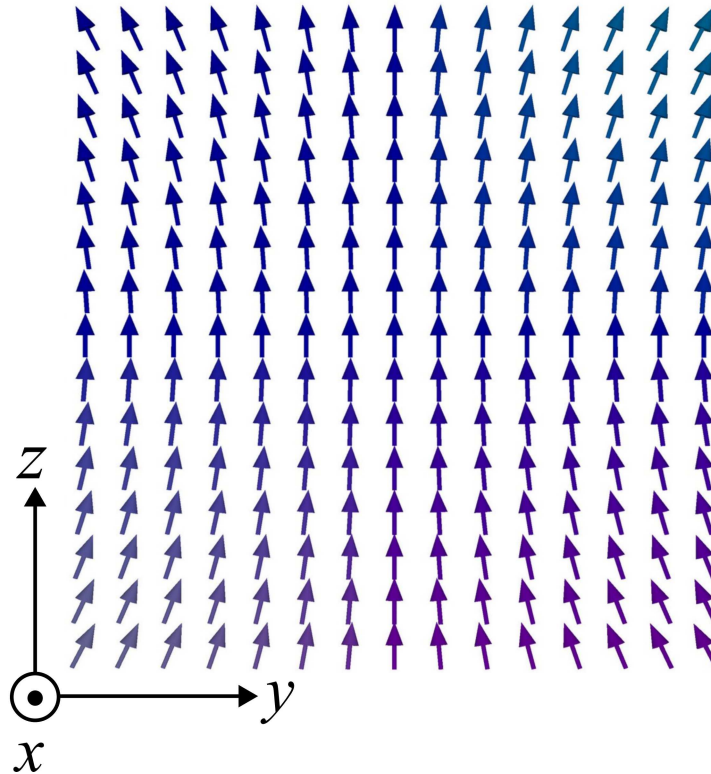


Figura 5.4 – Recorte da face lateral do cubo em $x = +L/2$. A magnetização é não homogênea nas bordas. Essa perspectiva também se aplica para $y = \pm L/2$.

Fonte: Produzida pelo autor.

Notamos que a magnetização no estado de flor se movimenta mais nas laterais do cubo, enquanto que no centro, os momentos tendem a permanecer alinhados ao eixo fácil. Essa perspectiva é a mesma para as demais laterais, bem como o centro em $x = 0$ e $y = 0$. O estado de flor aborçado está em concordância com as demais referências (35, 63, 64, 65, 66, 67). Faremos a comparação energética do estado de flor com o estado de vórtice, para analisar em qual razão L/l_{tr} um se torna mais favorável energeticamente em relação ao outro.

5.3 ESTADO DE FLOR TORCIDA

Ainda partindo do estado inicial da figura 5.1(a), após encontrar o estado de flor, à medida que aumentamos a razão L/l_{tr} em função da constante de proporcionalidade ξ em cada tamanho da rede, o sistema começa a ficar instável, permitindo que a magnetização total se rearranje de tal forma a minimizar novamente a sua energia total, encontrando um novo estado, que é o estado de flor torcida, conforme mostrado na figura (5.5).

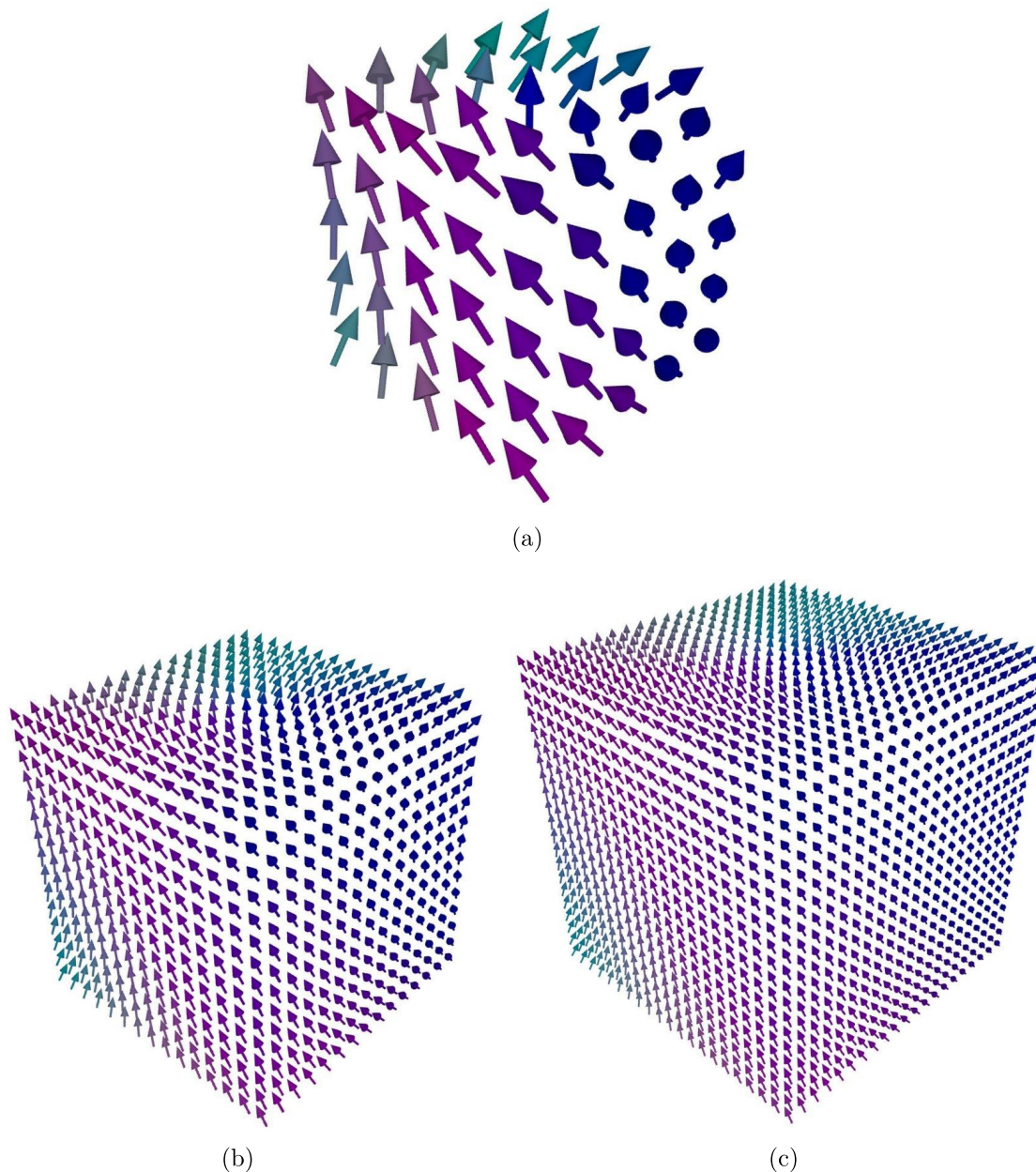
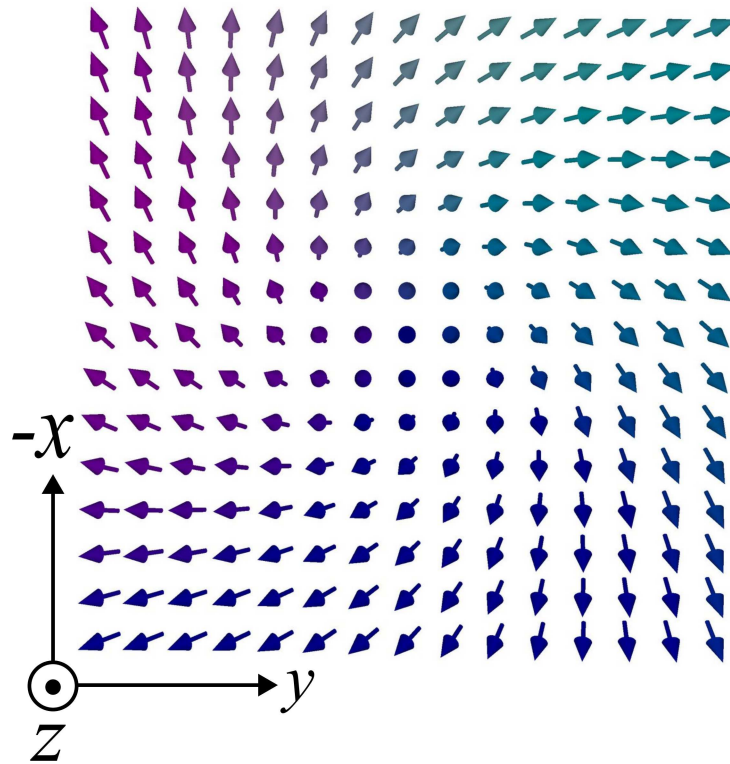
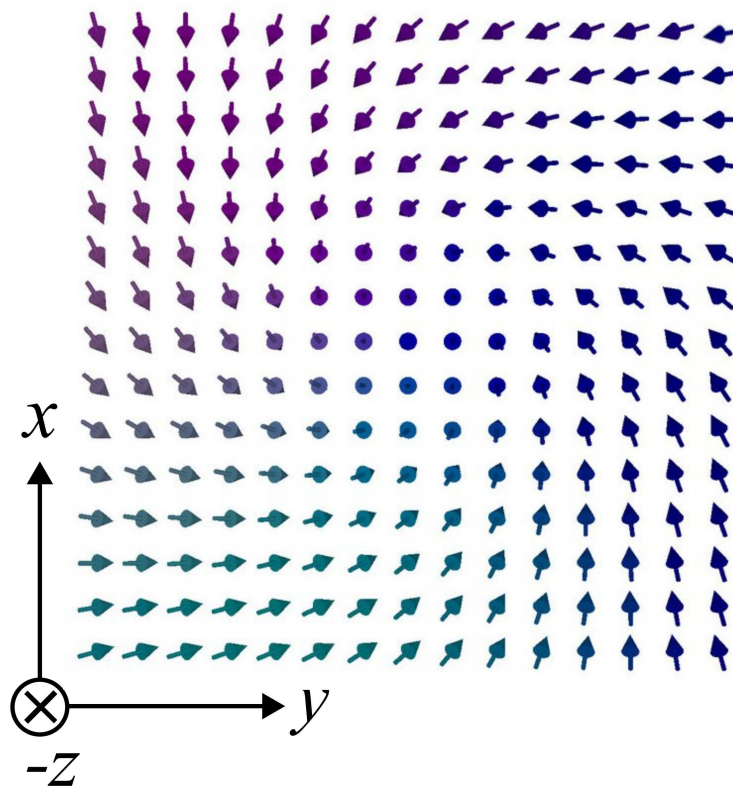


Figura 5.5 – Domínio uniforme encontrado, conhecido como estado de flor torcida, para a menor grade (a) $N = 5$, para (b) $N = 15$, e para a maior grade (c) $N = 21$.
Fonte: Produzida pelo autor.

O novo estado de mínima energia do sistema também é encontrado para todos os tamanhos das demais redes e mantém a proporção de que quanto maior o tamanho do sistema, maior a quantidade de momentos, fortalecendo as interações de troca e dipolar. A partir da razão $L/l_{tr} \geq 7,90$ para $N = 5$, o estado de flor normal sofre um colapso, fazendo com que a magnetização na direção do eixo fácil seja reduzida e redistribuída nas outras componentes, resultando no estado de flor torcida. Os dois estados são similares, com a diferença de que o estado de flor torcida apresenta uma deformação maior da magnetização em relação ao eixo fácil. Essas diferenças podem ser observadas nas figuras (5.6) e (5.7), onde temos as seções transversais das faces em x e z .



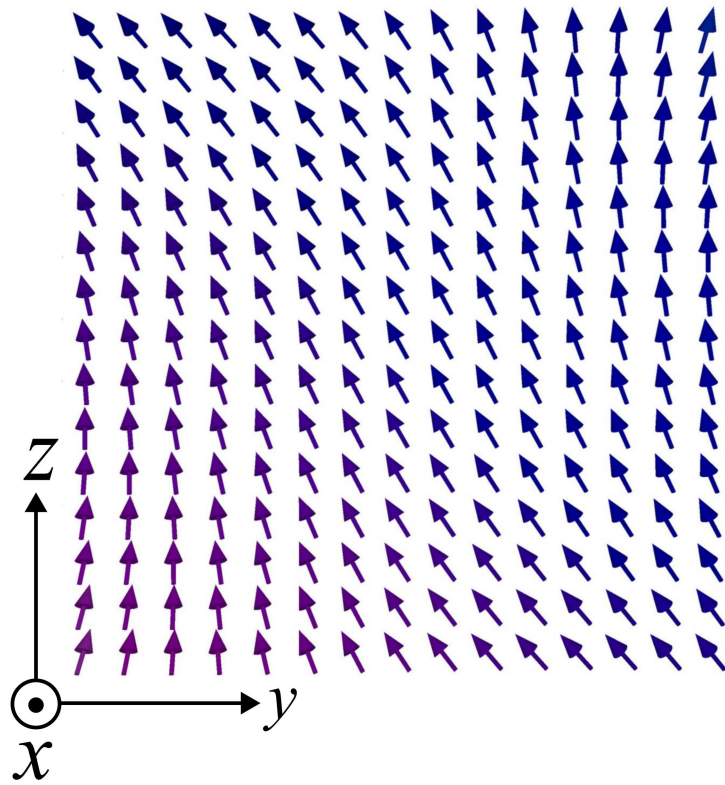
(a)



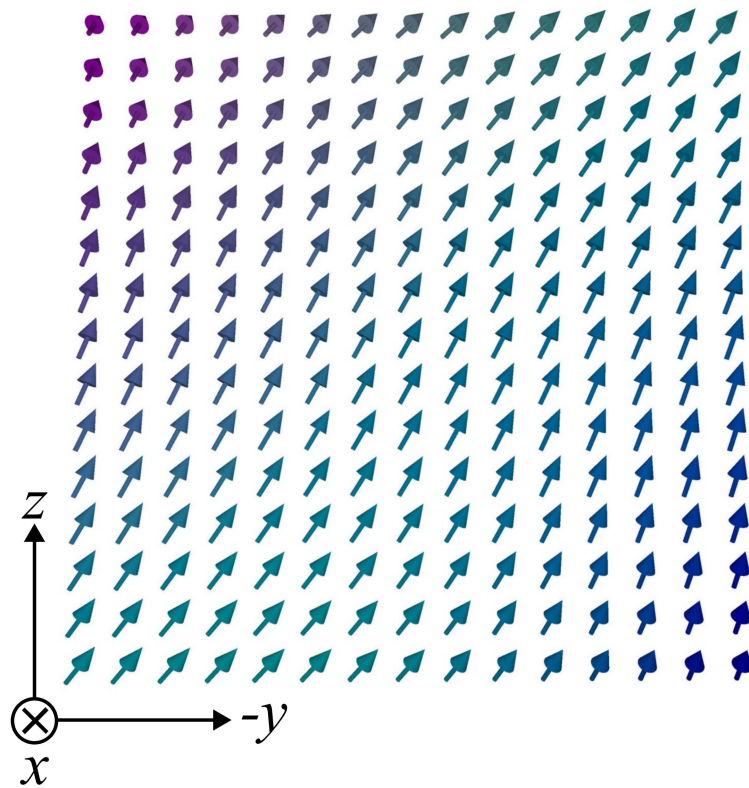
(b)

Figura 5.6 – (a) Projeção do topo do cubo ($z = +L/2$) e a (b) base do cubo ($z = -L/2$) no estado de flor torcida.

Fonte: Produzida pelo autor.



(a)



(b)

Figura 5.7 – (a) Lateral do cubo no estado de flor torcida para $(x = +L/2)$. (b) Lateral do cubo $(x = -L/2)$. Essas seções transversais também se aplicam para $y = \pm L/2$.
Fonte: Produzida pelo autor.

A figura (5.6) mostra que no topo do cubo, no estado de flor torcida, temos a magnetização formando uma espiral ou vórtice, enquanto que nas laterais, na figura (5.7), a magnetização está deslocada em relação ao eixo \hat{z} .

Ao observarmos a seção transversal em $x = 0$ na figura (5.8), obtemos uma perspectiva idêntica a imagem da lateral do cubo no estado de flor normal (figura (5.4)), mostrando que os momentos tem a preferência de se manterem orientados em relação ao eixo fácil.

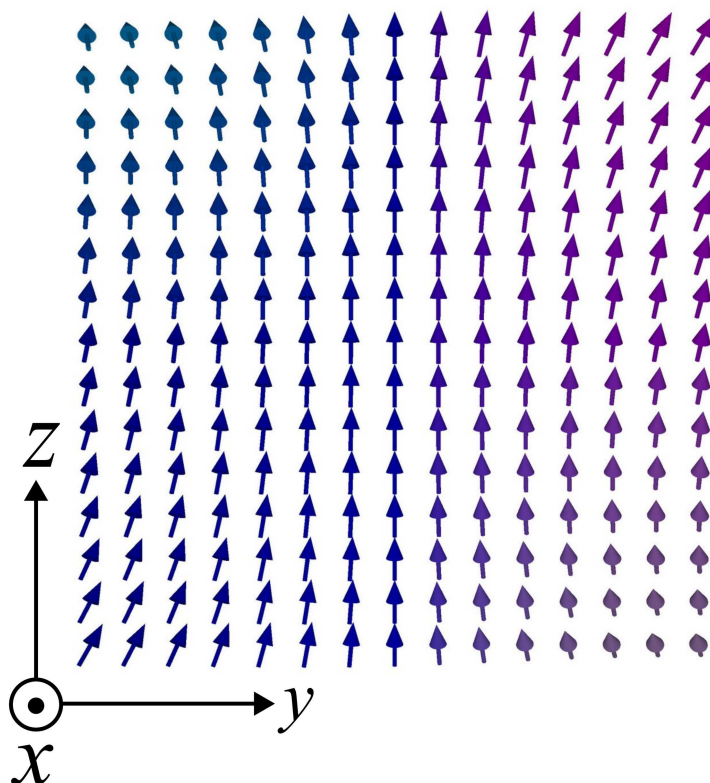


Figura 5.8 – Seção transversal no meio do cubo em $x = 0$ para o estado de flor torcida em uma rede com $N = 15$. Obtemos também essa mesma perspectiva para $y = 0$.

Fonte: Produzida pelo autor.

Já no recorte em $z = 0$ (figura (5.9)), temos uma espiral ou vórtice mais uniforme do que no topo e na base do cubo em (5.6).

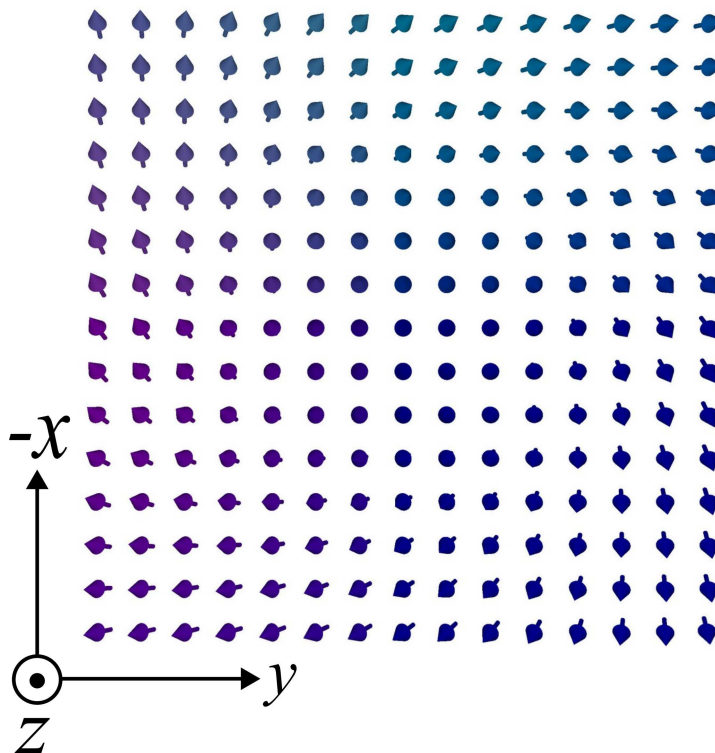


Figura 5.9 – Seção transversal do meio do cubo em $z = 0$ para o estado de flor torcida em uma rede com $N = 15$. Temos uma espiral ou vórtice simétrico.

Fonte: Produzida pelo autor.

Conforme aumentamos a razão L/l_{tr} para cada tamanho N do sistema, a torção da magnetização do estado de flor torcida fica mais evidente. Isso pode ser comprovado nos gráficos em (5.10) e (5.11), onde mostra a magnetização m_z em função da razão L/l_{tr} .

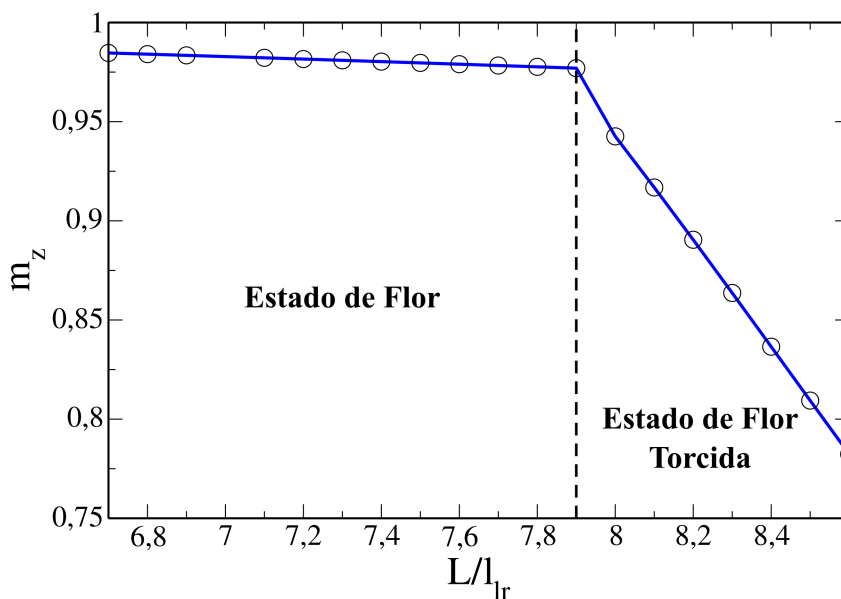


Figura 5.10 – Componente da magnetização m_z em função da razão L/l_{tr} para a menor rede ($N = 5$) evidenciando a mudança do estado de flor para estado de flor torcida.

Fonte: Produzida pelo autor.

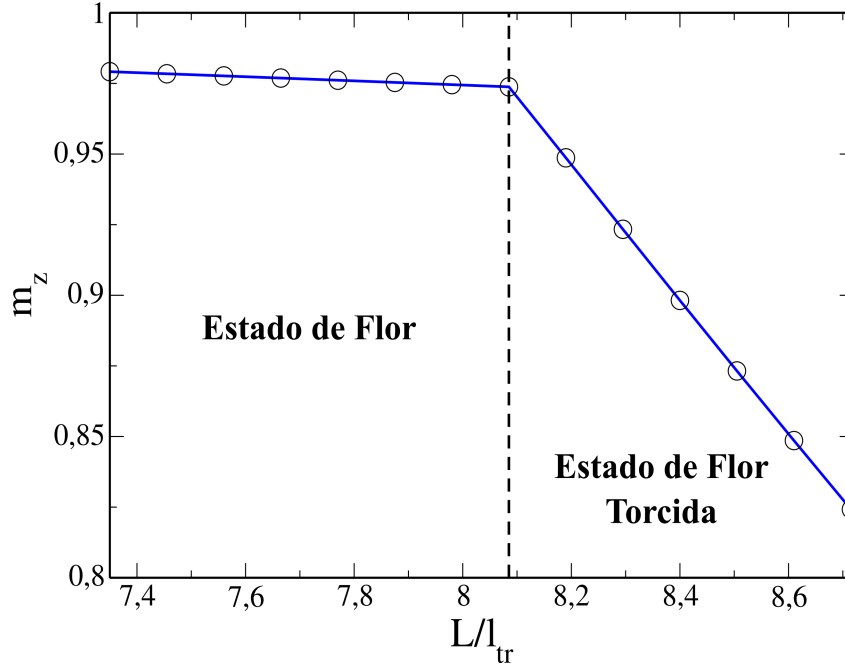


Figura 5.11 – Componente da magnetização m_z em função da razão L/l_{tr} para a maior rede ($N = 21$) evidenciando a mudança do estado de flor para estado de flor torcida. Fonte: Produzida pelo autor.

Os gráficos anteriores mostram que o colapso entre o estado de flor e flor torcida ocorre no intervalo $7,90 \leq L/l_{tr} \leq 8,08$. A partir da menor grade $N = 5$ até a maior grade do sistema $N = 21$, observamos a mesma característica da magnetização decaindo em função da razão L/l_{tr} , porém com a diferença de que o valor do ponto de colapso que ilustra a mudança entre os estados de flor para flor torcida aumenta.

A partir da análise da energia total, adquirimos uma nova perspectiva da minimização de energia a partir de um certo momento. A evolução temporal da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert ocorre utilizando os parâmetros definidos na tabela (5.2) abaixo.

Parâmetros de integração	Valor
Passo no tempo (Δt)	$2 \times 10^{-15} s$
Número total de passos (N_{tp})	6×10^6
Número de passos para escrever as configurações (N_{it})	1×10^4

Tabela 5.2 – Parâmetros utilizados na simulação para descrever a evolução temporal.

Na tabela acima, o parâmetro Δt vai nos fornece o passo no tempo na integração da equação (LLG), enquanto que a variável N_{tp} nos fornece o número total de passos para a evolução temporal. Já N_{it} define um intervalo para a escrita das configurações do sistema. Com esses valores, a seguinte relação é usada para calcular o tempo real da evolução do sistema:

$$t = N_{tp} \Delta t. \quad (5.16)$$

Substituindo os valores da tabela (5.2), obtemos um tempo real de $t = 12 \times 10^{-9} s$.

A partir disso, podemos expressar um gráfico da energia em função do tempo, conforme mostram as figuras (5.12) e (5.13).

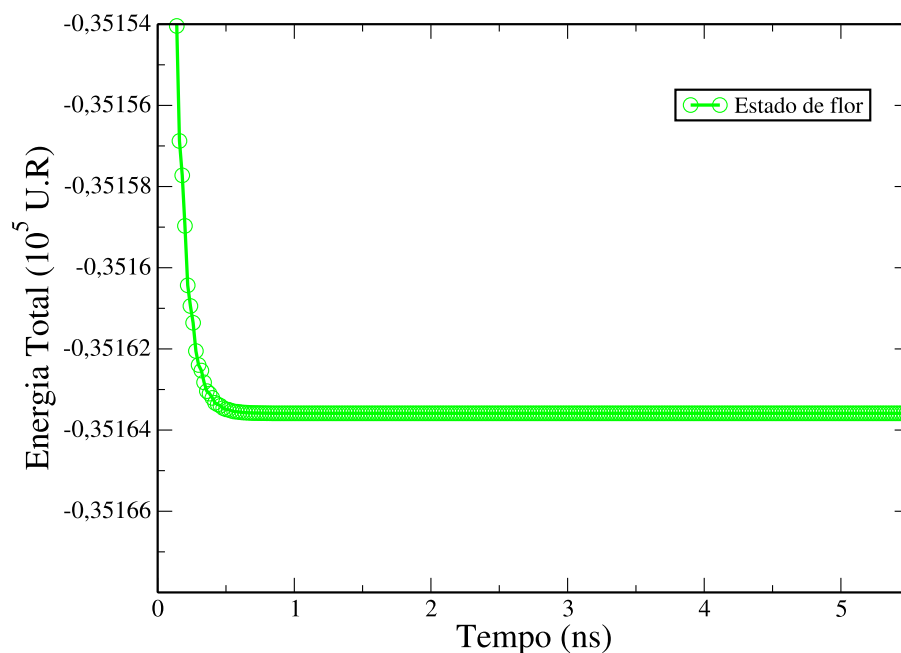


Figura 5.12 – Minimização da energia total em função do tempo do cubo para uma rede $N = 15$ do estado de flor na razão $L/l_{tr} = 7, 80$.

Fonte: Produzida pelo autor.

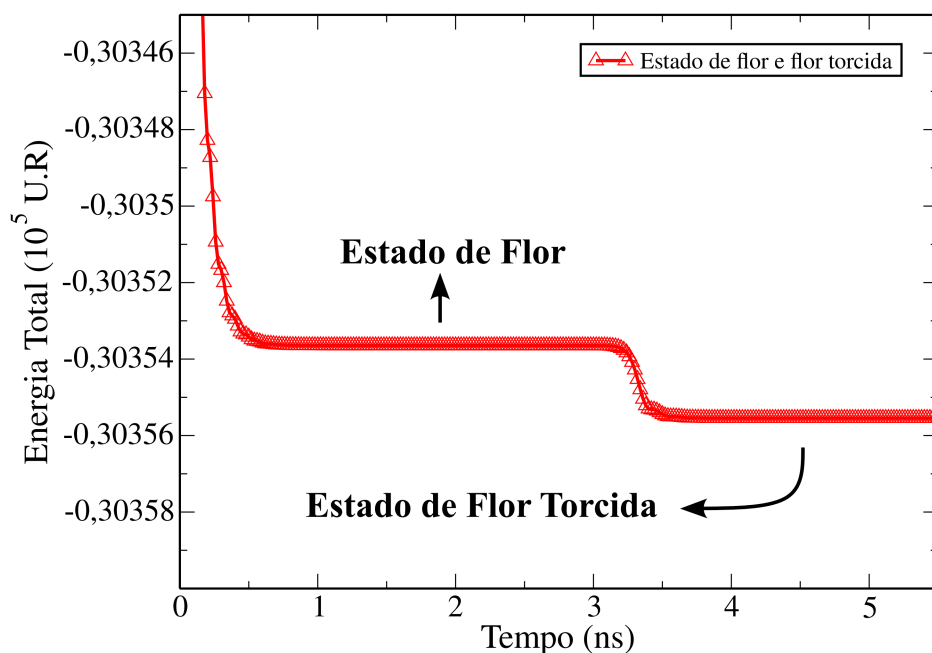


Figura 5.13 – Minimização da energia total em função do tempo do cubo para uma rede $N = 15$ do estado de flor e flor torcida na razão $L/l_{tr} = 8, 20$, onde obtemos uma curva.

Fonte: Produzida pelo autor.

O gráfico (5.12) representa a energia total a partir da configuração inicial da figura 5.1(a), e verificamos que a energia é minimizada em um cubo com $N = 15$ células de simulação na razão $L/l_{tr} = 7,80$, onde obtemos um platô que permanece até o final da simulação. Isso ilustra o estado de flor, que está relaxado ao equilíbrio. Já no gráfico (5.13), para a mesma configuração inicial, na rede $N = 15$, mas na razão $L/l_{tr} = 8,20$ observamos que quando o sistema relaxa ao equilíbrio, a energia atinge um platô momentâneo, representando o estado de flor inicial. No entanto, à medida que o tempo passa, observamos uma nova queda na energia total, ou uma nova minimização de energia, caracterizando a obtenção do estado de flor torcida. A partir dessa análise, percebemos que o estado de flor torcida é mais favorável energeticamente do que o estado de flor comum. Esse estado foi relatado primeiramente por Scharbes et al. (74), que o denominaram primeiramente como estado de vórtice devido a imagem formada no eixo \hat{z} , sendo depois chamado como estado de flor torcida.

À medida que aumentamos a razão L/l_{tr} do cubo, a magnetização tende a torcer mais, tornando esse resultado predominante e impedindo a obtenção do estado de flor normal. Nas figuras a seguir, mostramos o estado de flor torcida para $L/l_{tr} = 12,00$, bem como seus recortes em $x = \pm L/2$ e $z = 0$.

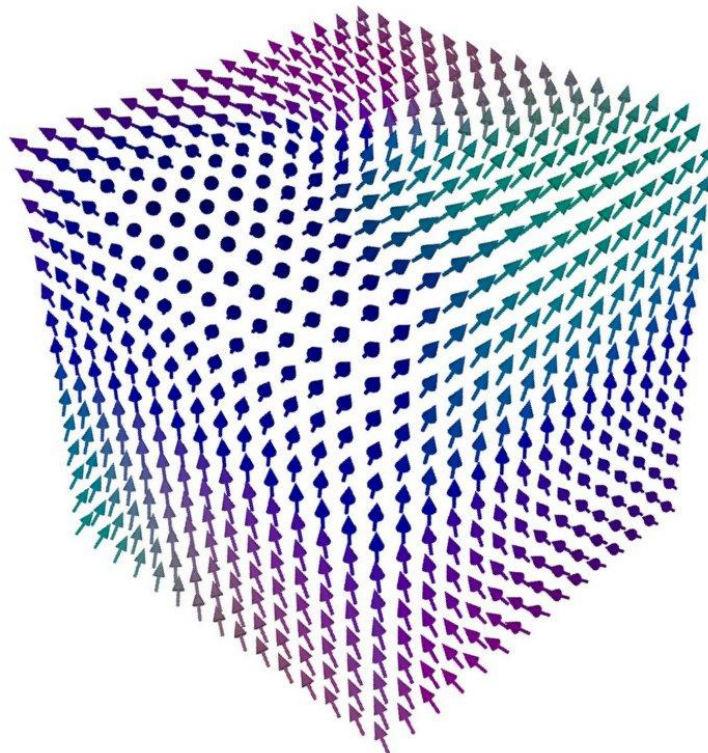
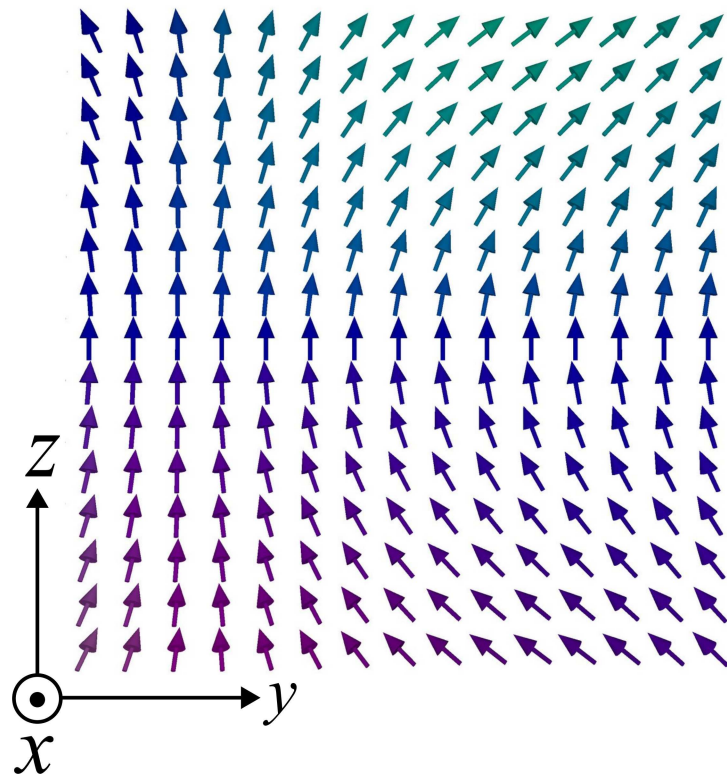
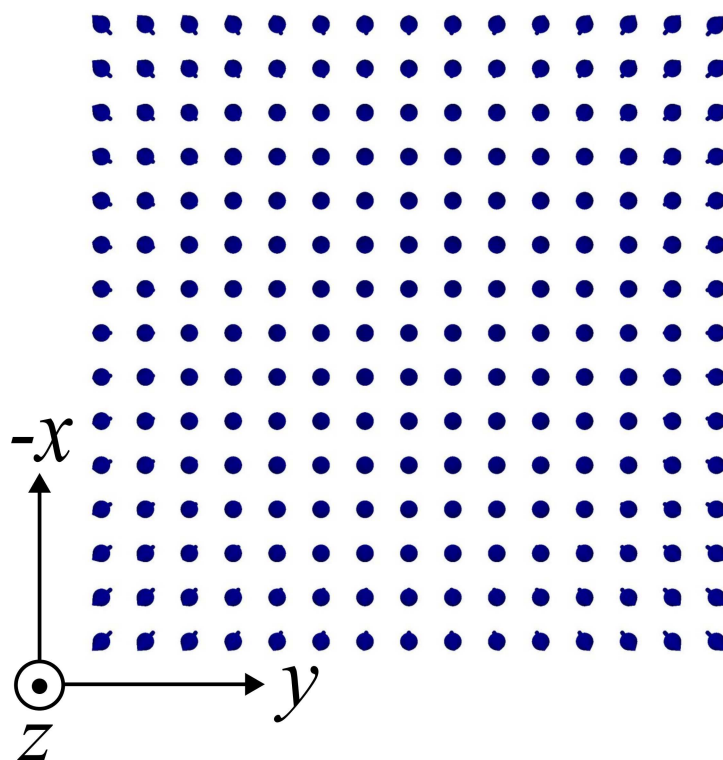


Figura 5.14 – Estado de flor torcida em $L/l_{tr} = 12,0$ para uma rede $N = 15$. Nesse tamanho, ao iniciar a simulação, ele é o único estado obtido.

Fonte: Produzida pelo autor.



(a)



(b)

Figura 5.15 – Seção transversal da lateral do cubo em (a) $x = \pm L/2$ e (b) $z = 0$, com os momentos saindo para fora do plano.

Fonte: Produzida pelo autor.

Notamos que a magnetização no cubo da figura (5.14) está em uma forma mais torcida do que na representação da figura (5.5). Isso pode ser notado com detalhes na figura 5.15(a), onde mostra a diferença da magnetização nas faces laterais em relação à figura (5.7). Outra diferença importante é ilustrada pela figura 5.15(b), onde não temos a espiral ou vórtice simétrico da configuração (5.9) na seção transversal em $z = 0$, e sim um plano com a magnetização totalmente na direção do eixo \hat{z} . O autor Hertel et al. (64) encontrou o estado de flor torcida, e verificou que ele também se manifesta no cubo a partir da razão $L/l_{tr} = 8,00$. Vansteenkiste et al. (66) e Makarov (35) encontraram, respectivamente, em $L/l_{tr} = 8,16$ e $L/l_{tr} = 8,25$. De acordo com o valor obtido para nossa maior rede $N = 21$, temos $L/l_{tr} = 8,08$ de acordo com o gráfico da figura (5.11), logo nosso resultado está próximo do encontrado pelos autores mencionados.

Ressaltamos que a nossa análise é semelhante com a realizada na literatura, onde obtiveram os estados de flor e flor torcida a partir da configuração inicial da figura 5.1(a). Ao aumentarmos o tempo nas nossas simulações para mais que $t = 12 \times 10^{-9}s$ para cada razão L/l_{tr} , não observamos uma outra minimização de energia do sistema, logo esses dois estados, de flor e flor torcida são os únicos possíveis de se obter. Posteriormente, também faremos a comparação energética para investigar em qual razão L/l_{tr} o estado de flor torcida terá uma energia maior que o estado de vórtice em nossos sistemas, e se esse valor concorda com os relatados na literatura.

5.4 ESTADO DE VÓRTICE

Proveniente da segunda configuração inicial da figura 5.1(b), utilizando o mesmo valor de anisotropia relativa $Q = 0,1$, o estado de vórtice é mostrado na figura (5.16).

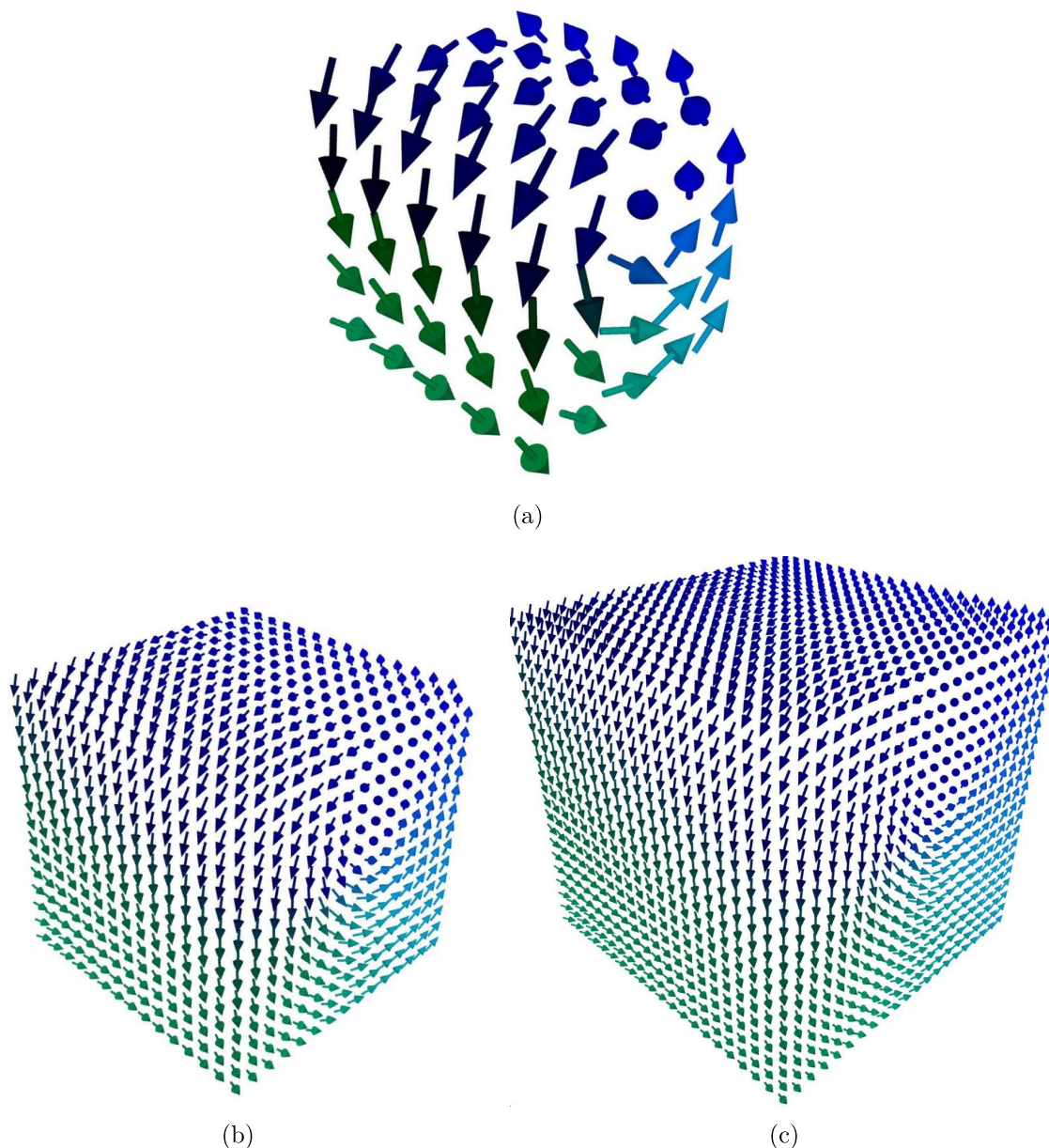
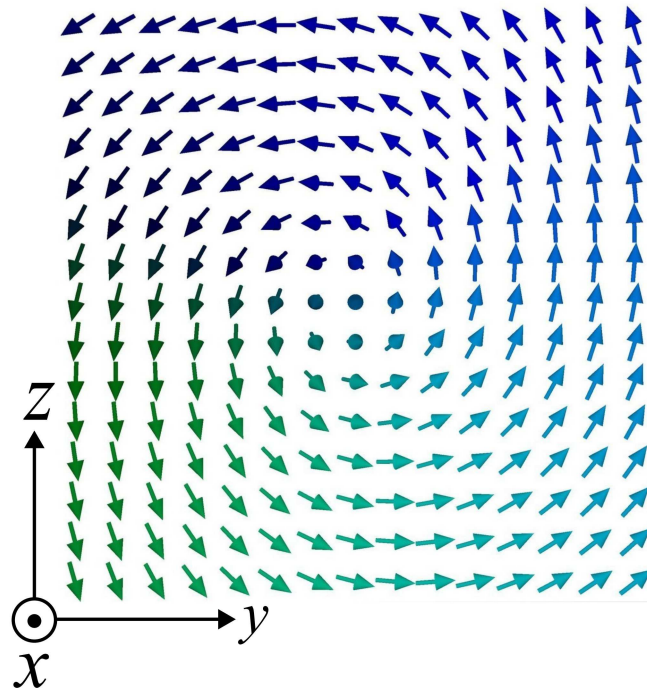


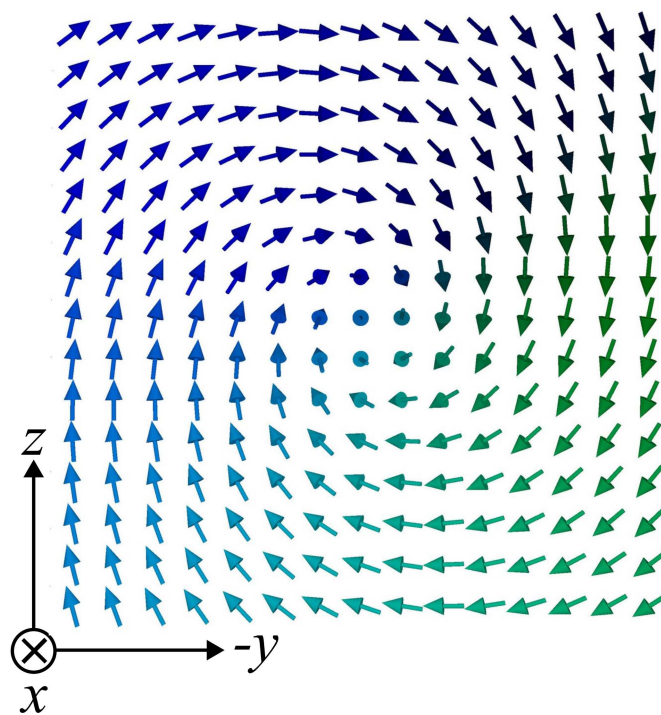
Figura 5.16 – Domínio uniforme encontrado, conhecido como estado de vórtice, para a menor grade (a) $N = 5$, para (b) $N = 15$, e para a maior grade (c) $N = 21$.

Fonte: Produzida pelo autor.

Devido à interação dos momentos antiparalelos ao eixo fácil, percebemos na simulação uma alta complexidade da magnetização em se organizar até alcançar o equilíbrio. Ao contrário dos outros dois estados encontrados, o estado de vórtice tem uma menor dependência da magnetização em relação ao eixo fácil, tendo mais dependência no eixo \hat{x} . Verificamos isso através dos recortes das faces listados nas figuras (5.17) e (5.18).



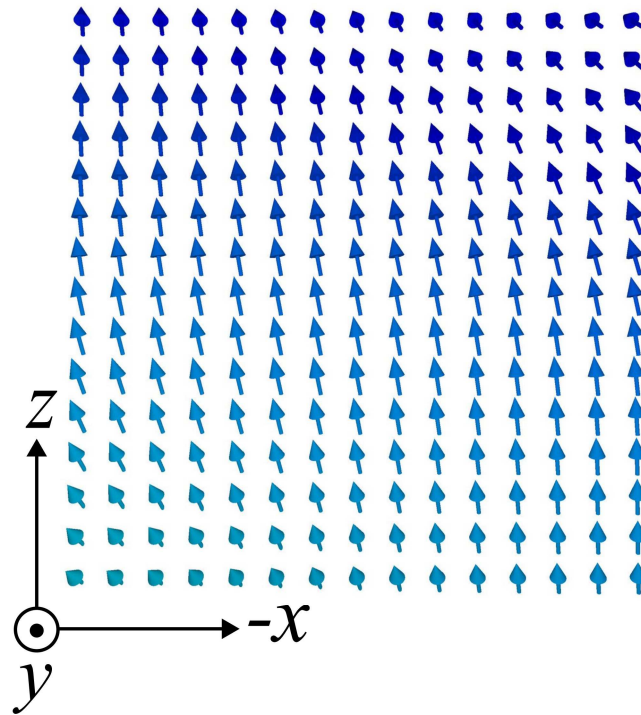
(a)



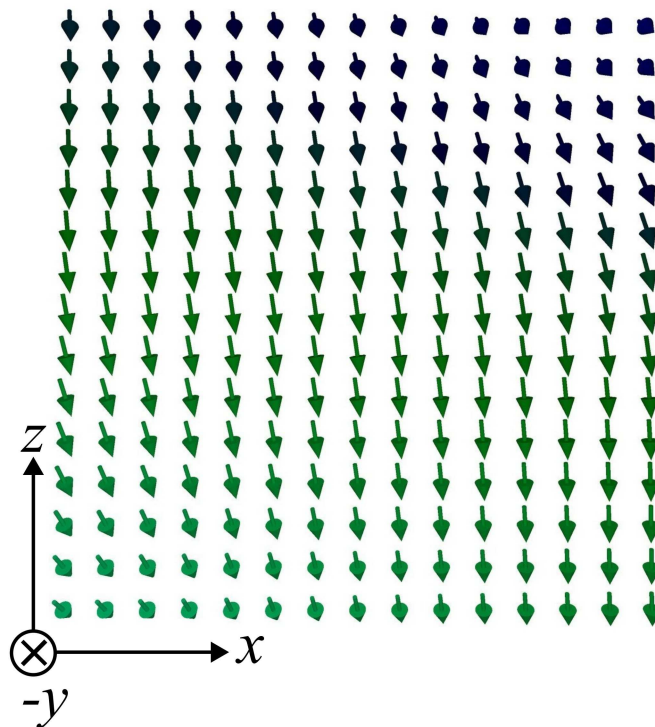
(b)

Figura 5.17 – Seção transversal da lateral do cubo em (a) $x = +L/2$ e (b) $x = -L/2$ para o estado de vórtice em uma rede $N = 15$.

Fonte: Produzida pelo autor.



(a)



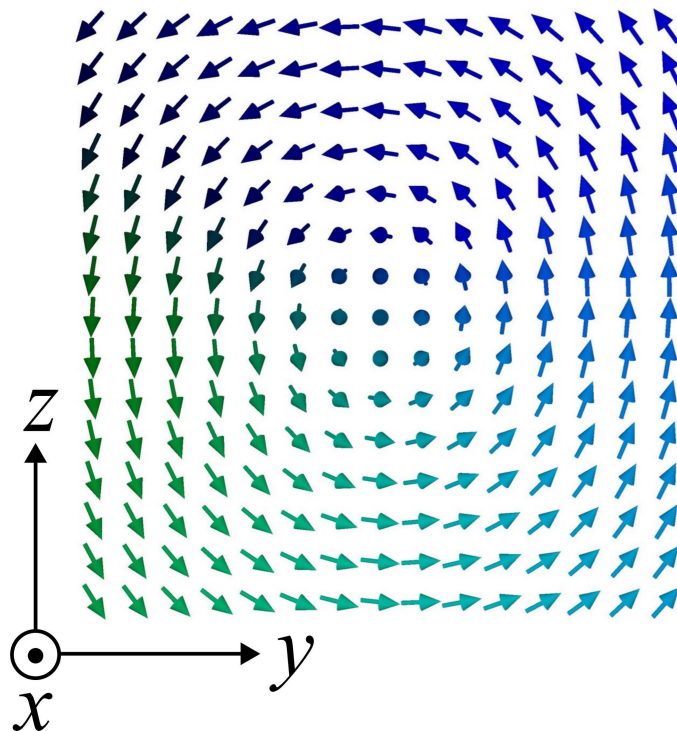
(b)

Figura 5.18 – Seção transversal da lateral do cubo em (a) $y = +L/2$ e (b) $y = -L/2$ para o estado de vórtice em uma rede $N = 15$. Também obtemos essa mesma perspectiva para $z = \pm L/2$.

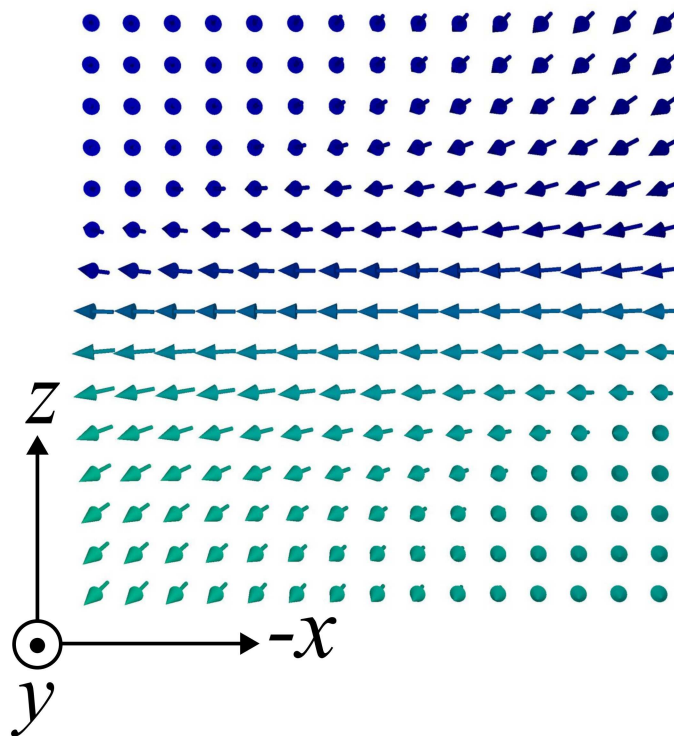
Fonte: Produzida pelo autor.

Na figura (5.17), vemos que no centro os momentos convergem para o eixo \hat{x} , e na seção transversal em (5.18), notamos o plano em que os momentos estão rotacionando em

torno do eixo \hat{x} . Com base nessa observação, verificamos agora as seções transversais na origem do sistema, $x = 0$, $y = 0$, como ilustra a figura (5.19).



(a)



(b)

Figura 5.19 – Perspectiva do centro do cubo em (a) $x = 0$ e (b) $y = 0$ para o estado de vórtice na grade $N = 15$.

Fonte: Produzida pelo autor.

No recorte em $x = 0$, a magnetização difere um pouco da estrutura mostrada nas laterais do cubo, apresentando um vórtice mais simétrico. Na seção transversal em $y = 0$ no estado de vórtice, também difere das imagens ilustradas nas laterais $y = \pm L/2$, onde observamos com detalhes os momentos convergindo para a direção do eixo \hat{x} . Essa ilustração é conhecida na literatura como linha de Bloch (75), evidenciando assim a magnetização perpendicular ao eixo fácil. Essas mesmas análises foram observadas por Hertel et al. (64) e Scharbes et al. (74).

Vamos fazer uma comparação das energias do estado de flor comum e estado de flor torcida com estado de vórtice, e analisar em qual razão L/l_{tr} um se torna menos energético do que o outro. Primeiro, comparamos apenas a mudança de energia do estado magnético entre: **o estado de flor** \Rightarrow **estado de vórtice**, como mostram os gráficos a seguir.

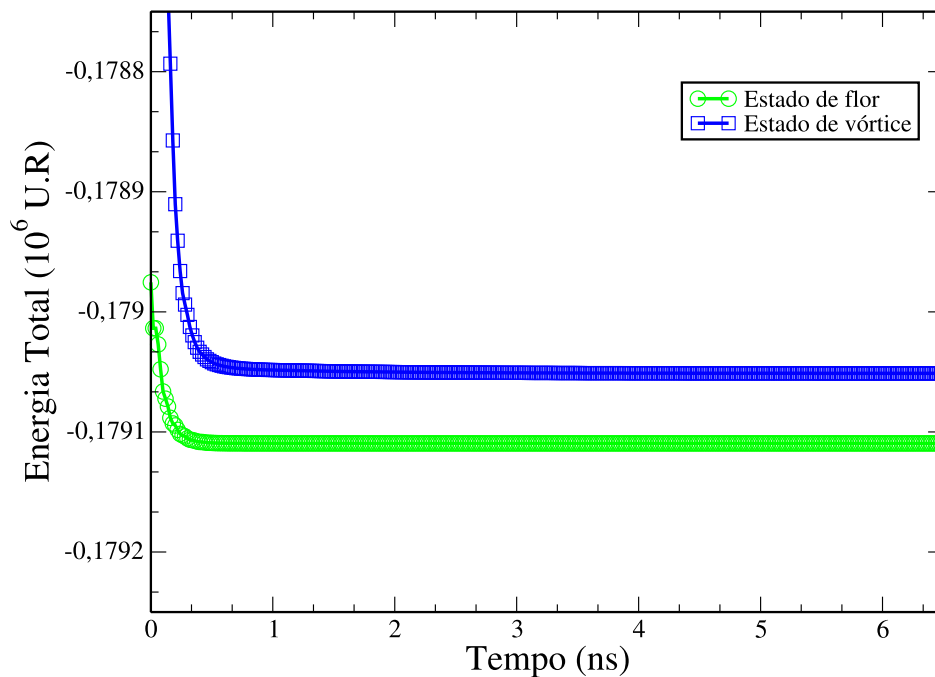


Figura 5.20 – Energia total em função do tempo para maior rede $N = 21$, onde mostra o estado de vórtice mais energético que o estado de flor comum em $L/l_{tr} = 8,00$.
Fonte: Produzida pelo autor.

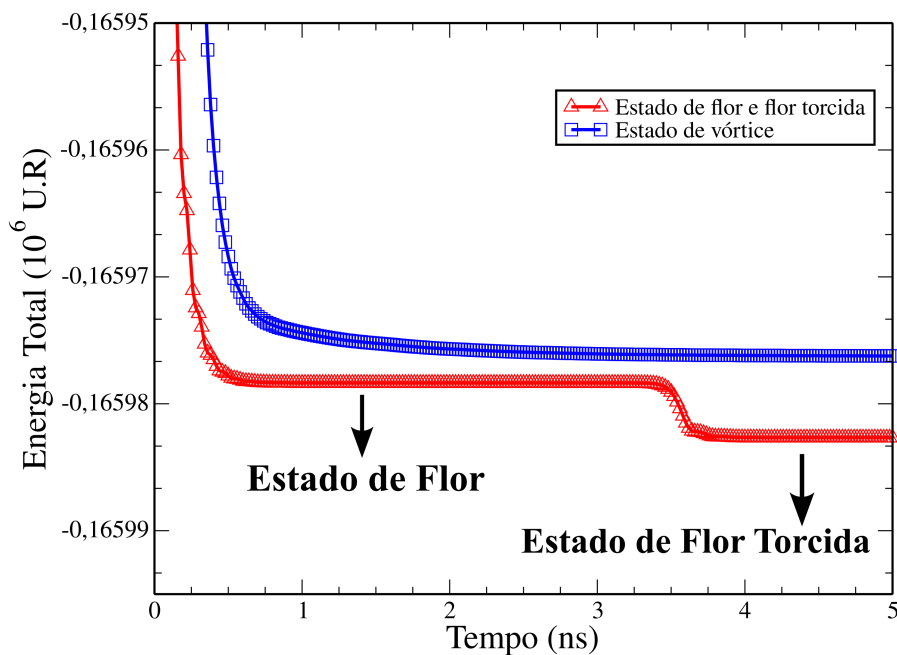


Figura 5.21 – Energia total em função do tempo para maior rede $N = 21$, onde mostra o estado de vórtice mais energético que o estado de flor comum e do estado de flor torcida, sendo que este último aparece após o primeiro platô na razão $L/l_{tr} = 8,40$.

Fonte: Produzida pelo autor.

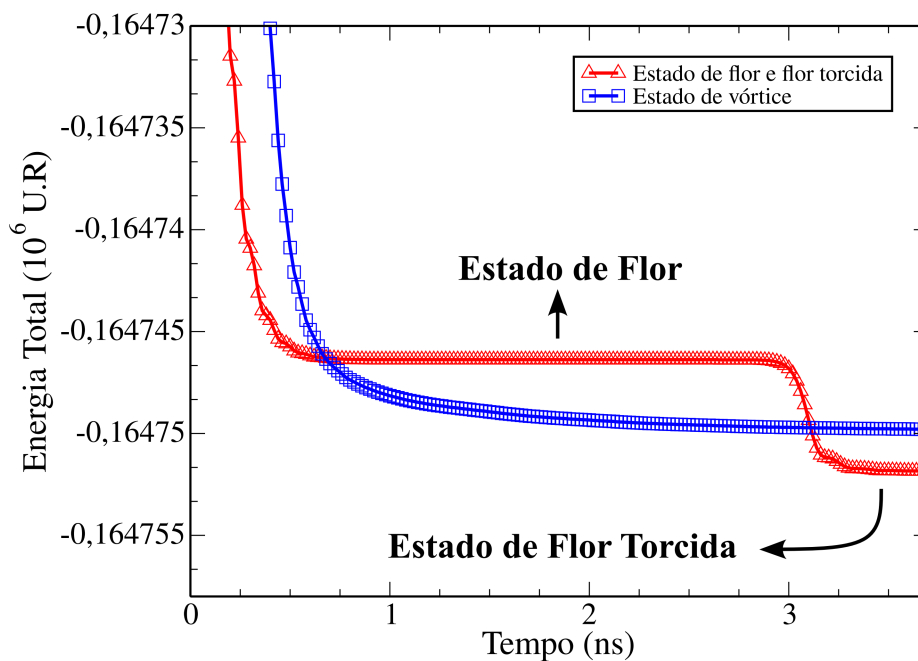


Figura 5.22 – Energia total em função do tempo para maior rede $N = 21$, onde mostra somente o estado de flor mais energético que o estado de vórtice na razão $L/l_{tr} = 8,43$. O estado de flor torcida é o que tem menor energia nesse comprimento de borda.

Fonte: Produzida pelo autor.

Nos gráficos anteriores, percebemos o momento que o estado de flor passa a ter uma energia maior que o estado de vórtice. Inicialmente, em $L/l_{tr} = 8,00$, o estado de vórtice é o que possui maior energia. Isso se dá ao fato de que a energia de interação de troca e da interação dipolar serem mais intensas pela distância menor entre as células. À medida que aumentamos o tamanho do sistema até próximo a $L/l_{tr} = 8,40$, o estado de vórtice tende a ficar menos energético que o estado de flor devido à energia de interação dipolar, que decresce com o cubo da distância. Essa observação foi notada por Hertel et al. (64), onde explicaram que a energia menor do estado de vórtice se deve ao campo disperso ou desmagnetizante. A partir do momento que aumentamos a razão para $L/l_{tr} = 8,50$, o estado de flor e flor torcida ultrapassam o estado de vórtice. Para obtermos com mais precisão em qual momento o estado de flor ficará mais energético que o estado de vórtice, variamos a razão L/l_{tr} na segunda casa decimal, obtendo assim o valor $L/l_{tr} = 8,43$, como ilustra o gráfico da figura (5.22).

Uma análise importante é que, à medida que aumentamos o tamanho do sistema em N células de simulação, o valor da razão L/l_{tr} que ilustra a mudança do estado de mínima energia entre estado de flor e estado de vórtice tende a atingir um valor máximo, não variando muito, independente se aumentarmos ainda mais o tamanho do sistema. No gráfico abaixo, mostramos o conjunto de pontos para todas as grades que realizamos nossas simulações.

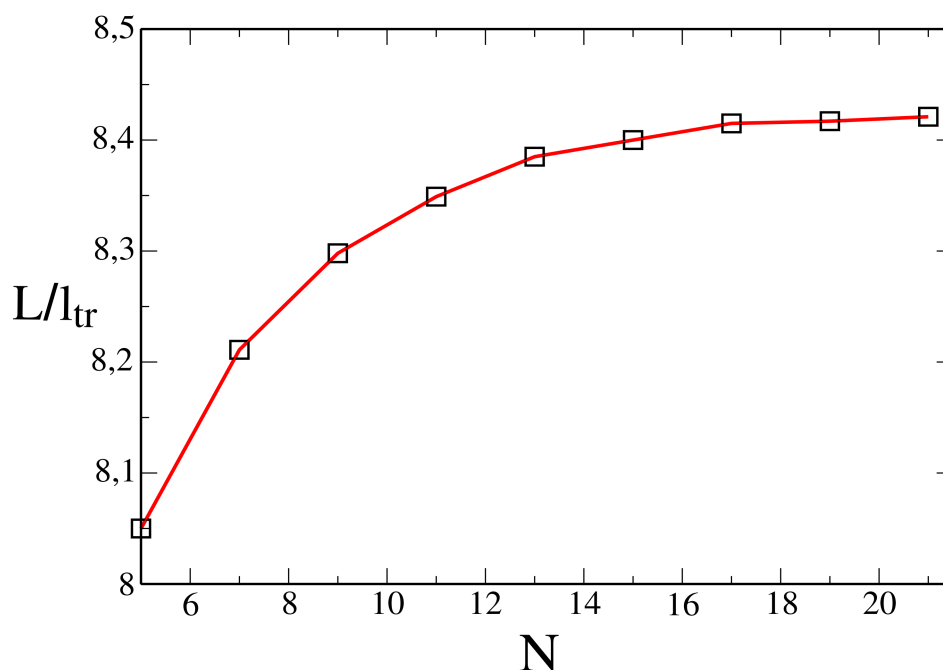


Figura 5.23 – Razão L/l_{tr} em função do número N de células de simulação para a mudança energética entre o estado de flor e o estado de vórtice.

Fonte: Produzida pelo autor.

A partir da rede $N = 15$, notamos que a razão do comprimento de borda L/l_{tr} tende a se estabilizar em aproximadamente 8,40, não desviando muito desse valor, o que foi confirmado nas redes maiores $N = 17$, $N = 19$ e $N = 21$. Na tabela (5.3), fazemos um comparativo com os diversos resultados propostos na literatura por outros grupos do valor da razão L/l_{tr} para a mudança dos estados de mínima energia entre o estado de flor e o estado de vórtice.

Autores	L/l_{tr}
RAVE; FABIAN; HUNBERT. (63)	8,47
RIBEIRO; FREITAS; MARTINS. (65)	8,46
HERTEL; KRONMULLER. (64)	8,52
VANSTEENKISTE et al.(66)	8,47
MAKAROV (35)	8,43
BJØRK et al. (67)	8,47
GFMC - UFJF	8,43

Tabela 5.3 – Conjunto de soluções para o comprimento de borda crítico, onde as energias do estado de flor passam a ser maiores que o estado de vórtice. É destacado em vermelho o nosso resultado.

De acordo com a especificação do problema, que informa que deveríamos encontrar a razão por volta de $L/l_{tr} = 8,00$ (18), o nosso resultado utilizando interação dipolar concordou com o da literatura, que encontrou próximo de $L/l_{tr} = 8,40$. Lembrando que para calcular o valor da razão em seus respectivos resultados, os autores mencionados fizeram o uso do campo desmagnetizante para calcular a energia magnetostática.

Por fim, temos a segunda mudança energética de estado de mínima energia, representada por: **estado de flor torcida** \Rightarrow **estado de vórtice** conforme mostra no gráfico da figura (5.24).

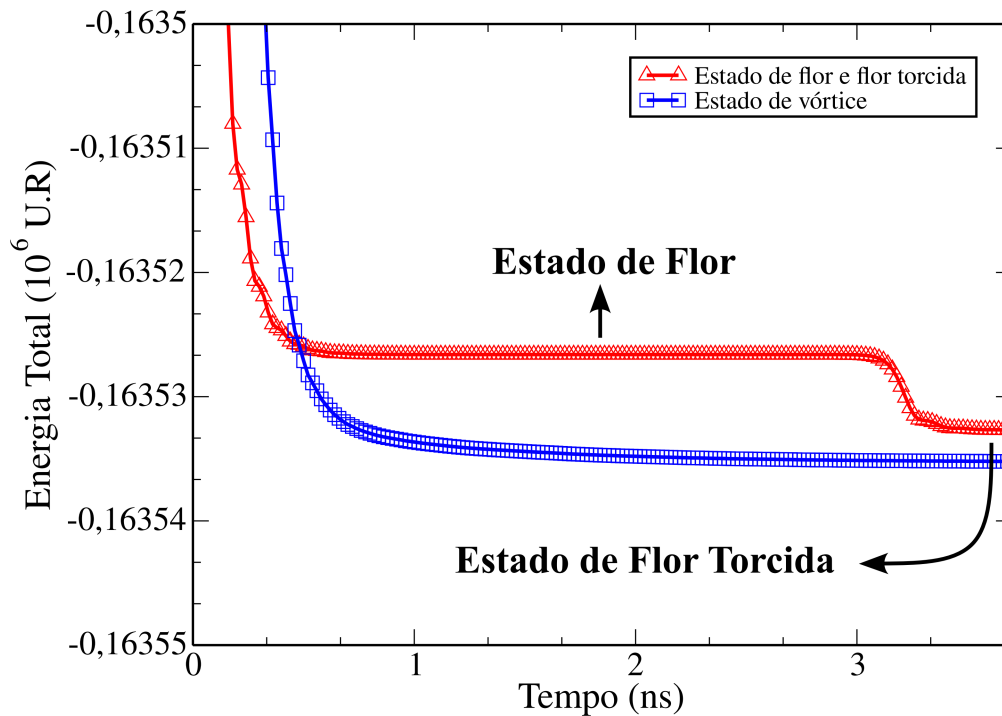


Figura 5.24 – Energia total em função do tempo para maior rede $N = 21$. O estado de flor torcida está mais energético que o estado de vórtice na razão $L/l_{tr} = 8,46$. A partir desse comprimento de borda, o estado de vórtice é o mais favorável energeticamente.

Fonte: Produzida pelo autor.

Da mesma forma que foi realizado para obter a razão L/l_{tr} para a mudança entre estado flor e vórtice, variamos L/l_{tr} na segunda casa decimal para obter um valor com precisão. Logo, para a razão $L/l_{tr} = 8,46$, obtemos o estado de flor torcida mais energético do que o vórtice, e a partir do momento que aumentamos mais ainda a razão L/l_{tr} , essa diferença tende a se manter. De acordo com Hertel et al.(64), essa mudança ocorre para a razão $L/l_{tr} = 8,56$. Nos resultados dos demais autores (35, 63, 65, 66, 67), ficou assumido que o estado de flor comum e flor torcida equivalem à um só estado de mínima energia quando comparados ao estado de vórtice, logo os autores só consideraram a razão L/l_{tr} para a mudança de mínima energia entre o estado de flor torcida e o estado de vórtice, com os valores que podem ser conferidos na tabela (5.3).

6 CONCLUSÕES

O estudo dos estados de mínima energia de partículas cúbicas magnéticas é essencial para compreender os processos de magnetização dessas partículas, bem como as interações presentes e a dinâmica dos momentos magnéticos através da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, que estão diretamente ligadas ao processo de minimização da energia total do sistema. Através das simulações micromagnéticas, podemos discretizar essas partículas por meio de células de simulação e realizar um estudo dos estados de mínima energia das partículas com anisotropia uniaxial, encontrando os domínios únicos referenciados na literatura como estado de flor, estado de flor torcida e estado de vórtice.

Apresentamos nossa solução para o problema padrão número 3, onde utilizamos a interação dipolar para o cálculo da energia magnetostática, ao contrário dos trabalhos disponíveis na literatura, que optaram por calcular a energia magnetostática através do campo disperso ou desmagnetizante. As demais interações, de troca e anisotropia uniaxial, são equivalentes em todas as metodologias. Após análise dos resultados, observamos uma concordância significativa com os estudos anteriores (35, 64, 65, 63, 66, 67), em relação aos domínios únicos em sistemas de diferentes tamanhos ($5 \leq N \leq 21$). Tanto o estado de flor, flor torcida e vórtice foram identificados em nossas simulações, alinhando-se aos resultados encontrados na literatura. O comprimento de borda crítico, determinado pela razão L/l_{tr} , também está em concordância com os demais trabalhos, com $L/l_{tr} = 8,43$ para a mudança energética entre: **estado de flor** \Rightarrow **estado de vórtice**, e $L/l_{tr} = 8,46$ para a mudança energética entre: **estado de flor torcida** \Rightarrow **estado de vórtice** na nossa maior rede $N = 21$. Como para $N = 21$ encontramos um resultado condizente com os resultados da literatura, e como demanda bastante tempo de cálculos em computadores para $N > 21$, resolvemos não prosseguir para sistemas maiores.

Portanto, com base nos nossos resultados, concluímos que nossa metodologia utilizando a interação dipolar é adequada e equivale às abordagens utilizando campo desmagnetizante. O programa utilizado também demonstrou ser eficiente, uma vez que conseguimos calcular as mudanças entre os estados de mínima energia com ótima precisão.

Uma perspectiva futura seria realizar estudos para diferentes anisotropias relativas, como os realizados pelo autor Rave et al. (63), investigando os estados de mínima energia para diferentes cubos magnéticos, sendo duros ($Q > 1,0$) e moles ($Q \ll 1,0$). Outra perspectiva é aumentar a validação do nosso programa, solucionando os demais problemas padrões disponibilizados na literatura (μ MAG Standard Problems #1, #2, #4 e #5) (18).

REFERÊNCIAS

- (1) WEI, D. *Micromagnetics and Recording Materials*. 1^a. ed. Tsinghua University Beijing: Springer, 2012.
- (2) IVANOV, Y.; CHUBYKALO-FESENKO, O. Micromagnetic simulations of cylindrical magnetic nanowires. *Magnetic Nano and Microwires*, Woodhead Publishing, n. 14, p. 423–448, 2015.
- (3) COEY, M.; PARKIN, S. S. P. *Handbook of Magnetism and Magnetic Materials*. 1^a. ed. Cham, Switzerland: Springer, 2021.
- (4) GREAVES, S. et al. The dynamics of microwave-assisted magnetic recording. *IEEE Trans. Magn*, v. 51, n. 4, p. 1–7, 2015.
- (5) FUKUDA, H.; NAKATANI, Y. Recording density limitation explored by head/media co- optimization using genetic algorithm and gpu-accelerated llg. *IEEE Trans. Magn*, v. 48, n. 11, p. 3895–3898, 2012.
- (6) WANG, H. et al. Optimal write head design for perpendicular magnetic recording. *IEEE Trans. Magn*, v. 51, n. 11, p. 1–4, 2015.
- (7) MAKAROV, A. et al. Fast switching in magnetic tunnel junctions with two pinned layers: micromagnetic modeling. *IEEE Trans. Magn*, v. 48, n. 4, p. 1289–1292, 2012.
- (8) LACOSTE, B. et al. Modulating spin transfer torque switching dynamics with two orthogonal spin-polarizers by varying the cell aspect ratio. *Phys. Rev. B*, v. 90, n. 11, p. 224404, 2014.
- (9) NIST. *NIST Micromagnetic Modeling Project Enables Research Advancements Worldwide*. 2022. <https://www.nist.gov/itl/nist-micromagnetic-modeling-project-enables-research-advancements-worldwide>. 29 de outubro de 2023.
- (10) LOPEZ-DIAZ, L. et al. Micromagnetic simulations using graphics processing units. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 45, n. 32, p. 323001, 2012.
- (11) DONAHUE, M. J.; PORTER, D. *OOMMF User's Guide, Version 1.0*. 1999. <https://doi.org/10.6028/NIST.IR.6376>. 14 de janeiro de 2023.
- (12) MUMAX³. 2011. <https://mumax.github.io/examples.html>. 14 de janeiro de 2024.
- (13) MAGTENSE - A Micromagnetism and Magnetostatic Framework. 2010. <https://www.magtense.org/>. 14 de janeiro de 2024.
- (14) FIDIMAG - Atomistic and Finite-Difference Micromagnetic Solver. 2015. <https://fidimag.readthedocs.io/en/latest/>. 14 de janeiro de 2024.
- (15) BERKOV, D. V. *MicroMagnum - Software for Micromagnetic Simulation*. 2008. <http://www.micromagus.de>. 14 de janeiro de 2024.

- (16) LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. *Phys. Z, Sowjetunion*, v. 8, p. 153–169, 1935.
- (17) GILBERT, T. L. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 40, n. 6, p. 3443–3449, 2004.
- (18) GROUP μ MAG M. M. A. *μ Mag Standard Problems*. 1998.
<https://www.ctcms.nist.gov/~rdm/mumag.org.html>. 28 de outubro de 2023.
- (19) CULLITY, B. D.; GRAHAM, C. D. *Introduction to Magnetic Materials*. 2nd. ed. New Jersey, United States: John Wiley & Sons, Inc., 2009.
- (20) NOLTING, W.; RAMAKANTH, A. *Quantum Theory of Magnetism*. Berlin, Germany: Springer, 2009.
- (21) JACKSON, J. D. *Classical Electrodynamics*. 3rd. ed. New York, United States: John Wiley & Sons, Inc., 1999.
- (22) GRIFFITHS, D. J. *Eletrodinâmica*. 3rd. ed. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 2011.
- (23) BUSCHOW, K. H. J.; BOER, F. R. de. *Physics of Magnetism and Magnetic Materials*. Kluwer Academic and Plenum: 233 Spring Street, New York, 2003.
- (24) ASSIS, H. S. de. *Análise da Estabilidade de Skyrmions em Filme Antiferromagnético ($KMnF_3/Pt$) Contendo Impurezas Magnéticas*. 76 p. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal de Juiz de Fora, 2023.
- (25) HOLANDA, L. M. et al. Comportamento magnético de materiais por meio da mecânica estatística. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 42, p. 11, October 2020.
- (26) ZETTLI, N. *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*. 2nd. ed. United Kingdom: A John Wiley and Sons, Ltd, 2009.
- (27) SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. revised edition. Los Angeles, United States: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- (28) GETZLAFF, M. *Fundamentals of Magnetism*. Berlin, Germany: Springer, 2008.
- (29) NUSSENZVEIG, H. M. *Curso de Física Básica Vol.3: Eletromagnetismo*. 2^a. ed. São Paulo: Blucher, 2015.
- (30) HE, K. *Quantitative Phase Imaging of Magnetic Nanostructures Using Off-Axis Electron Holography*. 149 p. Tese (Doctor of Philosophy) — Arizona State University, 2010.
- (31) SIMON, S. H. *The Oxford Solid State Basics*. 1^a. ed. United Kingdom: Oxford University Press, 2013.
- (32) FARIAS, W. S. de. *Comportamento Estático e Dinâmico de Skyrmions em Nanofitas Magnéticas Curvadas Via Simulação Micromagnética*. 103 p. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Juiz de Fora, 2023.

- (33) TOSCANO, D. *Estudo via Simulação Computacional da Dinâmica da Magnetização em Nanomagnetos Contendo uma Distribuição de Impurezas Magnéticas*. 139 p. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Juiz de Fora, 2015.
- (34) TOSCANO, D. *Estudo via Simulação Computacional da Formação de Vórtice e do Modo Girotrópico em Nanodiscos*. 139 p. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal de Juiz de Fora, 2011.
- (35) MAKAROV, A. *Modeling of Emerging Resistive Switching Based Memory Cells*. 149 p. Tese (Doctor of Technical Sciences) — Technical University of Vienna, 2014.
- (36) BISOTTI, M. A. *Research Software Engineering in Micromagnetics*. 144 p. Tese (Doctor of Philosophy) — University of Southampton, 2020.
- (37) TOSCANO, D. et al. F. building traps for skyrmions by the incorporation of magnetic defects into nanomagnets: Pinning and scattering traps by magnetic properties engineering. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 480, p. 171–185, February 2019.
- (38) MICHELS, A. et al. Micromagnetic simulation of magnetic small-angle neutron scattering from two-phase nanocomposites. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 350, n. 2014, p. 55–68, September 2013.
- (39) JUNIOR, M. G. M. *Simulação da Dinâmica Do Micromagnetismo de Vórtices Implementados em Plataformas de Programação em Paralelo*. 119 p. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal de Juiz de Fora, 2016.
- (40) FERREIRA, V. A. *Estudo da Dinâmica da Parede de Domínio Transversal em Nanofios Magnéticos*. 173 p. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Juiz de Fora, 2013.
- (41) KOEHLER, T.; FREDKIN, D. Finite element methods for micromagnetics. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 28, n. 2, p. 1239–1244, 1992.
- (42) BISOTTI, M. A. et al. Fidimag – a finite difference atomistic and micromagnetic simulation package. *Journal of Open Research Software*, v. 6, n. 22, p. 11, September 2018.
- (43) KUMAR, D.; ADEYEYE, A. O. Techniques in micromagnetic simulation and analysis. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 50, n. 34, p. 343001, jul 2017. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1361-6463/aa7c04>>.
- (44) PAIXÃO, E. L. M. da. *Estudo da Parede de Domínio Transversal na Presença de Impurezas Magnéticas sob Efeito de Corrente Elétrica Polarizada em Spin via Simulação Micromagnética*. 140 p. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Juiz de Fora, 2018.
- (45) GOMES, J. C. de S. *Estudo de Sistemas Magnéticos Nanoestruturados via Simulação Computacional, com Aplicação de Memórias Magnetoresistivas*. 197 p. Tese (Doutorado em Física) — Universidade Federal de Juiz de Fora, 2020.

- (46) GUEDES, R. C. de O. *Estudo Via Simulação Computacional da Estabilidade de Skyrmions em Filmes Antiferromagnéticos e Suas Interações com Impurezas Magnéticas*. 79 p. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal de Juiz de Fora, 2021.
- (47) SANTECE, I. A. *Análise Estrutural e Dinâmica de Skyrmions Via Simulação Computacional Aplicados em Nanofitas de Co/Pt*. 70 p. Dissertação (Mestrado em Física) — Universidade Federal de Juiz de Fora, 2019.
- (48) YOUNG, N. *An introduction to Hilbert space*. New York, United States: Cambridge University Press, 1988.
- (49) LAKSHMANAN, M. The fascinating world of landau-lifshitz-gilbert equation: An overview. *Royal Society, Centre for Nonlinear Dynamics, Department of Physics, Bharathidasan Univeristy, Tiruchirapalli - 620 024, India*, v. 369, p. 1280–1300, March 2011.
- (50) ZHANG, S.; LI, Z. Roles of nonequilibrium conduction electrons on the magnetization dynamics of ferromagnets. *Physical Review Letters*, v. 93, n. 12, 2004.
- (51) BAZALIY, Y. B.; JONES, B. A.; ZHANG. Modification of the landau- lifshitz equation in the presence of a spin-polarized current incolossal- and giant-magneto-resistive materials. *Physical Review B*, v. 57, n. 6, p. 3213–3216, 1998.
- (52) WANG, X. et al. Current-induced skyrmion motion on magnetic nanotubes. *Journal of Physics D: Applied Physics*, v. 52, n. 22, p. 1–6, 2019.
- (53) MEHROTRA, S. On the implementation of a primal-dual interior pont method. *SIAM Journal on optimization*, v. 4, n. 2, p. 575–601, 1992.
- (54) GUARDIA, L. E. T. O problema linear de fluxo em rede - método preditor-corretor. *ENGEVISTA*, v. 11, n. 2, p. 109–116, Dezembro 2009. Disponível em: <<https://periodicos.uff.br/engevista/article/view/8845/6313>>.
- (55) BOYCE, R. C. D. W. E. *Elementary differential equations and boundary value problems*. 9. ed. New York, United States: Wiley, 1992.
- (56) FREITAS-LEMES, P.; C.VILELA, D.; GERMANO, J. Abordagem contextualizada do método runge-kutta na disciplina de cálculo numérico para engenharia. *Espacios*, v. 38, n. 15, p. 15, Outubro 2017. Disponível em: <<https://www.revistaespacios.com/a17v38n15/a17v38n15p15.pdf>>.
- (57) BROWN, W. *Micromagnetics*. New York, United States: Wiley, 1963.
- (58) BROWN, W.; BONTE, A. L. Structure and energy of one-dimensional domain walls in ferromagnetic thin films. *Appl. Phys*, v. 36, n. 4, p. 1380–1386, 1965.
- (59) BERTOTTI, G. *Hysteresis in Magnetism for Physicists, Materials Scientists and Engineers*. [S.l.]: Academic Press, 1998.
- (60) RAVE, W.; RAMSTÖCK, K.; HUBERT, A. Corners and nucleation in micromagnetics. *J.Magn.Magn. Mater.*, v. 183, n. 3, p. 329–333, 2003.

- (61) PAIXÃO, E. et al. Depinning of the transverse domain wall trapped at magnetic impurities patterned in planar nanowires: Control of the wall motion using low-intensity and short-duration current pulses. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 451, p. 639–646, 2018.
- (62) WYSIN, G. M. Vortex-in-nanodot potentials in thin circular magnetic dots. *Journal of Physics: Condensed Matter*, Department of Physics, Kansas State University, Manhattan, KS 66506-2601, USA, v. 22, n. 37, p. 376002, August 2010.
- (63) RAVE, W.; FABIAN, K.; HUBERT, A. Magnetic states of small cubic particles with uniaxial anisotropy. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 190, n. 3, p. 332–348, 1998. ISSN 0304-8853.
- (64) HERTEL, R.; KRONMULLER, H. Finite element calculations on the single-domain limit of a ferromagnetic cube - a solution to μmag standard problem n°.3. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, I, v. 238, p. 185–199, 2002.
- (65) RIBEIRO, F.; FREITAS, P. P.; MARTINS, J. L. Micromagnetic simulation method with n1.5 scaling. *Journal of Applied Physics*, v. 85, n. 8, p. 5810–5812, 1999.
- (66) VANSTEENKISTE, A. et al. The design and verification of mumax3. *AIP Advances*, v. 4, n. 10, p. 107133, 2014.
- (67) BJØRK, R. et al. Magtense: A micromagnetic framework using the analytical demagnetization tensor. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 535, p. 168057, 2021.
- (68) SILVA, J. H. et al. The influence of magnetic impurities in the vortex core dynamics in magnetic nano-disks. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 324, n. 19, p. 3083–3086, September 2012.
- (69) FERREIRA, V. A. et al. Transverse domain wall scattering and pinning by magnetic impurities in magnetic nanowires. *Journal of Applied Physics*, v. 114, n. 013907, July 2013.
- (70) JÚNIOR, D. S. V. et al. Study on the coherence degree of magnetization reversal in permalloy single-domain nano-ellipses. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 426, n. 396-404, March 2017.
- (71) TOSCANO, D. et al. Suppression of the skyrmion hall effect in planar nanomagnets by the magnetic properties engineering: Skyrmion transport on nanotracks with magnetic strips. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 504, n. 166655, June 2020.
- (72) FARIAS, W. S.; SANTECE, I. A.; COURA, P. Z. The influence of curved surfaces on the propagation of skyrmions in a magnetic racetrack. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 568, n. 170386, February 2023.
- (73) POV-Ray - Persistence of Vision Raytracer (Version 3.6). 2024. <http://www.povray.org/download/>. 14 de fevereiro de 2024.
- (74) SCHABES, M. E.; BERTRAM, H. N. Magnetization processes in ferromagnetic cubes. *J. Appl. Phys.*, v. 64, n. 3, April 1988.

-
- (75) IZMOZHEROV, I. M.; ZVEREV, V. V.; BAYKENOV, E. Z. Bloch lines in thin films with perpendicular magnetic anisotropy and intermediate quality factor. *Journal of Physics: Conference Series*, v. 1389, n. 1, p. 012002, November 2019.
- (76) MACHADO, K. D. *Teoria do Eletromagnetismo Volume II*. 1st. ed. Paraná, Brasil: UEPG, 2004.
- (77) ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. *Física Matemática: Métodos Matemáticos para Engenharia e Física*. 6th. ed. Rio de Janeiro, Brasil: Elsevier Editora Ltda, 2007.

APÊNDICE A – Demonstração da Energia Magnetostática Através do Campo Desmagnetizante

A energia magnetostática, também denominada de energia de interação dipolar, surge quando cada momento em um magneto gera um campo dipolar. Cada um desses momentos, por sua vez, é influenciado pelo campo magnético resultante de todos os outros dipolos presentes. Assim, as interações magnetostáticas manifestam-se como interações de longo alcance.

A fim de descrever a energia do campo desmagnetizante, começaremos com a lei de Ampère (21), aplicada no interior de um ferromagneto e na ausência de corrente, onde podemos escrever:

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}^{dg} = 0. \quad (\text{A.1})$$

O campo \vec{H}^{dg} é antiparalelo à magnetização \vec{M} , e podemos relacioná-los através de

$$\vec{H}^{dg} = -N_d \vec{M}, \quad (\text{A.2})$$

onde, N_d é chamado de fator desmagnetizante, sendo adimensional e que varia de 0 a 1. O campo \vec{H}^{dg} não é rotacional e, assim como na eletrostática (32), expressamos esse campo como o gradiente de um potencial escalar:

$$\vec{H}^{dg} = -\vec{\nabla} \phi_M. \quad (\text{A.3})$$

Demonstramos esse resultado partindo de um magneto com volume V , magnetização \vec{M} e potencial vetor \vec{A} (21), sendo este último dado por:

$$\vec{A} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{V'} \vec{M}(\vec{r}') \times \left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) dV', \quad (\text{A.4})$$

onde \vec{r} é o vetor posição no espaço em que \vec{A} é calculado e \vec{r}' é a posição do volume dV' . Temos que (21):

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (\text{A.5})$$

Substituindo (A.4) em (A.5):

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{V'} \vec{\nabla} \times \vec{M}(\vec{r}') \times \left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) dV'. \quad (\text{A.6})$$

Temos a seguinte identidade vetorial para rotacionais (76):

$$\vec{\nabla} \times (\vec{M} \times \vec{K}) = (\vec{\nabla} \cdot \vec{K}) \vec{M} - (\vec{\nabla} \cdot \vec{M}) \vec{K} + (\vec{K} \cdot \vec{\nabla}) \vec{M} - (\vec{M} \cdot \vec{\nabla}) \vec{K} \quad (\text{A.7})$$

onde,

$$\vec{K} \equiv \frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (\text{A.8})$$

Em (A.7), temos duas contribuições que se anulam devido o operador $\vec{\nabla}$ atuar somente em \vec{r} :

$$\left(\vec{\nabla} \cdot \vec{M}(\vec{r}')\right) \frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = 0, \quad (\text{A.9})$$

$$\left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \vec{\nabla}\right) \vec{M}(\vec{r}') = 0. \quad (\text{A.10})$$

Aplicando (A.6) em (A.7), encontramos

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{V'} \left\{ \vec{M}(\vec{r}') \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}\right) - [\vec{M}(\vec{r}') \cdot \vec{\nabla}] \left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}\right) \right\} dV', \quad (\text{A.11})$$

No entanto, a propriedade da função Delta de Dirac (77) mostra que

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}\right) = \vec{\nabla} \cdot \left[-\vec{\nabla} \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}\right)\right] = -\nabla^2 \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}\right) = 4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (\text{A.12})$$

então aplicando em (A.11):

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{M}(\vec{r}') - \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{V'} [\vec{M}(\vec{r}') \cdot \vec{\nabla}] \left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}\right) dV'. \quad (\text{A.13})$$

Novamente, precisamos de outra identidade vetorial (76, 77):

$$\vec{\nabla} (\vec{M} \cdot \vec{K}) = (\vec{M} \cdot \vec{\nabla}) \vec{K} + \vec{M} \times (\vec{\nabla} \times \vec{K}) + (\vec{K} \cdot \vec{\nabla}) \vec{M} + \vec{K} \times (\vec{\nabla} \times \vec{M}), \quad (\text{A.14})$$

uma vez que três contribuições se anulam devido a $\vec{\nabla}$ atuar somente em \vec{r} , como em (A.10), e também:

$$\frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \times (\vec{\nabla} \times \vec{M}(\vec{r}')) = 0, \quad (\text{A.15})$$

$$\vec{M}(\vec{r}') \times \left(\vec{\nabla} \times \frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}\right) = 0. \quad (\text{A.16})$$

Combinando em (A.13), temos

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{M}(\vec{r}') - \frac{\mu_0}{4\pi} \vec{\nabla} \int_{V'} \vec{M}(\vec{r}') \cdot \left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}\right) dV', \quad (\text{A.17})$$

onde o segundo termo da expressão acima é a definição de potencial escalar magnético (21):

$$\phi_M = \frac{1}{4\pi} \int_{V'} \vec{M}(\vec{r}') \cdot \left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}\right) dV'. \quad (\text{A.18})$$

Reescrevendo (A.17):

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{M}(\vec{r}') - \mu_0 \vec{\nabla} \phi_M. \quad (\text{A.19})$$

Em simulação micromagnética, é vantajoso utilizar um modelo em que conseguimos escrever as cargas volumétricas magnéticas efetivas ρ_M e superficiais σ_M (3) para o cálculo da energia proveniente do campo desmagnetizante. Podemos escrevê-las como sendo:

$$\rho_M = -\vec{\nabla}' \cdot \vec{M}(\vec{r}'), \quad (\text{A.20})$$

$$\sigma_M = \vec{M}(\vec{r}') \cdot \hat{n}. \quad (\text{A.21})$$

Para expressarmos o potencial ϕ_M em termos de ρ_M e σ_M , vamos partir primeiramente da seguinte relação:

$$\vec{M}(\vec{r}') \cdot \frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} = -\vec{M}(\vec{r}') \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) = \vec{M}(\vec{r}') \cdot \vec{\nabla}' \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right), \quad (\text{A.22})$$

e repor no potencial escalar (A.18). Logo

$$\phi_M = \frac{1}{4\pi} \int_{V'} \vec{M}(\vec{r}') \cdot \vec{\nabla}' \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) dV'. \quad (\text{A.23})$$

Novamente, empregamos uma outra propriedade vetorial:

$$\vec{\nabla}' \cdot \frac{\vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \vec{M}(\vec{r}') \cdot \vec{\nabla}' \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) + \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) \vec{\nabla}' \cdot \vec{M}(\vec{r}'), \quad (\text{A.24})$$

em (A.23), e obtemos (21):

$$\phi_M = -\frac{1}{4\pi} \int_{V'} \vec{\nabla}' \cdot \vec{M}(\vec{r}') \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) dV' + \frac{1}{4\pi} \int_{V'} \vec{\nabla}' \cdot \left(\frac{\vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) dV'. \quad (\text{A.25})$$

Utilizando o teorema de Gauss na segunda integral (77):

$$\int_{V'} (\vec{\nabla} \cdot \vec{D}) dV = \oint_{S'} (\vec{D} \cdot \hat{n}) dS', \quad (\text{A.26})$$

reescrevemos (A.25) como:

$$\phi_M = -\frac{1}{4\pi} \int_{V'} \frac{\vec{\nabla}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV' + \frac{1}{4\pi} \oint_{S'} \frac{\vec{M}(\vec{r}') \cdot \hat{n}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS'. \quad (\text{A.27})$$

Percebemos nas integrais de volume e superfície que elas representam a definição das cargas volumétricas e superficiais conforme apresentadas, respectivamente por (A.20) e (A.21). Substituindo essas definições, obtemos:

$$\phi_M = \frac{1}{4\pi} \int_{V'} \frac{\rho_M}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV' + \frac{1}{4\pi} \oint_{S'} \frac{\sigma_M}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS'. \quad (\text{A.28})$$

Temos um potencial em função de ρ_M e σ_M . Lembramos que o campo desmagnetizante é definido por (A.3), e agora podemos escreve-lo como:

$$\vec{H}^{dg} = -\vec{\nabla} \left(\frac{1}{4\pi} \int_{V'} \frac{\rho_M}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV' + \frac{1}{4\pi} \oint_{S'} \frac{\sigma_M}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS' \right). \quad (\text{A.29})$$

A partir do campo definido na expressão acima, calcula-se o campo desmagnetizante em função das cargas magnéticas. A energia magnetostática é definida como sendo (3):

$$U^{dg} = -\frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{M}(\vec{r}) \cdot \vec{H}^{dg} dV, \quad (\text{A.30})$$

onde o fator 1/2 é utilizado para evitar a dupla contagem da interação da magnetização com seu próprio campo. Substituindo \vec{H}^{dg} na energia:

$$U^{dg} = \frac{\mu_0}{2} \int_V \left[\vec{M}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{1}{4\pi} \int_{V'} \frac{\rho_M}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV' + \frac{1}{4\pi} \oint_{S'} \frac{\sigma_M}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS' \right) \right] dV, \quad (\text{A.31})$$

$$U^{dg} = \frac{\mu_0}{2} \int_V \rho_M \phi_M dV + \frac{\mu_0}{2} \oint_S \sigma_M \phi_M dS. \quad (\text{A.32})$$

A equação (A.32) é amplamente utilizada numericamente no micromagnetismo para cálculo da energia magnetostática, onde a sua variação direta em relação a magnetização fornece o campo desmagnetizante médio de uma célula (3). Agora, para mostrar que essa energia também se equivale à energia da interação dipolar, vamos partir da equação (A.31) e substituir as definições de cargas magnéticas volumétricas e superficiais (equações (A.20) e (A.21)), obtendo assim:

$$U^{dg} = \frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \vec{M}(\vec{r}) \cdot \left[\vec{\nabla} \left(\int_{V'} \frac{-\vec{\nabla}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV' + \vec{\nabla} \oint_{S'} \frac{\vec{M}(\vec{r}') \cdot \hat{n}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS' \right) \right] dV. \quad (\text{A.33})$$

Aplicando o teorema de Gauss na integral de superfície e a identidade vetorial (A.24):

$$\oint_{S'} \frac{\vec{M}(\vec{r}') \cdot \hat{n}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS' = \int_{V'} \frac{\vec{\nabla}' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV' + \int_{V'} \vec{M}(\vec{r}') \cdot \vec{\nabla}' \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) dV', \quad (\text{A.34})$$

encontramos:

$$U^{dg} = -\frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V dV \int_{V'} \vec{M}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \left[\vec{M}(\vec{r}') \cdot \vec{\nabla}' \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) \right] dV'. \quad (\text{A.35})$$

Por fim, aplicando a relação

$$\vec{\nabla}' \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) = \frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \quad (\text{A.36})$$

e organizando os termos, definimos que:

$$U^{dg} = -\frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V dV \int_{V'} \vec{M}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \left[\vec{M}(\vec{r}') \cdot \frac{(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \right] dV' \quad (\text{A.37})$$

$$U^{dg} = \frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V dV \int_{V'} \left\{ \frac{\vec{M}(\vec{r}) \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} - 3 \frac{[\vec{M}(\vec{r}) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] [\vec{M}(\vec{r}') \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] }{|\vec{r} - \vec{r}'|^5} \right\} dV' \quad (\text{A.38})$$

Concluindo que a energia magnetostática proveniente do campo desmagnetizante equivale-se a energia da interação dipolar, uma vez que o termo entre chaves é a interpretação da interação dipolar. As referências (3, 32, 33) trazem mais discussões sobre o campo desmagnetizante e suas propriedades.

APÊNDICE B – Conservação do Momento Magnético na Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG)

Como visto no capítulo (3), a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert é uma equação diferencial de evolução temporal não-linear, tanto do ponto de vista físico quanto do matemático, desempenhando um papel fundamental na compreensão da dinâmica dos momentos magnéticos (49). Demonstraremos a seguir como o módulo do vetor momento magnético permanece constante durante a evolução temporal. Para isso, partiremos de sua forma implícita descrita pela equação (3.8):

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\mu_0(\vec{\mu} \times \vec{H}^{ef}) + \frac{\alpha}{|\vec{\mu}|\gamma} \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right). \quad (\text{B.1})$$

Fazendo o produto escalar de $\vec{\mu}$ em ambos os lados e organizando os termos:

$$\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma\mu_0\vec{\mu} \cdot (\vec{\mu} \times \vec{H}^{ef}) + \frac{\alpha}{|\vec{\mu}|} \vec{\mu} \cdot \left(\vec{\mu} \times \frac{d\vec{\mu}}{dt} \right), \quad (\text{B.2})$$

$$\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma\mu_0\vec{\mu} \cdot (\vec{\mu} \times \vec{H}^{ef}) - \frac{\alpha}{|\vec{\mu}|} \vec{\mu} \cdot \left(\frac{d\vec{\mu}}{dt} \times \vec{\mu} \right). \quad (\text{B.3})$$

Utilizando a seguinte identidade vetorial:

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B} \cdot (\vec{C} \times \vec{A}) = \vec{C} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}), \quad (\text{B.4})$$

e aplicando no produto misto em (B.3) temos:

$$\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma\mu_0\vec{H}^{ef} \cdot (\vec{\mu} \times \vec{\mu}) - \frac{\alpha}{|\vec{\mu}|} \left(\frac{d\vec{\mu}}{dt} \cdot (\vec{\mu} \times \vec{\mu}) \right). \quad (\text{B.5})$$

Portanto, chegamos à seguinte conclusão:

$$\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} = 0. \quad (\text{B.6})$$

Isso significa que a taxa de variação do momento magnético $\frac{d\vec{\mu}}{dt}$ é sempre perpendicular a ele mesmo (33, 47). Utilizando a propriedade da diferenciação de um produto escalar dada por

$$\frac{d}{dt} (\vec{A} \cdot \vec{B}) = \frac{d\vec{A}}{dt} \cdot \vec{B} + \vec{A} \cdot \frac{d\vec{B}}{dt}, \quad (\text{B.7})$$

escrevemos $\vec{A} = \vec{B} = \vec{\mu}$ e substituímos na relação acima:

$$\frac{d}{dt} (\vec{\mu} \cdot \vec{\mu}) = \frac{d\vec{\mu}}{dt} \cdot \vec{\mu} + \vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt} \quad (\text{B.8})$$

$$\frac{d|\vec{\mu}|^2}{dt} = 2\vec{\mu} \cdot \frac{d\vec{\mu}}{dt}, \quad (\text{B.9})$$

resultando, por fim, em

$$\frac{d|\vec{\mu}|^2}{dt} = 0. \quad (\text{B.10})$$

Assim, descrevemos que a evolução do momento magnético $|\vec{\mu}|^2$ ocorre mantendo um módulo constante, como demonstrado também em (44, 33, 47). Tal comportamento é crucial, pois indica que a magnitude do momento magnético permanece a mesma ao longo do tempo. Essa propriedade é um fenômeno notável em sistemas magnéticos e está diretamente relacionada à conservação da intensidade do momento magnético, mesmo durante variações temporais.