

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

EVERTON LUIZ MARTINS DA PAIXÃO

**Estudos de Nanoestruturas Magnéticas -
Nanodiscos com Impurezas e Nanofitas - Via
Monte Carlo Metropolis**

Juiz de Fora
Abril de 2013

EVERTON LUIZ MARTINS DA PAIXÃO

**Estudos de Nanoestruturas Magnéticas -
Nanodiscos com Impurezas e Nanofitas - Via
Monte Carlo Metropolis**

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Programa de Pós-graduação em Física,
pela Universidade Federal de Juiz de
Fora, como requisito parcial para ob-
tenção do grau de Mestre.

Orientador: Prof. Dr. Pablo Z. Coura

Juiz de Fora

Abril 2013

Esta dissertação de Mestrado foi analisada e julgada adequada para obtenção de título de Mestre em Física e avaliada em sua forma final pelo orientador e pelos participantes da banca examinadora.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Pablo Z. Coura

Prof. Dr. Jorge Ananias Neto

Prof. Dr. Everton M. C. de Abreu

Agradecimentos.

Primeiramente a Deus, por ter me concedido saúde para chegar até aqui e que continue me proporcionando saltos ainda mais elevados.

Aos meus pais, Paulo Roberto e Maria Lúcia, que sempre me deram todo apoio e conforto nas horas que mais precisei em toda minha vida, se estou aqui é porque vocês me fizeram chegar até aqui.

Ao meu orientador Dr. Pablo Z. Coura, não só pela orientação, mas pela amizade de tantos anos estar trabalhando ao seu lado.

Aos professores Jorge Ananias e Everton Murilo por comporem a banca julgadora.

A minha irmã, por estar sempre ao meu lado, me apoiando.

A minha namorada Ana Carolina pelo carinho, atenção e principalmente pela paciência. Agradeço a Deus por ter feito nossos caminhos serem cruzados.

Ao meu sogro Gabriel e minha sogra Catarina pelo apoio em todas as horas necessitadas, tenho muito a agradecer vocês.

Aos meus amigos do meu período, pessoas divertidas e sempre terei o prazer de conversar, se possível em uma mesa de bar.

Aos meus amigos de república, nunca esquecerei de vocês, por todos momentos juntos, alegrias, tristezas e raiva.

Aos colegas Danilo Toscano, Vanessa e Zé Henrique por todo apoio prestado durante minha pesquisa, pessoas geniais.

Aos meus amigos de laboratório, principalmente Paulo, Jackson e Josiel, que estiveram presentes em praticamente todos momentos acadêmicos e dispostos ajudar um ao outro em suas respectivas pesquisas.

Aos professores Wilson Oliveira, Virgílio, Sidney, Rodrigo, Fernando Sato,

por dividirem suas experiências de vida.

A todos meus amigos de São João Nepomuceno, que sempre me mostraram que a amizade é uma das coisas mais importantes da vida, que nosso companheirismo dure pra todo o sempre.

A todos funcionários da UFJF, principalmente as pessoas do serviços gerais do ICE e ao Domingos (secretário do PPGFísica) pessoas muito competentes.

Ao CNPq, FAPEMIG e UFJF pelo apoio financeiro e equipamentos durante todo esse trabalho.

Resumo

Neste trabalho usamos o método de Monte Carlo Metropolis aplicado em sistemas magnéticos para estudar nanoestruturas como nanodiscos e nanofios de Permalloy. Dividimos em duas partes. Primeiramente, estudou-se o comportamento do núcleo do vórtice rodeado por anéis de impurezas em nanodiscos de permalloy. Variamos o raio e a espessura dos anéis e medimos o limite do campo aplicado para que o núcleo do vórtice passe através destes anéis. Em segundo lugar, temos estudado os estados fundamentais (de menor energia) para nanofios para uma pequena região do espaço de fase. Podemos identificar as configurações de rotação associadas a estes estados.

Palavra Chave: nanodisco, nanofita, Monte Carlo Metropolis, impurezas magnéticas, modelo de Heisenberg.

Abstract

In this work we have used Monte Carlo Metropolis method applied in magnetic systems to study nanostructures like permalloy nanodisks and nanowires. We divided it in two parts. First, we have studied the behavior of the vortex core surrounded by rings of the impurities in permalloy nanodisks. We have varied the radius and the thickness of the rings and we measure the limit of the applied field for that the vortex core passes through the ring. Second, we have studied the ground states (lowest-energy state) for nanowires to a small region of the phase space. We can identify the spin configurations associated to the these states.

keyword: nanodisks, nanowires, Monte Carlo Metropolis, magnetics impurities, Heisenberg model.

Sumário

1	Introdução	7
2	Modelo Teórico	16
2.1	Propriedades dos Materiais Magnéticos	16
2.1.1	Momento Magnético Orbital	16
2.1.2	Magnetização	20
2.1.3	Susceptibilidade Magnética	22
2.2	Modelo de Heisenberg	24
2.2.1	Interação de Troca	25
2.2.2	Interação dipolar	28
2.2.3	Interação Zeeman	30
2.2.4	Campo Efetivo em cada sítio	32
3	Métodos Computacionais	36
3.1	Dinâmica de Spins	36
3.2	Método de Monte Carlo	39
3.2.1	Cadeias Markovianas	40
3.2.2	A Equação Mestra e o Balanço Detalhado	41
3.2.3	Algoritmo de Metropolis	42
3.3	O Limite Clássico	43

3.4	Estimativa do Número Total de Spins num Sistema Real . . .	45
3.5	Simulação Micromagnética	47
4	Estruturas Nanomagnéticas	52
4.1	Nanodisco	52
4.1.1	Nanodiscos Magnéticos com Impurezas Introduzidas . .	57
4.2	Nanofita	61
4.2.1	Domínios Magnéticos	61
4.2.2	Paredes de Domínios	62
4.2.3	Largura de uma Parede de Domínio	64
4.2.4	Parede de Domínio em Nanofitas Macias	65
5	Resultados	68
5.1	Nanodisco com Anéis de Impurezas	68
5.2	Nanofitas	75
6	Conclusão	80
A	Apêndice	82
A.1	Interação Dipolo com Campo Magnético	82
A.2	Cálculo das equações de Movimento	85

Capítulo 1

Introdução

O magnetismo é uma parte da Física que, através de suas aplicações, fascina a todas as pessoas. Qual a criança que não fica maravilhada brincando com ímãs que se atraem ou se repelem dependendo de suas posições relativas? Há um consenso que o magnetismo é conhecido desde o século VII a.C., através de textos gregos que fazem referência às observações de propriedades magnéticas em certos corpos constituídos de um mineral proveniente da região da magnésia, daí o nome magnetismo.

Por dezenas de séculos, o magnetismo permaneceu sem interesse. Somente quando os chineses trouxeram a bússola para a Europa, na época do Renascimento, houve um interesse maior, pois este instrumento exerceu papel importante nas grandes viagens e descobrimentos que se realizaram na época, ver fig.(1.1). O estudo do magnetismo só teve início no século XVI, com Willian Gilbert, publicando os resultados de seu estudo observando o fenômeno do magnetismo. Gilbert foi o primeiro a aplicar métodos científicos no estudo do magnetismo e é creditado como o primeiro descobridor de que a Terra é um grande ímã.

O próximo grande passo para o estudo do magnetismo ocorre em 1785

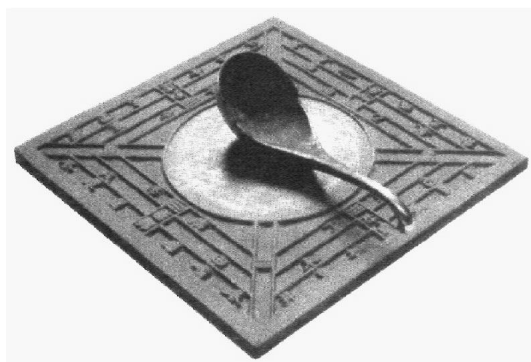


Figura 1.1: *Bússola antiga utilizada pelos chineses*

quando Charles Coulomb publicou a lei dos pólos inversos de atração e repulsão, entre cargas elétricas e pólos magnéticos. Por causa desta contribuição, a origem do conceito de força, sua primeira definição e unidade, são baseadas em forças entre dois pólos. No século XIX, o professor dinamarquês Hans Christian Oersted conseguiu provar experimentalmente, em 1820, quando uma corrente elétrica passava ao longo de um fio aparecia um campo magnético e André-Marie Ampère, na França, entre 1821 e 1825, esclareceu o efeito de uma corrente sobre um ímã e o efeito oposto, de um ímã sobre uma corrente, bem como baseado na descoberta de Oersted, provou que as correntes elétricas se atraem ou se repelem mutuamente, descrevendo também as leis que regem o fenômeno.

A pesquisa em materiais com propriedades magnéticas, começou, pode-se dizer, com a invenção do eletromagneto, em 1825, uma vez que com ele se tornou possível obter campos magnéticos muito mais intensos do que aqueles produzidos por ímãs ou magnetos feitos com eles. Nos anos seguintes, Michael Faraday, na Inglaterra, iniciou suas pesquisas argumentando que se uma corrente num fio produzia efeitos magnéticos, como Ampère tinha demonstrado, o inverso poderia ser verdadeiro, isto é, um efeito magnético

poderia produzir uma corrente elétrica. Para testar essa hipótese, Faraday enrolou duas espiras de fio num anel de ferro, uma ligada a uma bateria e a outra, ligada a um medidor de corrente elétrica, verificando a existência, na segunda espira, de uma corrente temporária quando ligava e desligava a bateria. Noutra experiência, Faraday usou uma espira enrolada em uma haste de ferro e dois ímãs em forma de barra para demonstrar que os ímãs, por si sós, podiam produzir uma corrente. Para explicar como a eletricidade e o magnetismo podiam afetar um ao outro, Faraday propôs a idéia de um campo, imaginando linhas de força magnética tanto mais próximas umas das outras quanto mais intenso era esse campo e supondo que essas linhas tendiam a se encurtar sempre que possível e a se repelir mutuamente. Mais tarde, em 1837, Faraday introduziu também a idéia de linhas de força elétrica.

Joseph Henry e Michael Faraday, independentemente, descobrem a indução eletromagnética. Seus conceitos de converter magnetismo em eletricidade foram utilizados para fazer o primeiro transformador. James Maxwell formulou a estreita relação entre eletricidade e magnetismo baseado nas descobertas de Ampère, Gauss e Faraday, a qual foi publicada em 1873. Estas estreitas relações são conhecidas até hoje como as equações de Maxwell e formam a estrutura do moderno eletromagnetismo.

O final do século XIX e início do século XX, já com o surgimento da mecânica quântica, foram movidos por uma enorme busca por modelos capazes de explicar o magnetismo do ponto de vista corpuscular da matéria. Podemos citar James Erwin, que publica em 1891 um livro com as propriedades conhecidas dos materiais usados em reatores, motores e geradores. Na mesma época Oberlin Smith elabora uma proposta teórica de aplicação de materiais magnéticos em gravação magnética. Em 1905 Paul Langevin explica o diamagnetismo[1]. Em 1907 Pierre Weiss faz o primeiro modelo

(baseado em momentos magnéticos microscópicos) para um material ferromagnético, lançando mão do conceito de campo molecular e paredes de domínios.

Apesar da gama de informações sobre os materiais magnéticos, a natureza dos momentos de dipolo magnéticos ainda era um mistério. Com o surgimento da Mecânica Quântica, ainda no início do século XX, começa a ficar claro que fenômenos magnéticos têm, em última instância, explicação quântica. Pouco depois da descoberta do spin em 1922 (por Otto Stern e Walter Gerlach), Heisenberg, Pauli, Dirac e van Vleck explicam o que acontecia no interior de um material magnético, tornando tal área um dos campos mais importantes de aplicação da Mecânica Quântica.

Dos anos 30 para cá, sem dúvida cresceu o número de aplicações tecnológicas usando-se materiais magnéticos, como a fabricação de transistores, a tecnologia da informação, geradores, motores mais potentes, etc. Concretamente, uma das mais promissoras é a gravação magnética em filmes magnéticos. Essa tecnologia é essencial no funcionamento de gravadores de som e vídeo, além de diversos equipamentos acionados por cartões magnéticos, sendo imprescindível na confecção de discos rígidos utilizados em computadores. Não menos importante, são os circuitos integrados, ou chips, presentes em quase todos os circuitos eletrônicos. Tanto a densidade de circuitos eletrônicos nos chips quanto a densidade de gravação magnética nos discos rígidos vêm aumentando muito nos recentes anos. Além dessas aplicações, o magnetismo está presente em outras áreas, como na geologia (onde o alinhamento de momentos magnéticos sob a influência do campo magnético da Terra permite informar a evolução da Terra e a datação de rochas[2]), até o transporte de drogas que podem ser direcionadas a órgãos ou tecidos específicos [3], além do uso de nanopartículas magnéticas em métodos

terapêuticos e diagnósticos[4]. Especificamente, como mostrado recentemente na ref.[5], microdiscos magnéticos (MDs) apresentando configuração magnética do tipo-vórtice (a qual abordaremos mais tarde em nosso trabalho) e biofuncionalizados com um determinado anti-corpo, capazes de “ligarem-se” seletivamente a células cancerígenas, ocasionando, por meio de um campo magnético oscilatório, a morte in vitro de, aproximadamente, 90% das células. Recentemente muita esperança é colocada em cima de drogas criadas a partir de estudos em nanotecnologia para a cura do câncer.

Aplicações no âmbito nanométrico requerem alto grau de sofisticação em técnicas experimentais. A evolução tecnológica dessas aplicações foi possível devido ao aperfeiçoamento das técnicas de preparação de amostras em escalas nanométricas, bem como de técnicas de imagem em alta resolução. No entanto, durante as duas últimas décadas, a pesquisa em materiais magnéticos sofreu um grande impulso devido às descobertas feitas em estruturas artificiais de filmes finos [6][4].

Quando produzidas artificialmente, as nanoestruturas podem ser modeladas em diversas formas geométricas, como “*nanodots*” : circulares, triangulares, elípticos, etc; “*nanowires*”: retangulares, cilíndricos; “*nanorings*” : cilíndricos, toroidais; “*nanotubos*”, “*nanofitas*”, etc. Algumas formas estão na fig.(1.2). Na fabricação destes materiais, as técnicas mais utilizadas são a litografia por feixes de elétrons (EBL, *Electron Beam Lithography*) [8][12], litografia por interferência (IL, *Interference Lithography*) [13], que é a técnica escolhida quando pretende-se modelar grandes áreas, por requerer um tempo menor que a primeira, além de outras como nanolitografia de raio-X (*X-ray lithography*) e litografia por impressão (*imprint nanolithography*) [13].

A caracterização das amostras é feita por diversas técnicas, dependendo de suas funcionalidades. Dentre elas podemos citar a microscopia eletrônica

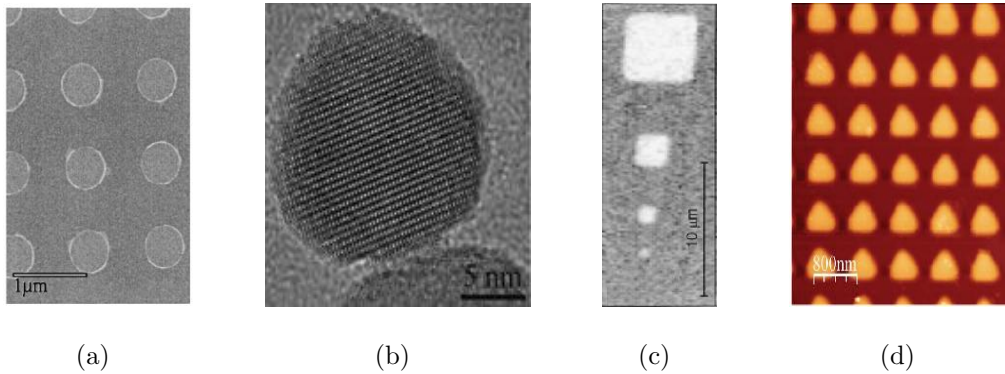


Figura 1.2: *Formatos das nano-partículas. Em (a) de base circular chamados de nano-cilindros ou nanodiscos. Em (b) uma nanoesfera. Em (c) temos uma nanopartícula de base quadrada. Quando a altura é igual ao lado do quadrado temos um nanocubo. Finalmente em (d) mostramos uma nanopartícula de base triangular. figura retirada da ref.[7]*

de transmissão de Lorentz (LTEM) [11], magnetometria Hall (*Hall magnetometry*) [9], microscópio de força magnética (MFM, *magnetic force microscopy*) [9][14], que são técnicas utilizadas para monitorar, dentre outras propriedades, a reversão de magnetização, por exemplo em Permalloy, liga esta utilizada em nossos estudos; o microscópio eletrônico de transmissão (TEM, *transmission electron microscopy*) pode ser usado para mostrar a microestrutura da amostra depositada ao passo que o microscópio eletrônico de varredura (SEM, *scanning electron microscopy*) pode ser usado para checar o tamanho e forma dos nanomagnetos fabricados[10]; curvas de histerese em amostras de pequena área superficial podem, por exemplo, ser medidas pelo dispositivo supercondutor de interferência quântica (SQUID, *superconducting quantum interference device*); temos também o microscópio de resolução temporal Kerr (TRKM, *time-resolved Kerr microscopy*), que pode ser usado para se estudar a dinâmica da magnetização em nanodiscos magnéticos[15]; por fim, podemos citar o microscópio magnético de transmissão de raios-X (MTXM, *magnetic transmission X-ray microscopy*) e o microscópio de fotoemissão de elétrons (PEEM, *photoemission electron microscopy*) utili-

zados, dentre outras coisas, para estudar os detalhes da dinâmica da configuração magnética dos nanomagnetos quando submetidos a pulsos de campos magnéticos externos[16].

A possibilidade de fabricação de nanoestruturas magnéticas de diversas formas e tamanhos levou ao surgimento de novas áreas de pesquisa em magnetismo, estimuladas pela descoberta de novos fenômenos. Dentre eles, podemos destacar a descoberta da magnetoresistência gigante (GMR, *giant magnetoresistance*), no fim dos anos 80. GMR é um fenômeno associado a microestruturas magnéticas compostas de multicamadas, que têm sua resistência elétrica aumentada devido a presença de um campo magnético externo. Já há algum tempo que a área de aplicações em nanomagnetismo está associada com as necessidades da indústria de gravação magnética. Para se ter uma ideia, em 1997, poucos anos depois de sua descoberta, a IBM já lançava no mercado o primeiro disco rígido com cabeça de leitura de dados baseada no efeito GMR. E a busca por mídias de altíssimas densidades continua em desenvolvimento: no fim do ano 2000, produtos comerciais tinham uma densidade de informação armazenada de 20 Gbits/pol² (gigabits por polegadas²)[17]; em 2006 tal capacidade era de quase 100 Gbits/pol² [18]. Tal fenômeno tem sido, então, coroado como um grande achado da nanotecnologia e representa um papel central na direção e foco do magnetismo de superfícies, que uniu as fronteiras entre o magnetismo puro e aplicado.

Dispositivos em nanoescala estão se tornando rapidamente o laboratório predileto de pesquisadores, motivando através de simulações, a procura por nanoestruturas como filmes finos, fitas e pontos (*dots*). Dessa perspectiva, o nanomagnetismo segue os caminhos deixados pela revolução na miniaturização causada pelos semicondutores. A eletrônica de semicondutores, entretanto, utiliza apenas a carga do elétron, mas o elétron também possui spin.

Neste contexto, e levada pela descoberta da GMR, vislumbrou-se, também, a possibilidade de controlar essa outra propriedade eletrônica, o spin. Há, sem dúvidas, esforços no desenvolvimento da chamada magnetoeletrônica, ou spintrônica (*spintronic*), onde uma série de ideias e protótipos utilizam as propriedades de interferências entre correntes elétricas com elétrons com um único estado de spin, que atualmente podem ser bem controladas[19]. Como exemplos, podemos citar: o transistor de spin, proposto em 1990 e ainda em desenvolvimento, que leva vantagem sobre o transistor tradicional de semicondutor pelo fato de os estados de spin serem detectados e alterados sem a aplicação de uma corrente elétrica[20]; a busca por materiais quase 100% spin-polarizado para criar circuitos onde o fluxo de spins tomem lugar - ou, talvez, colaborem - com o fluxo de cargas; e, possivelmente, a maior aplicação seja a memória magnética de acesso aleatório (MRAM, *magnetic random access memory*), a qual tem atraído grande atenção tanto de fabricantes quanto de pesquisadores por ser não-volátil, o que a diferencia das convencionais memórias voláteis RAM (*random access memory*) que são feitas à base de semicondutores (ambas são memórias de leitura e escrita). O fato de ser não-volátil talvez seja o que mais estimule a pesquisa e o desenvolvimento das MRAM's, pois podem futuramente tornar realidade o advento do computador de inicialização instantânea (*instant boot-up*), em detrimento da memória RAM, que perde a informação armazenada quando a corrente elétrica necessária ao seu periódico “*refresh*” é desligada e, portanto, também economizando energia. Embora desde a década de 90 já se falava em MRAM [21][23], os primeiros chips disponíveis apareceram apenas em 2006, produzidos pela Freescale e, apesar de tão interessantes e vantajosas, esbarram no alto custo.

A organização desta tese é a seguinte, no capítulo 2 trataremos sobre o

modelo teórico, onde discutiremos as propriedades dos materiais magnéticos, como se dá o momento magnético orbital, a susceptibilidade magnética e a magnetização no material. Neste mesmo capítulo também será apresentado o modelo de Heisenberg.

No capítulo 3 falaremos sobre os métodos computacionais. Será apresentado o modelo computacional utilizado, o modelo Monte Carlo com algoritmo de Metropolis. Faremos também uma estimativa do número total de spins num sistema real e veremos que por se tratar de um número muito excessivo, iremos recorrer ao fato da simulação micromagnética.

No capítulo 4 será discutido um pouco sobre as estruturas nanomagnéticas de nosso interesse, nanodiscos e nanofitas, com suas propriedades. No capítulo 5 discutiremos os resultados obtidos. No sexto e último capítulo apresentaremos as nossas conclusões.

Capítulo 2

Modelo Teórico

Neste capítulo, vamos resumir alguns conceitos básicos do magnetismo. Veremos que as propriedades dos materiais magnéticos são, a princípio, completamente especificadas pela Mecânica Quântica. Será apresentada uma pequena caracterização dos diferentes tipos de magnetismo. Em seguida, mostraremos o modelo de Heisenberg com seus respectivos termos de troca, Dipolar e Zeeman.

2.1 Propriedades dos Materiais Magnéticos

2.1.1 Momento Magnético Orbital

Na verdade, as experiências não medem diretamente o valor do momento angular \vec{L} do elétron no átomo, mas sim uma grandeza a ele associada, denominada de momento de dipolo magnético orbital \vec{m}_L , resultante de uma interação magnética no átomo. Devido a essa interação, verifica-se que os elétrons têm um momento angular intrínscio denominado “spin”. Utiliza-se uma combinação de eletromagnetismo elementar, modelo de Bohr e mecânica quântica. Os elétrons giram ao redor do núcleo em orbitais, o que é o mesmo

se tivéssemos espiras de corrente. Por outro lado, correntes produzem campo magnético.

Considere-se então um elétron de massa m e carga $-e$, movendo-se com velocidade v numa órbita de Bohr circular de raio r . A carga circulante na órbita de Bohr gera uma corrente elétrica I , dada por

$$I = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r}, \quad (2.1)$$

onde T é o período da órbita e $v = 2\pi r/T$. Da teoria eletromagnética, essa corrente circulante produz um campo magnético, \vec{B} , equivalente a grandes distâncias, a um campo gerado por um dipolo magnético localizado no centro orbital e orientado perpendicularmente ao plano da circunferência.

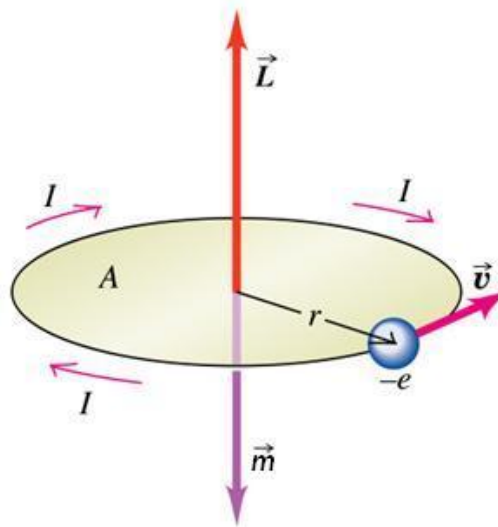


Figura 2.1: Momento angular \vec{L} e momento de dipolo magnético \vec{m} do elétron na órbita de Bohr.

Figura retirada da ref.[22]

Se a órbita circular tem área $A = \pi r^2$, o módulo do momento de dipolo magnético orbital, m_L , será dado por

$$m_L = IA = I\pi r^2 \quad (2.2)$$

e a direção é perpendicular ao plano da órbita. Como o elétron tem uma carga negativa, seu momento de dipolo magnético é antiparalelo a seu momento angular orbital $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, cujo módulo é

$$L = rp = mvr \quad (2.3)$$

e cuja direção está indicada na Fig.(2.1). Relacionando-se as equações (2.1), (2.2) e (2.3), obtém-se

$$m_L = I\pi r^2 = \frac{ev}{2\pi r}\pi r^2 = \frac{e}{2m}mvr = \frac{e}{2m}L \quad (2.4)$$

ou, em termos vetoriais,

$$\vec{m}_L = -\frac{e}{2m}\vec{L}. \quad (2.5)$$

A proporcionalidade entre \vec{m} e \vec{L} é uma propriedade geral das cargas em rotação. O importante é que o momento magnético é proporcional ao momento angular. Nesse caso, porque a carga foi tomada como negativa, os dois vetores se opõem. Se tomássemos uma carga positiva, ambos os vetores teriam o mesmo sentido.

Podemos determinar m_L utilizando a equação do momento angular quântico

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad (2.6)$$

onde l é o número quântico azimutal de momento angular que pode ter como valores possíveis os números inteiros de 0 a $(n-1)$ e \hbar é a constante de Planck normalizada.

A partir disso, conclui-se que a expressão quântica para (2.4), pode ser escrita como

$$\begin{aligned} m_L &= \frac{e}{2m}\sqrt{l(l+1)}\hbar = \frac{\mu_B}{\hbar}\sqrt{l(l+1)}\hbar = \mu_B\sqrt{l(l+1)} \\ m_L &= \frac{\mu_B}{\hbar}L, \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,27 \cdot 10^{-24} [A \cdot m^2 = J \cdot T^{-1}]$ é denominado magneton de Bohr. Até agora consideramos apenas o movimento orbital do elétron.

Vamos inserir outro tipo de momento angular. Sabendo que

$$S = m_s \hbar, \quad (2.8)$$

onde S é chamado momento angular de *spin* e m_s é o número quântico de spin.

Logo a eq.(2.5) pode ser reescrita como

$$\vec{m}_L = -\frac{e}{2m} \vec{J}. \quad (2.9)$$

Neste caso \vec{J} é a soma dos momentos angulares ($\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$). Na fig.(2.2) observamos que em geral a direção \vec{J} é diferente da direção de \vec{L} ou \vec{S} , onde \vec{J} depende da combinação de \vec{L} e \vec{S} .

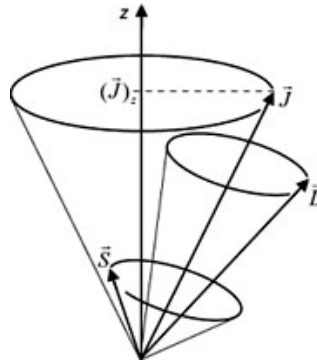


Figura 2.2: Interação spin-órbita entre os momentos angulares \vec{L} e \vec{S} , gerando o momento angular total \vec{J} .

A forma geral da eq.(2.9) é dada por

$$\vec{m}_L = g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{J} = \gamma \vec{J}, \quad (2.10)$$

onde g (adimensional) é denominado fator de Landé e é definido pela regra de Hund[24] e $\gamma = g \frac{\mu_B}{\hbar}$ é definido como razão giromagnética

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (2.11)$$

onde os números L , S , J são obtidos aplicando-se as regras de Hund.

Se o momento angular total de um átomo é nulo, o átomo é classificado como *diamagnético*, (Cu,Ag,Au). Por outro lado, se o momento angular total atômico for diferente de zero, o átomo pode ser *paramagnético*, (Al,Pt,O) ou *ferromagnético*, (Fe,Ni,Co). Portanto, materiais magnéticos são formados por átomos que possuem momento magnético resultante, ou seja, átomos com camadas eletrônicas incompletas. Por exemplo, elementos de metais de transição, tais como Fe, Ni, Co, etc, apresentam elétrons desemparelhados, porém, camadas incompletas em átomos isolados não garantem a existência de momentos magnéticos em cristais.

2.1.2 Magnetização

Em um sistema composto por um número n de átomos, teremos então que \vec{m}_i seja o momento magnético do átomo de índice i . A magnetização \vec{M} é uma quantidade vetorial macroscópica e que podemos definir como soma de todos os momentos magnéticos num pequeno elemento de volume Δv . Por isso, dividiremos a soma de todos \vec{m}_i por Δv , a quantidade resultante,

$$\vec{M} = \lim_{\Delta v \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta v} \sum_{i=1}^n \vec{m}_i \quad (2.12)$$

é denominada momento de dipolo magnético por unidade de volume, ou Magnetização. Quando um material não está submetido a um campo magnético externo, o somatório dos momentos de dipolo resultantes dos átomos é nulo. Isto ocorre devido à orientação randômica dos momentos magnéticos dos átomos. Entretanto a presença de um campo magnético externo perturba o

movimento eletrônico, produzindo uma polarização magnética total ou magnetização do material. Podemos chegar à relação entre densidade de corrente magnética e magnetização, \vec{j}_m e \vec{M} respectivamente (mais detalhes no apêndice A.1), dada por

$$\vec{j}_m = \nabla \times \vec{M}. \quad (2.13)$$

Como dito anteriormente, quando um campo magnético externo está desligado, a orientação dos dipolos intrínsecos é completamente aleatória por causa da agitação térmica. Quando ligamos o campo magnético externo \vec{B}^{ext} , os dipolos tendem a se orientar de uma forma que minimiza a energia de interação, que é dada pela energia potencial magnética do dipolo (U)

$$U = -\vec{m}_i \cdot \vec{B}^{ext}, \quad (2.14)$$

sendo \vec{m}_i o vetor momento magnético. Assim, vemos que, para minimizar a energia de interação, os momentos magnéticos devem ficar paralelos ao campo externo, ver fig.(2.3).

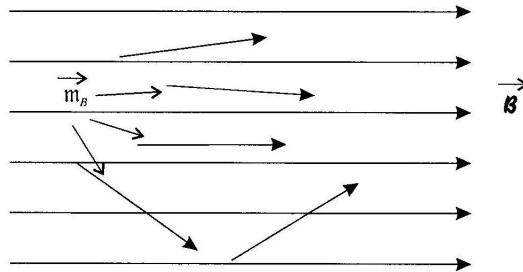


Figura 2.3: Spins orientados na direção do campo magnético externo. Figura retirada da referência [25]

Logo, o campo magnético dentro da amostra de material magnético é maior do que o campo externo. A esse fenômeno chamamos de *Paramagnetismo*. No *Diamagnetismo* ocorre o contrário, onde o campo da amostra é menor.

Na eletrodinâmica definimos um campo auxiliar \vec{H} para obter uma nova equação com a mesma estrutura da equação de Maxwell, dada por

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0}(\vec{B} - \mu_0\vec{M}), \quad (2.15)$$

onde $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}[N/A^2]$ é a permeabilidade magnética do vácuo.

Reescrevendo o campo magnético induzido no material em termo de \vec{H} e \vec{M} , temos

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}), \quad (2.16)$$

sendo \vec{B} o vetor indução magnética. Desta relação, vemos que a unidade de \vec{H} é a mesma de \vec{M} , ou seja $[A/m]$. Assim, a unidade de \vec{B} é o Tesla $[N/Am] = [T]$.

2.1.3 Susceptibilidade Magnética

Para alguns materiais é possível escrever a seguinte relação linear

$$\vec{M} = \chi\vec{H}, \quad (2.17)$$

onde χ é a susceptibilidade magnética. Substituindo (2.17) em (2.16) obtêm-se

$$\vec{B} = \mu\vec{H}, \quad (2.18)$$

onde $\mu = \mu_0(1 + \chi)$ é a permeabilidade magnética do meio. As relações (2.17) e (2.18) são válidas somente se o meio magnético for linear e isotrópico (onde as propriedades físicas são as mesmas, independentemente da direção considerada). Se o meio for linear mas anisotrópico, as constantes de proporcionalidade devem ser substituídas por suas equivalentes tensoriais. Note que μ é a resposta da indução magnética enquanto que χ é a resposta da magnetização a uma perturbação externa.

Tradicionalmente, materiais magnéticos são classificados de acordo com sua resposta à aplicação de campo magnéticos. Tal resposta pode ser quantificada de acordo com a origem microscópica de sua magnetização e de suas interações internas. *Diamagnetismo* em geral corresponde ao tipo mais fraco de resposta magnética de um sistema, caracterizado por um valor pequeno e negativo de χ , de modo que seu efeito é diminuir o módulo do campo no interior do material. Todos os materiais apresentam estes comportamentos, mas ele só é observado quando não existem outros tipos de comportamento superpostos. Os átomos de materiais diamagnéticos possuem momento angular nulo $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = 0$, ou seja, não apresentam momento magnético intrínseco, os momentos magnéticos são induzidos pelo campo magnético externo, sendo \vec{L} e \vec{S} os momentos angulares orbital e de spin, respectivamente. *Paramagnetismo* pode ocorrer em materiais cujos átomos possuem elétrons desemparelhados. Os momentos magnéticos intrínsecos dos elétrons se orientam na direção e sentido do campo externo aplicado. Dessa forma, o estado paramagnético é caracterizado por um valor pequeno e positivo de χ , e que varia com a temperatura.

Em ambos os casos, diamagnetismo e paramagnetismo, a susceptibilidade é em geral muito pequena $|\chi| \ll 1$ e, na ausência de campo magnético externo a magnetização é nula. Entretanto, alguns materiais apresentam “magnetização espontânea” abaixo de uma certa temperatura, ou seja, sua magnetização não aparece como resultado da aplicação de um campo externo. Estes materiais são chamados de ferromagnéticos que, sob a influência de um campo magnético externo, respondem da mesma maneira que os paramagnéticos, porém de forma mais eficiente, isto é, $\chi \gg 1$. Em geral, a susceptibilidade é uma função complicada do campo, da temperatura e da forma como a amostra foi preparada. *Ferromagnetismo* é observado em

sólidos quando os momentos magnéticos de muitos átomos se alinham paralelamente. Qualquer material ferromagnético torna-se paramagnético a uma temperatura suficientemente elevada. Essa temperatura crítica na qual ocorre transição de fase magnética é denominada temperatura de Curie T_C , e está na faixa de 100-1000[K] para metais de transição e compostos de terras raras.

2.2 Modelo de Heisenberg

O modelo de Heisenberg presume a existência de momentos magnéticos localizados, isto é, os elétrons responsáveis pelo magnetismo não são os elétrons de condução. Os momentos permanecem fixos nos sítios de uma rede e interagem através da interação de troca direta ou indireta. No magnetismo de banda, ou magnetismo itinerante os mesmos elétrons são responsáveis tanto pela condução quanto pelo magnetismo. Nesse caso, deve-se usar o modelo de Hubbard, que leva em conta também a contribuição da energia cinética dos elétrons. O modelo de Heisenberg fornece uma ótima aproximação para materiais magnéticos isolantes. Exemplos para ferromagnetos são $CrBr_3$, K_2CuF_4 , EuO , EuS , Rb_2CrCl_4 e $CdCr_2$. Antiferromagnéticos são $EuTe$, MnO , $RbMnCl_4$ e $RbMnF_3$ e o exemplo para um material ferrimagnético é $EuSe$ (informações obtidas da ref.[26]). Para metais com magnetismo de banda, sob certas considerações, pode-se mostrar que o modelo de Hubbard é equivalente ao modelo de Heisenberg para temperaturas inferiores à temperatura de transição de fase.

2.2.1 Interação de Troca

O ordenamento magnético dos momentos magnéticos ocorre devido à interação de troca ou *exchange*, que segue do princípio de exclusão de Pauli e da repulsão coulombiana entre elétrons. Uma ótima discussão de que essa interação é do tipo $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ pode ser encontrada na ref.[27]. Para um sistema constituído por muitos spins, o operador hamiltoniano da interação de troca é escrito como

$$H_{exc} = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -\frac{1}{\gamma^2 \hbar^2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j, \quad (2.19)$$

onde \vec{S}_i é o operador de spin do íon localizado no sítio i , \vec{S}_j é o operador de spin do íon localizado no sítio j , sítio esse que representa os primeiros vizinhos dos spins localizados no sítio i , ver fig.(2.4) ambos possuem dimensão de momento angular, ou seja, \hbar . A constante de acoplamento J_{ij} possui dimensão de energia e é denominada integral de troca e está relacionada com as integrais de “overlap” da função de onda espacial. No entanto essas integrais decaem rapidamente com a distância entre os sítios, de forma que a contribuição significativa provêm das interações entre primeiros e segundos vizinhos. Portanto, trata-se de uma interação de curto alcance.

Uma boa aproximação é obtida ao considerar,

$$J_{ij} = J_{ji} = \begin{cases} J, & \text{se } i,j \text{ são primeiros vizinhos} \\ 0, & \text{para demais casos} \end{cases}$$

com isso, a equação (2.19), que representa a interação de troca pode ser escrita da seguinte forma

$$H_{exc} = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.20)$$

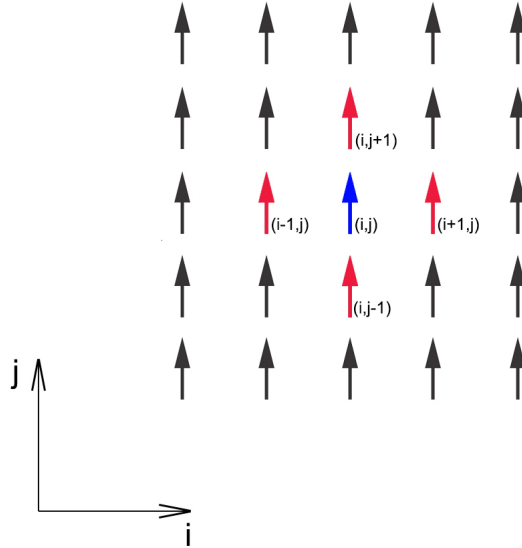


Figura 2.4: Representação de um sistema ferromagnético. As setas vermelhas indicam os momentos de primeiros vizinhos que interagem com o momento representado pela seta azul.

onde dividimos por 2 para que se evite contar duas vezes a mesma interação e os índices i e j indicam que o somatório é feito sobre os spins vizinhos mais próximos. $J < 0$ na equação acima representa o acoplamento antiferromagnético, uma vez que a energia do sistema torna-se mínima quando os spins se alinham antiparalelamente ($\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -1$). Através do mesmo raciocínio, notamos que ($J > 0$) refere-se ao acoplamento ferromagnético, no qual a configuração de menor energia ocorre quando os spins se alinham paralelamente ($\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = +1$). A equação (2.20) em conjunto com o vínculo não linear

$$S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 \quad (2.21)$$

é conhecido na literatura como **modelo de Heisenberg isotrópico**. Ele explica o alinhamento dos spins, mas não especifica uma direção em particular.

Quando um sistema apresenta diferentes propriedades físicas dependentes da direção em que elas são estudadas, dizemos que o sistema apresenta anisotropia. Uma das principais características da anisotropia magnética é a orientação preferencial da magnetização espontânea do material. Isso ocorre porque tal orientação corresponde a um mínimo local da energia do sistema. Em geral, essa orientação é estável, mas a magnetização pode ser retirada deste estado através da aplicação de um campo externo.

Existem vários tipos de anisotropia magnética. A única anisotropia intrínseca de um material é a anisotropia cristalina ou magnetocristalina. Trata-se de uma orientação preferencial da magnetização em relação aos eixos ou planos do cristal.

Podemos definir um hamiltoniano mais genérico, que leve em conta a existência de uma direção fácil ou difícil para os spins apontarem, adicionando um termo na eq.(2.20), ou seja,

$$H_{exc} = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{i,j} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \lambda S_i^z S_j^z) \quad (2.22)$$

sendo que λ é conhecido como parâmetro de anisotropia. Esse hamiltoniano é conhecido como **modelo de Heisenberg anisotrópico**. Dessa forma, para um ferromagneto, se $\lambda = 0$, recuperamos o modelo de Heisenberg isotrópico. Para $0 < \lambda < 1$, temos o modelo de Heisenberg de plano fácil, que é caracterizado pela preferência dos spins se alinharem paralelamente a um plano, que nesse caso é o plano-xy. Para $\lambda = 1$, temos o caso limite para uma anisotropia fortemente planar, aqui distingue-se dois modelos, o modelo XY e do modelo do rotor planar, basta considerar spins com três ou duas componentes, respectivamente. Por outro lado, se $\lambda < 0$, temos o modelo Heisenberg de eixo-fácil, caracterizado pela preferência dos spins se alinharem perpendicularmente a um plano, o eixo-fácil neste caso é o eixo-z. Amostras com este tipo de anisotropia são conhecidos como materiais magnéticos duros.

Materiais magnéticos moles são aqueles que apresentam anisotropia magnetocristalina muito pequena.

A anisotropia de forma, está relacionado à forma geométrica do material e manifesta-se em amostras finitas, devido ao campo desmagnetizante que surge dentro do material, gerando pólos nas superfícies. Um acoplamento anisotrópico deste tipo é conseguido levando-se em conta as interações dipolo-dipolo.

Além das anisotropias magnetocristalina e de forma existem outras. É possível que um sistema físico apresente mais de um tipo de anisotropia. Tal sistema apresenta uma competição de anisotropias e a expressão da energia de anisotropia efetiva será a soma da energia de anisotropia de cada parcela.

2.2.2 Interação dipolar

A interação dipolar magnética básica é uma interação de origem clássica e é regida pela equação:

$$H_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi r_{12}^3} \left[\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2 - \frac{3}{r_{12}^2} (\vec{m}_1 \cdot \vec{r}_{12})(\vec{m}_2 \cdot \vec{r}_{12}) \right] \quad (2.23)$$

onde \vec{m}_1 e \vec{m}_2 representam o dipolo magnético da partícula 1, 2 respectivamente e r_{12} é a distância entre os dipolos magnéticos, ver Fig.(2.5).

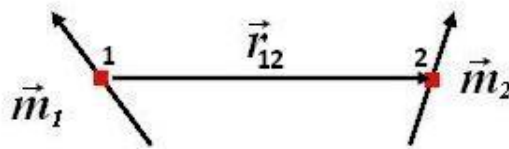


Figura 2.5: Interação dipolar entre os átomos 1 e 2. Figura retirada ref.[22].

Agora vamos generalizar a equação da interação dipolar para qualquer

dipolo do sistema, onde i indica a posição r_i do dipolo na rede. Temos então

$$H_i^{dip} = \sum_j^{N-1} \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right]. \quad (2.24)$$

O somatório vai até (N-1), porque não contamos a interação de uma partícula com ela mesma. A energia devida a interação dipolar no sistema é a soma de todas H_i^{dip} para cada partícula no sítio i , logo

$$H^{dip} = \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^{N-1} \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right]. \quad (2.25)$$

Para resolver o problema de dupla contagem, vamos incluir um fator 1/2 na eq.(2.25), logo

$$H^{dip} = \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right] \quad (2.26)$$

ou

$$H^{dip} = \frac{\mu_0}{8\pi} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right]. \quad (2.27)$$

Sabemos que todas as distâncias relativas entre sítios podem ser escritas em termos do parâmetro de rede a_0 . Assim, reescreve-se a eq.(2.27) como

$$\begin{aligned} H^{dip} &= \frac{\mu_0}{8\pi} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right] \cdot \frac{a_0^3}{a_0^3} \\ &= \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{a_0^3}{r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right]. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Lembrando da definição de versor, onde

$$\hat{r}_{ij} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}. \quad (2.29)$$

Podemos escrever a eq.(2.28) da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
H^{dip} &= \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{a_0^3}{r_{ij}^3} [\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})] \\
&= \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right]. \quad (2.30)
\end{aligned}$$

O primeiro termo da dipolar tende alinhar todos os spins antiparalelos uns aos outros, por causa da existência do produto escalar entre os momentos magnéticos. Enquanto que o segundo termo da dipolar tende alinhar todos os momentos magnéticos na direção que os unem. Percebemos que o segundo termo é o responsável pela minimização da energia dipolar. Com isso, os momentos magnéticos tenderão a ficar paralelos às bordas do nanomagnet. Essa interação é de longo alcance, porque depende da distância relativa entre momentos e do somatório que é realizado sobre todos os momentos magnéticos do nanomagnet. Observa-se um decaimento da interação com o inverso do cubo da distância entre os sítios.

O termo da interação dipolar é o responsável pela configuração dos momentos magnéticos na borda, por exemplo, do nanodisco. Esse termo é conhecido como anisotropia de forma.

2.2.3 Interação Zeeman

A interação do momento magnético com o campo magnético externo é conhecido como interação Zeeman. O hamiltoniano Zeeman, representa o acoplamento do momento magnético com o campo magnético externo, \vec{B}^{ext} .

Esse hamiltoniano é dado simplesmente por:

$$H^{Zee} = - \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{B}^{ext} = - \sum_{i=1}^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}^{ext}, \quad (2.31)$$

onde $\vec{m} = \gamma \vec{S}$, onde relacionamos a equação (2.10) apenas com momento de spin.

É através desse hamiltoniano que os momentos da rede poderão se alinhar na mesma direção do campo externo aplicado. A configuração de mínimo de energia ocorre quando o momento \vec{m} e o campo \vec{B}^{ext} estão paralelos e o máximo de energia quando estão anti-paralelos. Uma analogia pode ajudar a entender como isso ocorre. Um material (bandeira) preso em uma haste. Quando um fluxo de ar atinge-a, ela gira de modo a se alinhar com o fluxo,

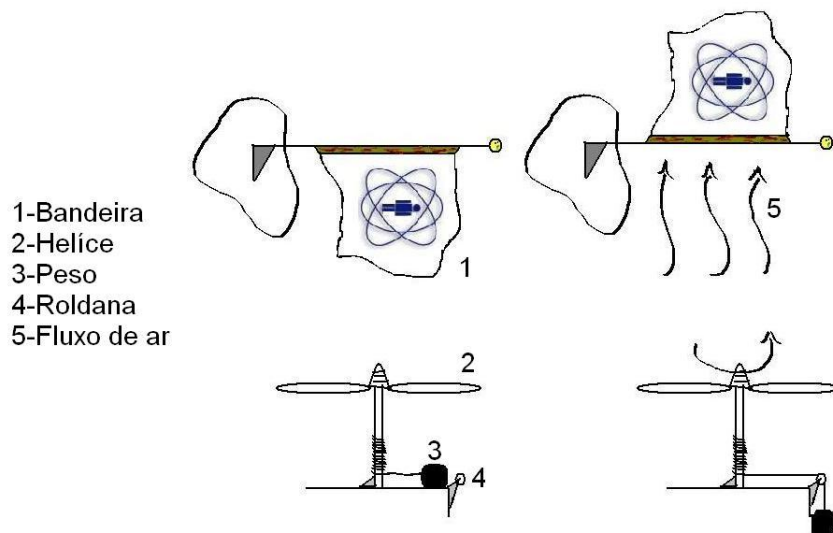


Figura 2.6: *Figura exemplificando o alinhamento do dipolo magnético. Figura retirada ref.[28]*

ver fig.(2.6). Quando o fluxo de ar é retirado a bandeira volta para seu estado inicial de menor energia. O mesmo acontece quando um campo magnético é retirado. O dipolo magnético perderá a energia associada à sua torção.

2.2.4 Campo Efetivo em cada sítio

As possíveis configurações surgem devido à competição entre as energias de troca e magnetostática [29]. Os momentos magnéticos tendem a se alinhar paralelamente a um campo externo para minimizar a energia do sistema. Em materiais na escala nano percebe-se um ordenamento magnético. Para explicar esse ordenamento surge o conceito de campo efetivo, que é o responsável pelo alinhamento desses momentos magnéticos. O campo efetivo é resultado da interação com todos os momentos magnéticos do nanodisco. O mesmo depende da posição de cada sítio da rede, ou seja, o vetor campo efetivo, \vec{B}^{eff} , que atua no sítio i no centro do disco não é o mesmo que atua na borda do disco.

Para encontrarmos esse campo efetivo, consideremos duas interações que são: interação de troca e interação dipolar. Assim o campo efetivo será uma combinação do campo gerado pela interação de troca e o campo gerado pela dipolar

$$\vec{B}^{eff} = \vec{B}^{exc} + \vec{B}^{dip}, \quad (2.32)$$

onde \vec{B}^{eff} é o campo efetivo, \vec{B}^{dip} é o campo da interação dipolar e \vec{B}^{exc} é o campo da interação de troca (*exchange*).

Para compreendermos melhor essa interação, vamos tomar como base a interação Zeeman. Observando a eq.(2.31), podemos fazer um modelo análogo para o \vec{B}^{dip} e \vec{B}^{exc} , onde teríamos uma outra forma de expressar o hamiltoniano da dipolar e o hamiltoniano de troca, que seriam dadas pelas seguintes equações:

$$H^{dip} = - \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{B}_i^{dip} = - \sum_{i=1}^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{dip} \quad (2.33)$$

e

$$H^{exc} = - \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{B}_i^{exc} = - \sum_{i=1}^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{exc} \quad (2.34)$$

Para encontrar o campo \vec{B}_i^{exc} , vamos reescrever a eq.(2.19), porém já com o fator 2 inserido,

$$\begin{aligned} H^{exc} &= -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -\frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{J_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -\frac{1}{2} \sum_i^N \vec{S}_i \cdot \left(\sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{J_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_j \right) \\ &= -\frac{1}{2} \sum_i^N \vec{S}_i \cdot \left(\sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{J_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_j \right) \frac{\gamma}{\gamma} = -\frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \left(\sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j \right) \\ &= -\frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{exc}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

sendo

$$\vec{B}_i^{exc} = \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j \quad (2.36)$$

Fazendo o mesmo para o campo B_i^{dip} , vamos reescrever a equação (2.30)

da seguinte forma,

$$\begin{aligned}
H^{dip} &= \frac{\mu_0 \gamma^2}{8\pi a_0^3} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \\
&= \gamma \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{8\pi a_0^3} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \\
&= -\gamma \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{8\pi a_0^3} \left[\frac{3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \\
&= -\frac{\gamma}{2} \sum_i^N \vec{S}_i \cdot \left(\sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \right) \\
&= -\frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{dip}, \tag{2.37}
\end{aligned}$$

onde

$$\vec{B}_i^{dip} = \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right]. \tag{2.38}$$

Como foi mostrado anteriormente, o campo efetivo é uma combinação do campo de troca com o campo dipolar, substituindo as equações (2.36) e (2.38) na equação (2.32), obtemos o seguinte campo efetivo no sítio i

$$\vec{B}_i^{eff} = \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j. \tag{2.39}$$

Agora, podemos escrever o hamiltoniano com campo efetivo na forma do hamiltoniano de Zeeman, dado por

$$\begin{aligned}
H^{eff} &= H^{exc} + H^{dip} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{exc} - \frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{dip} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{eff} \tag{2.40}
\end{aligned}$$

Outra forma de encontrar o campo efetivo seria calculando

$$B_i^{eff} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i} = -\vec{\nabla}_i H \quad (2.41)$$

O hamiltoniano total tem uma parcela que é o termo de Zeeman e neste caso o campo efetivo local com o termo de campo externo é dado por

$$\vec{B}_i^{eff} = \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j + 2\vec{B}^{ext}, \quad (2.42)$$

onde fator 2 no campo externo é colocado para anular o fator 1/2 da dupla contagem.

Finalmente podemos escrever o hamiltoniano total que foi usado para descrever nosso nanodisco magnético e que interage com um campo externo da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \left(\sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j \right) - \\ &- \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}^{ext} \end{aligned} \quad (2.43)$$

ou

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{ij}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{\mu_0 \gamma^2}{8\pi a_0^3} \left[\frac{3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \\ &- \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}^{ext}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Este é o modelo estendido, incluindo as interações de troca(primeiro termo), dipolar(segundo termo) e Zeeman(terceiro termo).

Capítulo 3

Métodos Computacionais

Neste capítulo, será apresentado o modelo computacional para o estudo das propriedades dos nanomagnetos. De modo geral, a modelagem computacional de sistemas nanoestruturados torna mais realística a comparação dos resultados das simulações com resultados experimentais em sistemas nesta escala. Aqui, será apresentado a Dinâmica de Spins, o método de Monte Carlo e a Teoria do Micromagnetismo.

3.1 Dinâmica de Spins

O método da Dinâmica de Spins (DS) fornece uma aproximação determinística para obter a evolução temporal destes sistemas de spins por meio da integração de equações de movimento. Dessa forma, diversas características importantes tais como excitações de ondas de spin e vórtices, as quais estão intimamente relacionadas à dinâmica em tempo real, podem ser analisadas. Portanto, a dinâmica dos spins é obtida por meio da seguinte equação de

movimento:

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_i}{dt} = [\vec{S}_i, H]. \quad (3.1)$$

Utilizando a regra de comutação de momento angular

$$[S_i^\alpha, S_j^\beta] = i\hbar \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \delta_{ij} S_i^\gamma, \quad (3.2)$$

onde o fator $\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}$ é um pseudotensor completamente antissimétrico (símbolo de Levi-civita) e os índices α, β, γ indicam as componentes x, y, z de cada spin S_i . $\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}$ assume os valores 1 e -1 se α, β, γ forem cíclicos e anticíclicos respectivamente e valor nulo, caso ocorra a repetição de algum índice. Definindo o operador unitário de spin $\vec{s} = \vec{S}/S$, com $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ a relação de comutação entre as componentes de cada spin pode ser escrita como

$$s_x s_y - s_y s_x = [i\hbar/S] s_z. \quad (3.3)$$

No limite clássico, $S \rightarrow \infty$, os operadores s_x e s_y comutam e podemos substituir o operador s_i por um vetor unitário, o qual representaremos por \vec{S}_i . Desta forma, é possível desenvolver o comutador $[\vec{S}_i, H]$ e obter uma equação de movimento para os vetores clássicos \vec{S}_i a partir da expressão (3.1). Outra maneira de se encontrar a equação de movimento é utilizando os conceitos clássicos de dinâmica de rotação.

A equação de movimento de um corpo rígido na mecânica clássica é

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{T}, \quad (3.4)$$

onde \vec{L} é o momento angular do corpo e \vec{T} é o torque na ação.

A equação (3.4) permanece válida na mecânica quântica onde \vec{L} e \vec{T} são reinterpretados como operadores de um espaço de Hilbert, e podem ser usados para sistemas de spin substituindo o momento angular \vec{L} pelo operador \vec{S} para o momento angular associado com um elétron de spin,

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{T}. \quad (3.5)$$

Isto apresenta um problema para um sistema de spin quando uma formulação Lagrangiana de equações clássicas é usada para introduzir um termo de amortecimento nas equações de movimento para um sistema de spin porque uma Lagrangiana introduz variáveis dinâmicas que não são definidas para um operador de spin da mecânica quântica.

Podemos contornar este problema para um campo magnético não amortecido convertendo (3.5) para uma equação na qual a única variável dinâmica é o momento magnético. O momento magnético de um elétron pode ser escrito como

$$\vec{M} = \gamma \vec{S}, \quad (3.6)$$

onde $\gamma < 0$ é a relação giromagnética para um elétron de spin. A eq.(3.6) permanece válida tanto para mecânica clássica ou quântica, e não será introduzida qualquer variável. O torque exercido no momento magnético \vec{M} para um campo magnético $\vec{\mathbb{B}}$ é:

$$\vec{T} = \vec{M} \times \vec{\mathbb{B}}. \quad (3.7)$$

Assim, podemos reescrever a eq.(3.5) como

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{\mathbb{B}}_{eff}. \quad (3.8)$$

A aplicação da eq.(3.8) não está limitada ao torque exercido por um campo magnético externo. Pode-se mostrar que o torque no momento magnético \vec{M} pode ser escrito na forma da eq.(3.7) se definirmos um campo magnético *efetivo* como

$$\vec{\mathbb{B}}_{eff} = - \left[\hat{i} \frac{\partial H(\vec{M})}{\partial M_x} + \hat{j} \frac{\partial H(\vec{M})}{\partial M_y} + \hat{k} \frac{\partial H(\vec{M})}{\partial M_z} \right] \equiv \frac{\partial H(\vec{M})}{\partial \vec{M}}, \quad (3.9)$$

onde $H(\vec{M})$ é a hamiltoniana do sistema.

Para um conjunto discreto de momentos magnéticos \vec{M}_i , onde $i = 1, 2, \dots, n$, a equação de movimento se torna

$$\frac{d\vec{M}_i}{dt} = \gamma \vec{M}_i \times \vec{\mathbb{B}}_i, \quad (3.10)$$

onde

$$\vec{\mathbb{B}}_i = -\frac{\partial \vec{H}(\vec{M}_1, \vec{M}_2, \dots, \vec{M}_n)}{\partial \vec{M}_i} \quad (3.11)$$

é o campo efetivo atuando no momento e $H(\vec{M}_1, \vec{M}_2, \dots, \vec{M}_n)$ é a hamiltoniana generalizada que leva em conta todas as interações que podem exercer torque nos momentos individuais.

3.2 Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo é o método numérico mais utilizado para se estudar problemas no escopo da Mecânica Estatística. Neste contexto, a ideia básica do método é similar às flutuações aleatórias nos estados de um sistema quando este está em contato com um ou mais reservatórios (por exemplo, um reservatório térmico, um reservatório de partículas, etc.) ou isolado do exterior [30].

Considere um sistema em contato com um reservatório térmico cuja temperatura é T . A distribuição de equilíbrio dos estados do sistema no *ensemble* canônico é a distribuição de Boltzmann. A probabilidade é representada por

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}, \quad (3.12)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B é a constante de Boltzmann, E_i é a energia do estado i e Z é a função partição do sistema.

A função partição é escrita como

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i}, \quad (3.13)$$

em que a soma é realizada sobre todos os estados do sistema. Esta função é muito importante porque a partir dela pode-se obter diversas grandezas termodinâmicas de interesse.

O valor esperado de qualquer grandeza K é obtida pela média em todos os estados do sistema com o peso dado pela distribuição de Boltzmann

$$\langle K \rangle = \sum_i \frac{K_i}{Z} e^{-\beta E_i} = \sum_i P_i K_i. \quad (3.14)$$

O símbolo $\langle .. \rangle$ representa a média no *ensemble*. Se o sistema apresenta graus de liberdade contínuos, a soma acima será substituída por uma integral.

Em simulações de Monte Carlo a média no *ensemble*, eq.(3.14), é aproximada pela média aritmética das configurações que mais contribuem, que é dada por

$$\bar{K} = \frac{\sum_{i=1}^N K_i}{N}, \quad (3.15)$$

onde N é o número total de estados do sistema e K é uma grandeza física.

3.2.1 Cadeias Markovianas

Grande parte das simulações de Monte Carlo utilizam processos markovianos como geradores do conjunto de estados de um sistema. Com a finalidade de definir um processo markoviano, considere um processo estocástico para um sistema de número finito de estados S_i e no qual o tempo pode ser discretizado. Para tal tem-se a seguinte probabilidade condicional do sistema ocupar o estado S_{i_n} no tempo t_n

$$P(X_{t_n} = S_{i_n} | X_{t_{n-1}} = S_{i_{n-1}}, X_{t_{n-2}} = S_{i_{n-2}}, \dots, X_{t_1} = S_{i_1}), \quad (3.16)$$

onde X_t designa o estado ocupado no tempo t .

Se essa probabilidade depende somente do estado no sistema em t_{n-1} , ou seja, $P = P(X_{tn} = S_{in} | X_{tn-1} = S_{in-1})$, esse processo é markoviano. Então a sequência de estados $\{X_t\}$ é uma cadeia de Markov e a probabilidade de transição entre os estados i e j é

$$W(S_i \longrightarrow S_j) \equiv P(X_{tn} = S_j | X_{tn-1} = S_i). \quad (3.17)$$

As probabilidades de transições têm que satisfazer as seguintes condições

$$W(S_i \longrightarrow S_j) \geq 0 \quad (3.18)$$

$$\sum_j W(S_i \longrightarrow S_j) = 1. \quad (3.19)$$

Para que o processo markoviano gere estados cujas frequências de ocorrência sigam a distribuição de Boltzmann, duas condições devem ser obedecidas: a condições de ergodicidade e a condição de balanço detalhado.

De acordo com a condição de ergodicidade, deve ser possível para o processo markoviano gerar qualquer estado S_i a partir de qualquer outro S_j contanto que t_n seja suficientemente grande. Essa condição é necessária porque cada estado tem uma probabilidade diferente de zero, de acordo com a distribuição de Boltzmann [30].

3.2.2 A Equação Mestra e o Balanço Detalhado

A equação mestra define a evolução temporal da probabilidade $P(X_{tn} = S_j) = P(S_j, t)$ do sistema estar em S_j em $t = t_n$ (aqui o tempo é tratado como uma variável contínua)

$$\frac{dP(S_j, t)}{dt} = \sum_i W(S_i \longrightarrow S_j)P(S_i, t) - \sum_i W(S_j \longrightarrow S_i)P(S_j, t). \quad (3.20)$$

Quando em equilíbrio, as taxas em que o sistema realiza transições para o estado j e fora dele devem ser iguais, ou seja,

$$W(S_i \longrightarrow S_j)P(S_i, t) - \sum_i W(S_j \longrightarrow S_i)P(S_j, t) = 0. \quad (3.21)$$

Usando a eq.(3.19), teremos

$$P(S_i, t) = \sum_i W(S_j \longrightarrow S_i)P(S_j, t). \quad (3.22)$$

Note que para uma distribuição de equilíbrio, $\frac{dP(S_j, t)}{dt} = 0$, já que o lado direito da equação mestra é zero. Então para qualquer conjunto $\{W(S_j \longrightarrow S_i)\}$ que satisficção a equação (3.22), $P(S_j, t)$ tenderá para uma distribuição.

No entanto, para que P convirja para essa distribuição a partir de qualquer estado inicial do processo markoviano é necessário exigir a condição de balanço detalhado

$$W(S_j \longrightarrow S_i)P(S_j) = W(S_i \longrightarrow S_j)P(S_i). \quad (3.23)$$

Dada a distribuição de equilíbrio é a distribuição de Boltzmann, tem-se da equação acima e da eq.(3.12) que

$$\frac{W(S_i \longrightarrow S_j)}{W(S_j \longrightarrow S_i)} = \frac{P(S_j)}{P(S_i)} = e^{-\beta(E_j - E_i)}. \quad (3.24)$$

Portanto qualquer conjunto de probabilidades de transição que satisficção a equação acima pode ser utilizado em uma simulação de Monte Carlo. Algumas escolhas são conhecidas por funcionar bem em diversos casos, como por exemplo o famoso algoritmo de Metropolis proposto por Metropolis e colaboradores em 1953.

3.2.3 Algoritmo de Metropolis

Definindo $H(S)$ como sendo a energia total do sistema, onde S representa um conjunto de variáveis que define o estado do sistema e utilizando as

equações (3.12 e 3.13), segue a apresentação do método na sequência:

1. Gere uma configuração $S = S_{initial}$;
2. Proponha uma mudança aleatória no conjunto de variáveis obtendo uma nova configuração S_{new} ;
3. Calcule as energias $H(S_{initial})$ e $H(S_{new})$;
4. Se $H(S_{new}) < H(S_{initial})$ então $S = S_{new}$ (Sempre se aceita!);
5. Se $H(S_{new}) > H(S_{initial})$ gera-se um número aleatório A entre 0 e 1 :
6. Calcula-se $\pi = \frac{P(S_{new})}{P(S_{initial})} = \exp \left[-\frac{H(s_{new}) - H(s_{initial})}{K_B T} \right]$;
7. Se $\pi > A$ então $S = S_{new}$, senão mantém-se a configuração inicial $S = S_{initial}$;
8. Esse algoritmo gera uma cadeia de Markov, S_1, S_2, \dots, S_N .

3.3 O Limite Clássico

Nesta seção, estudaremos o comportamento de sistemas quânticos no limite clássico. O estudo de sistemas quânticos torna-se muito complexo. Em alguns sistemas percebemos que os operadores de spins comportam-se como vetores clássicos. Isso acontece em sistemas com elevados números quânticos de spin. Com isso o número de estados discretos que o momento angular pode assumir torna-se grande. Logo, o resultado esperado no limite clássico é que os operadores de spins apresentem um contínuo de estados. Assim, o

Princípio da Incerteza de Heisenberg é desprezado nos casos onde conhecemos as três componentes de spins simultaneamente. Essa mudança na representação de operadores de spin por vetores é importante em simulação porque nos possibilita especificar uma condição inicial para o nanodisco magnético e estudar tanto a evolução do sistema utilizando a dinâmica de spins, quanto o método Monte Carlo.

Daqui em diante, os operadores de spins, que apresentam dimensão de momento angular, \hbar , serão substituídos por vetores com a mesma dimensão e, vamos supor que seus módulos são iguais a $\hbar S$, isto é, faremos a seguinte transformação

$$\vec{S}_i \rightarrow \hbar S \hat{S}_i, \quad (3.25)$$

onde S é adimensional e os \hat{S}_i são versores, ou seja, teremos o vínculo $|\hat{S}_i|^2 = \hat{S}_i \cdot \hat{S}_i = 1$.

Vamos alterar o momento angular pelo momento quântico na eq.(2.42). Com essa substituição encontramos o campo efetivo clássico que atua em cada sítio da rede, dado por

$$\begin{aligned} \vec{B}_i &= \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\hbar S \hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \hbar S \hat{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{J}{\gamma \hbar} S \hat{S}_j + 2B^{eff} \\ &= \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{\mu_0 \gamma \hbar S}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \hat{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \frac{JS}{\gamma \hbar} \hat{S}_j + 2B^{eff}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

O hamiltoniano (2.44) é definido no limite clássico da seguinte forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= - \frac{JS^2}{2} \sum_{i,j}^N \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + \frac{\mu_0 (\gamma \hbar S)^2}{8\pi a_0^3} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \left[\frac{\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - 3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \\ &- \hbar \gamma S \sum_i^N \hat{S}_i \cdot B^{ext}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Definindo com isso o parâmetro da interação dipolar como

$$D = \frac{\mu_0(\gamma\hbar)^2}{4\pi a_0^3} = \frac{\mu_0(g\mu_B)^2}{4\pi a_0^3}, \quad (3.28)$$

onde D tem dimensão de energia[J], logo,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - \frac{JS^2}{2} \sum_{i,j}^N \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + \frac{DS^2}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \left[\frac{\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - 3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \\ & - g\mu_B S \sum_i^N \hat{S}_i \cdot B^{ext}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Esse é o hamiltoniano de Heisenberg no limite clássico com o termo de anisotropia de forma e interação do campo externo.

3.4 Estimativa do Número Total de Spins num Sistema Real

Nesta seção, vamos estimar a quantidade de spins existentes em um nanomagnetito de Permalloy-79($Fe_{21}Ni_{79}$). Como exemplo vamos calcular quantos spins existem aproximadamente em um nanodisco de diâmetro $d = 200[nm]$ e espessura $l = 20[nm]$. De acordo com a ref.[31], esse material apresenta a estrutura de uma rede cúbica de face centrada (FCC), fig.(3.1), cujo parâmetro de rede de uma célula convencional é $a_0 = 0.355[nm]$. Lembrando que o número de primeiros vizinhos numa rede FCC, é $z = 12$. Para estimar o número de spins do nanodisco citado acima, é razoável aproximar o disco por um quadrado de lado d e espessura l . Para os cálculos, usaremos o parâmetro de rede $a_0 = 0.4[nm]$. Primeiro precisamos contar o número de células convencionais de parâmetro de rede a_0 , que são necessárias para ocupar uma caixa de dimensões $200 \times 200 \times 20[nm]^3$.

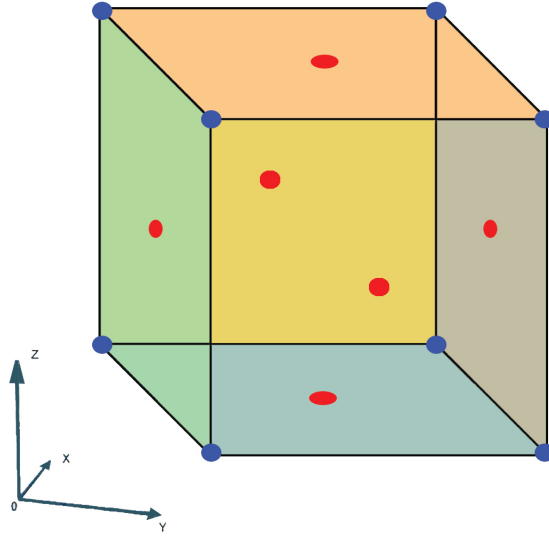


Figura 3.1: Representação de um cubo de face centrada (FCC).

Multiplicando-se os números de células que podem ser dispostas, lado a lado, ao longo das direções x, y, z obtemos que o número total de células convencionais é,

$$N_{cel} = \frac{200}{0.4} \times \frac{200}{0.4} \times \frac{20}{0.4} = 12.5 \times 10^6.$$

Como cada célula convencional contribui com $(1/8) \times 8 + (1/2) \times 6 = 4$ spins, $(1/8$ em cada vértice e $1/2$ em cada face) o número total de spins na caixa é,

$$N_{spins} = 4 \times N_{cel} = 50 \times 10^6.$$

O resultado acima superestima o número de spins no nanodisco, pois o mesmo é para um quadrado de espessura l . Haverá ainda um corte para que o disco seja formado, mesmo assim, o resultado ainda é muito grande, gerando um número muito grande de equações. Isso faz com que, por exemplo, um nanodisco de dimensões típicas e com parâmetros reais, seja difícil de ser tratado mesmo computacionalmente. A simulação micromagnética reduz o

sistema real em um sistema equivalente com algumas aproximações.

3.5 Simulação Micromagnética

Na simulação micromagnética o sistema é redefinido em células de trabalho. Cada célula de trabalho representa N momentos magnéticos. Lembrando que as propriedades magnéticas do material serão as mesmas depois da nova divisão. O objetivo da divisão é diminuir o número de interações a serem calculadas na simulação e também diminuir a restrição de memórias em computadores. Outro ganho é na questão do tempo, pois assim, as simulações se tornam muito mais rápidas sem que se perca a confiabilidade dos resultados.

Supondo que uma célula de trabalho tenha um volume, a^3 , o volume da FCC, V^3 , e que cada célula FCC contribui com 4 momentos magnéticos. O número de spins que cada célula de trabalho representa é dado por

$$N_{spin} = 4 \left(\frac{a^3}{V^3} \right) = 4 \left(\frac{a^3}{a_0^3} \right), \quad (3.30)$$

onde a_0 é o parâmetro de rede do material magnético (Py-79) e a é o parâmetro de rede da nova célula.

O volume da célula de trabalho deve ser pequeno o suficiente para que os momentos atômicos no seu interior estejam praticamente alinhados e, ao mesmo tempo, grande se comparado com as distâncias interatômicas, para conter muitos momentos atômicos.

O comprimento de troca nos fornece um “indicativo” do alcance da interação de troca, ou seja, até que distância essa interação consegue manter o alinhamento dos momentos atômicos numa dada direção. O comprimento

de troca[32] é dado por

$$\kappa_{exc} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}}, \quad (3.31)$$

onde M_s é a magnetização de saturação do material e A é a constante de troca do material. Para o *Py* – 79, $A = 13 \times 10^{-12}[J/m]$ e $M_s = 8.6 \times 10^5[A/m]$, com base nestes dados temos que $\kappa_{exc} \approx 5.3[nm]$.

Para uma temperatura abaixo da temperatura crítica e se o tamanho da célula de trabalho for menor ou igual ao comprimento de troca, $a \leq \kappa_{exc}$, a interação de troca é forte o suficiente para manter o alinhamento dos momentos atômicos em cada célula, ou seja, a magnetização está saturada. Como as células apresentam aproximadamente o mesmo número de momentos atômicos, supõe-se que os vetores magnetização variam apenas suas direções de uma célula para outra, mantendo seus módulos constantes. Na fig.(3.2) encontra-se esquematizada uma discretização em duas dimensões usando uma rede quadrada para facilitar a visualização.

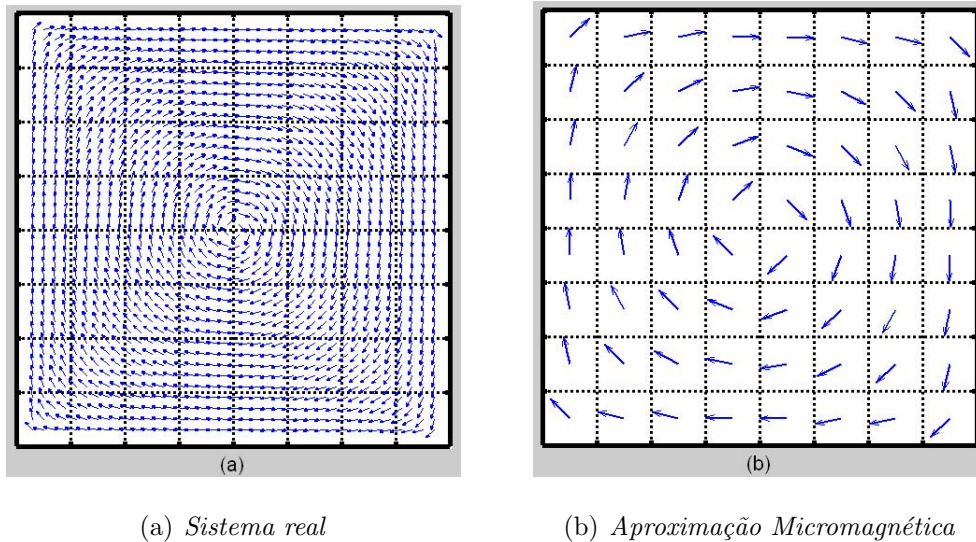


Figura 3.2: Representação esquemática do método micromagnético. Figura retirada da ref.[33]

A magnetização da célula pode ser calculada da seguinte maneira

$$\vec{M}_i = \frac{1}{v_{cel}} \sum_k \vec{m}_k^{atom} = \frac{1}{v_{cel}} \vec{m}_i, \quad (3.32)$$

onde v_{cel} é o volume da célula de trabalho, \vec{m}_i é o seu momento magnético e \vec{m}_k é o momento magnético de cada sítio da rede contido dentro da célula. Então pode-se escrever os momentos magnéticos das células como

$$\vec{m}_i = v_{cel} \vec{M}_i = v_{cel} M_s \hat{m}_i = m_{cel} \hat{m}_i, \quad (3.33)$$

onde \hat{m}_i é um versor na direção e sentido dessa saturação e M_s é o módulo da magnetização de saturação da célula de trabalho. Portanto, na aproximação micromagnética, a discretização do material é dita pelo comprimento de troca.

As interações magnéticas permanecem essencialmente as mesmas, porém ao modificar o parâmetro de rede, devemos renormalizar as constantes das interações.

Os hamiltonianos micromagnéticos normalizados para cada tipo de interação são:

Hamiltoniano de troca:

$$H^{exc} = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{i,j} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j, \quad (3.34)$$

onde $J_{cel} = 2aA$ é a constante de acoplamento entre as células de trabalho, que pode ser encontrada partindo do limite contínuo do modelo de Heisenberg isotrópico [33].

Hamiltoniano dipolar:

$$H^{dip} = \frac{1}{2} \frac{\mu_0 m_{cel}^2}{4\pi a^3} \left(\sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right), \quad (3.35)$$

onde foi substituído $\vec{m}_k = m_{cel}\hat{m}_k$, de acordo com a relação (3.33). Definindo o parâmetro da interação dipolar como,

$$D_{cel} = \frac{\mu_0 m_{cel}^2}{4\pi a^3} = \frac{\mu_0 M_s^2 a^3}{4\pi} = \frac{a^2}{4\pi} \left(\frac{\mu_0 M_s^2}{2A} \right) 2Aa \quad (3.36)$$

e usando a relação do comprimento de *exchange* (3.31), obtem-se

$$D_{cel} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\kappa_{exc}} \right)^2 J_{cel}. \quad (3.37)$$

Hamiltoniano de Zeeman:

$$H^{ext} = m_{cel}\mu_0 M_s \left(- \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} \right) \quad (3.38)$$

onde \vec{b}_i^{ext} é o campo externo adimensional, definido por

$$\frac{1}{\mu_0 M_s} B_i^{ext}. \quad (3.39)$$

Escrevendo a constante da interação Zeeman em termos de J_{cel} , teremos,

$$m_{cel}\mu_0 M_s = \left(\frac{a}{\kappa_{exc}} \right)^2 J_{cel}. \quad (3.40)$$

O hamiltoniano micromagnético é dado pela expressão,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - \frac{J_{cel}}{2} \sum_{ij} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - m_{cel}\mu_0 M_s \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} + \\ & + \frac{D_{cel}}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right]. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Na equação acima colocaremos a constante de acoplamento da célula, J_{cel} , em evidência, por causa da dimensão de energia. Com isso, teremos um hamiltoniano adimensional com versores unitários.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J_{cel} \left(- \frac{1}{2} \sum_{ij} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{m_{cel}\mu_0 M_s}{J_{cel}} \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} \right) + \\ & + J_{cel} \left(\frac{D_{cel}}{2J_{cel}} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \right), \end{aligned} \quad (3.42)$$

ou em termos do comprimento de troca, obtêm-se

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J_{cel} \left(-\frac{1}{2} \sum_{ij}^N \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \left(\frac{a}{\kappa_{exc}} \right)^2 \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} \right) + \\ & + J_{cel} \left(\frac{1}{8\pi} \left(\frac{a}{\kappa_{cell}} \right)^2 \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \right). \end{aligned} \quad (3.43)$$

O termo entre parêntese é a hamiltoniana adimensional do sistema

$$\mathcal{H} = J_{cel} \mathcal{H}' \quad (3.44)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' = & -\frac{1}{2} \sum_{ij}^N \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \left(\frac{a}{\kappa_{exc}} \right)^2 \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} + \\ & + \frac{1}{8\pi} \left(\frac{a}{\kappa_{cell}} \right)^2 \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right], \end{aligned} \quad (3.45)$$

esta equação é a parte adimensional do hamiltoniano micromagnético em função do parâmetro de rede da nova célula e de sua respectiva constante de acoplamento.

Capítulo 4

Estruturas Nanomagnéticas

Neste capítulo apresentaremos as nanoestruturas em que trabalhamos, neste caso nanodiscos e nanofitas. Mostraremos as condições para termos uma configuração de vórtice em nanodiscos e como se comportam na presença de um campo magnético externo. Falaremos sobre a presença de impurezas em uma liga de Permalloy e o quanto isso afeta no comportamento do núcleo do vórtice. Nas nanofitas apresentaremos como ocorrem as paredes de domínios. Quais tipos de configurações podem ocorrer de paredes de domínios em nanofitas macias e como é definida a largura dessas paredes.

4.1 Nanodisco

Os nanodiscos magnéticos tem como dimensões, a largura d (Diâmetro) e a espessura l , com dezenas de nanômetros. Uma característica do nanodisco magnético que o diferencia das outras nanoestruturas é a relação entre o diâmetro e a espessura, onde $d \gg l$. Os nanodiscos podem apresentar diversas configurações de magnetização que dependem dos valores das dimensões, classificadas em: um único domínio (monodomínio), o estado de vórtice e

vários domínios (multidomínio), fig.(4.1). Uma parte do nosso trabalho é baseado em nanodiscos magnéticos de Permalloy.

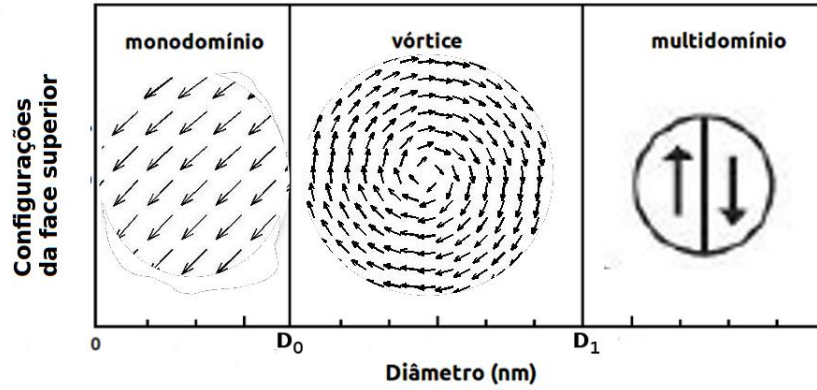


Figura 4.1: *Configurações de magnetização possíveis para materiais na escala nano na forma de disco. Figura retirada da ref.[22]*

Um nanodisco com configuração de domínio único não tem a formação de paredes de domínios, isso acontece para nanodisco com diâmetro menores que D_0 ($\approx 10nm$) como mostra a fig.(4.1).

No caso de diâmetros maiores que D_0 e menores que $D_1 \approx 400nm$ existe uma outra configuração magnética na qual os momentos magnéticos se arranjam em círculos concêntricos que é chamada de vórtice, fig.(4.1). Na região central, denominada núcleo do vórtice, os momentos magnéticos apresentam um ângulo diferente de zero em relação ao plano que passa pelos sítios e tornam-se cada vez maiores quando aproximamos do centro do núcleo do vórtice. Essa mudança no ângulo é a responsável pelo aumento da energia de troca, com isso para minimizar a energia local os momentos começam a apontar para fora do plano fig.(4.2). Além disso, percebemos que longe do núcleo do vórtice os momentos magnéticos tendem a permanecer no plano da superfície do nanodisco.

Em particular, para um nanomagnet mole na forma de disco, no qual

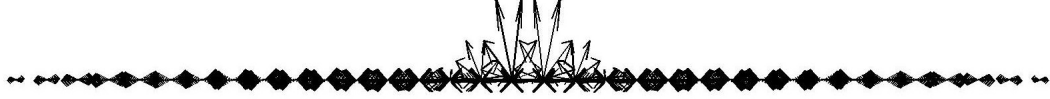


Figura 4.2: *Vista frontal de um nanodisco*

a espessura é muito menor do que o diâmetro, o estado fundamental do sistema pode assumir duas configurações distintas: cebola ou vórtice, fig.(4.3). Para um determinado material, a competição entre as interações de troca e magnetostática é responsável pela formação dos estados de vórtice ou cebola.

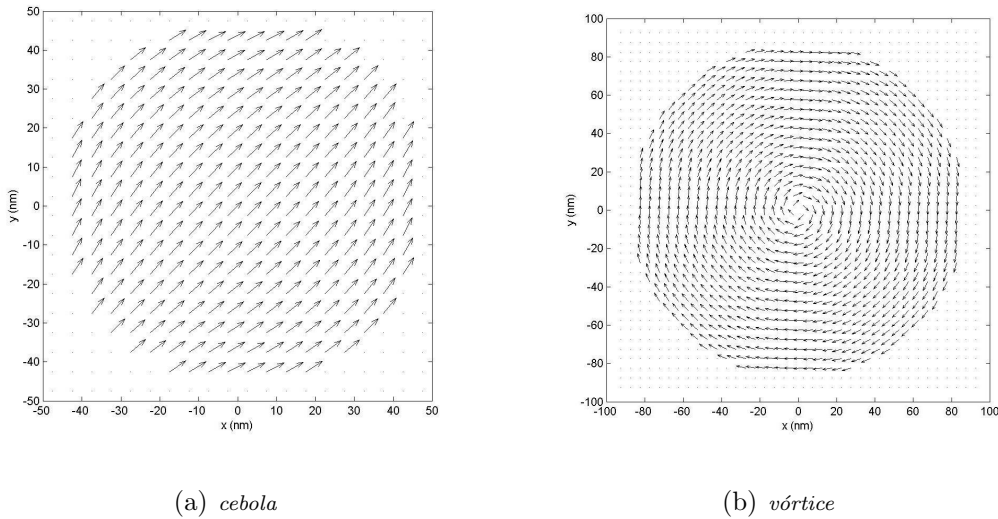


Figura 4.3: *Possíveis configurações para o estado fundamental de um nanodisco com espessura muito menor do que o diâmetro. Em (a) o estado cebola. Em (b) o estado de vórtice. Figura retirada da ref.[33]*

A hamiltoniana de Heisenberg, (2.44), é invariante frente a uma operação global $S^z \rightarrow -S^z$, assim não existe uma direção preferencial para a componente da magnetização fora do plano, pode apontar $+\hat{z}$ ou $-\hat{z}$. Analogamente, se $S^x \rightarrow -S^x$ e $S^y \rightarrow -S^y$ que é equivalente a uma rotação de

π em torno do eixo-z, vemos que não existe um sentido preferencial para a circulação da magnetização no plano do disco. Portanto, o estado de vórtice pode ser caracterizado por dois parâmetros: a **polaridade** (sentido da componente da magnetização fora do plano, pra cima ou para baixo) e **quiralidade** (sentido da circulação da magnetização no plano, sendo horária ou anti-horária). A polaridade e a quiralidade são independentes, de forma que o estado de vórtice é quadruplamente degenerado, ver fig(4.4). De modo geral, a compreensão das propriedades do estado de vórtice tem grande importância para aplicações tecnológicas, onde podemos utilizar a degenerescência para armazenar 2 bits de informações em um nanodisco, sendo 1 bit referente a polaridade e o outro a quiralidade.

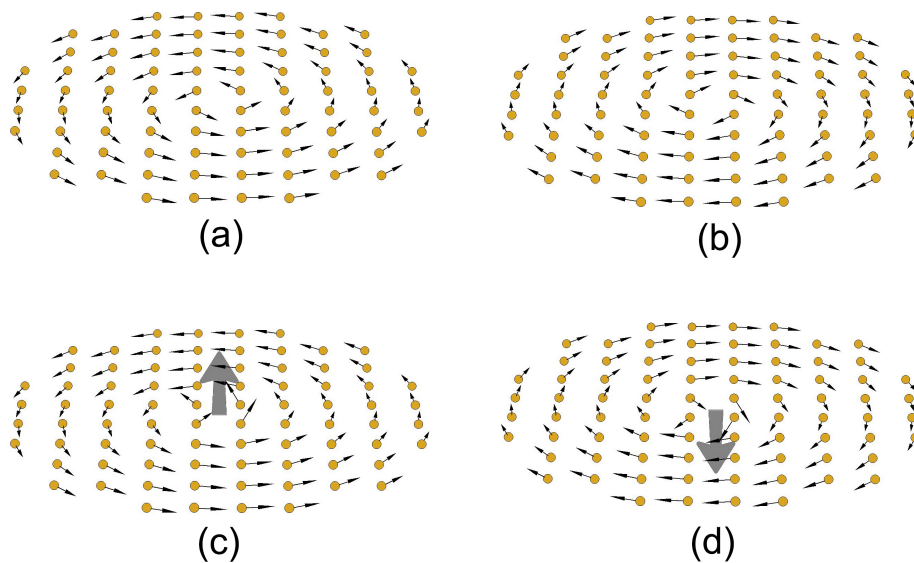


Figura 4.4: As quatro combinações da polaridade com a quiralidade. figura retirada da ref.[7]

Devido a suas propriedades únicas, o vórtice magnético apresenta uma dinâmica não trivial. Um fenômeno muito interessante ocorre devido à componente da magnetização fora do plano, conhecido como modo girotrópico,

no qual o núcleo exibe um movimento elíptico em torno de um ponto fixo, quando o estado de vórtice é perturbado com campo magnético externo no plano do disco. O sentido do giro depende unicamente da polaridade [33][34][35][36] e, a autofrequência do movimento depende fortemente das dimensões do disco. Recentemente, foi encontrado que tal movimento oscilatório está estritamente relacionado com o mecanismo de reversão da polaridade do núcleo do vórtice [37], em que o “*switching*” da polaridade sempre ocorre quando o núcleo do vórtice atinge uma velocidade crítica, ao ser excitado por campo (ou correntes) oscilatório no modo ressonante, sendo a velocidade crítica uma grandeza característica do material.

Outra maneira de ocorrer o deslocamento do núcleo do vórtice é aplicando-se um campo magnético externo, \vec{B}^{ext} , paralelo ao plano do nanodisco. Um campo magnético estático, \vec{B}^{ext} , aplicado no plano do nanodisco no estado de vórtice, faz com que o centro do vórtice se desloque ao longo de uma trajetória radial perpendicular ao campo, \vec{B}^{ext} , fig.(4.5). Com o aumento

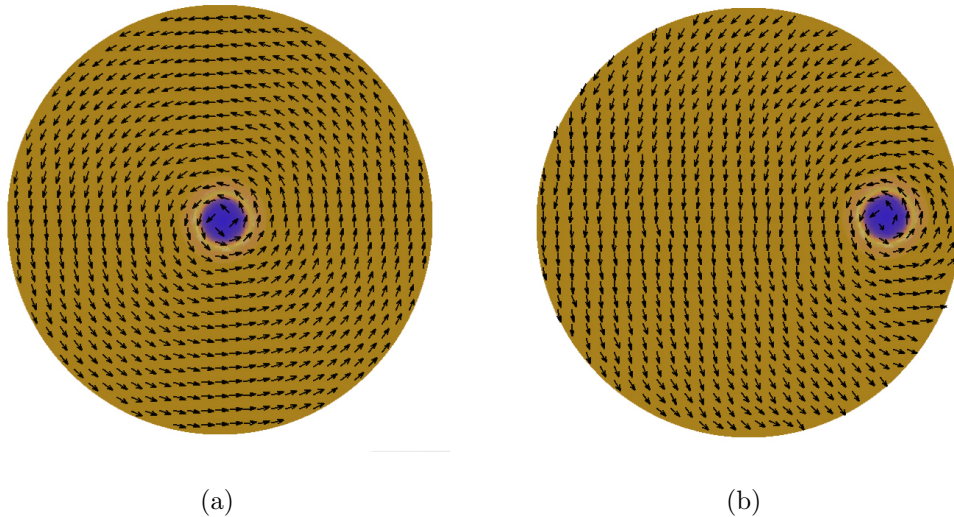


Figura 4.5: Em (a) temos um nanodisco em uma configuração inicial com um vórtice em seu centro. Em (b) temos um nanodisco com um campo magnético externo aplicado depois de muitos passos de Monte Carlo.

da intensidade do campo magnético, \vec{B}^{ext} , o centro do vórtice é forçado a sair do nanodisco, a configuração de domínio único será alcançada atingindo assim a magnetização de saturação, \vec{M}_s , como mostra a fig.(4.6).

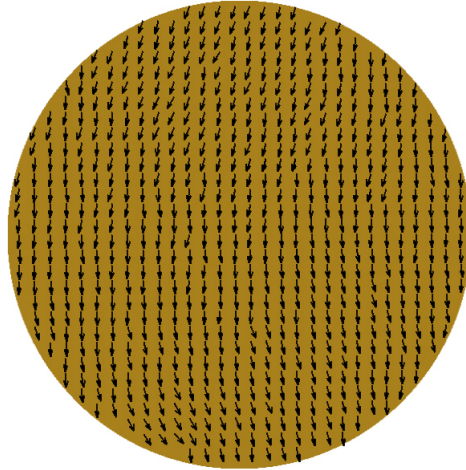


Figura 4.6: *Representação do disco saturado*

Um de nossos trabalhos apresentado nesta dissertação é exatamente encontrar o campo magnético externo limite para que o núcleo do vórtice permaneça em um nanodisco de Permalloy, evitando assim, a magnetização de saturação do sistema, porém com anéis de impurezas inseridos no nanodisco. No próximo item, será discutida essa relação entre o núcleo do vórtice e impurezas inseridas no sistema.

4.1.1 Nanodiscos Magnéticos com Impurezas Introduzidas

Como foi dito anteriormente, foram feitas descobertas em que algumas nanoestruturas magnéticas podem apresentar interessantes propriedades que

podem levar à construção de novos dispositivos de armazenamento eficiente. Também foi dito que em um nanodisco magnético, a competição entre a interação de Troca e a energia magnetostática são responsáveis pela formação de um vórtice magnético no estado fundamental. O vórtice terá uma configuração planar paralela ao plano xy do disco, exceto no centro do vórtice onde os momentos magnéticos saem em uma direção perpendicular ao plano, a direção z , e que pode ser pra cima ou pra baixo (z ou $-z$). Observações através de simulações numéricas comprovam que podem ocorrer deslocamento do núcleo do vórtice através de interação de vórtice-impureza.

A interação do centro de vórtice com defeitos litograficamente inseridos foi assunto de intensas investigações nos últimos anos. Por exemplo, na ref.[18], os autores mostram que vórtices são atraídos e presos por impurezas não magnéticas. Sabe-se que mesmo em estruturas puras, como nanodiscos produzidos de Permalloy, defeitos estruturais são distribuídos através do material. Esses defeitos afetam na dinâmica do vórtice. Na ref.[39] os autores argumentaram que flutuações na frequência do modo girotrópico, foram devido a uma distribuição de defeitos em nanoescala com o núcleo do vórtice fixado. Os autores estimaram a energia média de interação do núcleo do vórtice com um único defeito em nanoescala ser de aproximadamente 2 eV. Na ref.[40], Os autores discutem tipos possíveis de defeitos pontuais na qualidade de fixação ou espalhamento de sítios. A questão apontada foi a seguinte: é sabido que impurezas não magnéticas atuam como sítios de fixação, mas que poderiam funcionar como um local de espalhamento? Na Ref.[41] foram usadas simulações de dinâmica de spins para estudar um modelo para ambos sítios de aprisionamento magnético e dispersão. No modelo que desenvolveram, a interação entre os sítios magnéticos no nanodisco e os defeitos só depende da energia de troca.

Foi-se considerado nanodiscos magnéticos com interação dipolo-dipolo e as interações de troca. Podemos escrever um modelo hamiltoniano para o nanodisco com impurezas magnéticas da seguinte forma,

$$H = J \left[-\frac{1}{2} \sum_{\langle i \neq i', j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{J'}{2J} \sum_{\langle i', j \rangle} \vec{S}'_i \cdot \vec{S}_j + \frac{D}{2J} \sum_{\langle i \neq j \rangle} \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij}) \cdot (\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^3} \right]. \quad (4.1)$$

Aqui, i e j são sítios da amostra pura, i' são para sítios que contenham impurezas; \vec{S}_i , \vec{S}_j e \vec{S}'_i são vetores com dimensões de comprimento fixo que representa classicamente spins localizados nos sítios i , j e i' e satisfazem a condição $|\vec{S}| = 1$, J (em unidades de energia) é a constante de acoplamento entre \vec{S}_i e \vec{S}_j , em nosso trabalho utilizamos $J = 1$ em todas nossas simulações; J' é a constante de acoplamento entre \vec{S}'_i e \vec{S}_j ; r_{ij} é a distância entre os sítios i e j medido em unidades de comprimento; D é a constante dipolar. A primeira e segunda soma é realizada com os vizinhos mais próximos.

É observado que se $J' < J$, o centro do vórtice se move na direção do local de impureza magnética, indicando um potencial efetivo atrativo, fig.(4.7), da interação entre o vórtice e a impureza magnética[41]. Se $J' > J$, o núcleo do vórtice se afasta do local com impureza magnéticas, indicando um potencial efetivo repulsivo de interação entre o vórtice e a impureza magnética, fig.(4.8).

Sabemos que o núcleo do vórtice interage com a impureza magnética e que essa interação ocorre quando a distância relativa é menor que dois parâmetros de rede. Logo, para estudar a interação entre núcleo do vórtice e uma impureza magnética em um nanodisco, devemos escolher qualquer posição para a impureza próxima da trajetória do centro do vórtice.

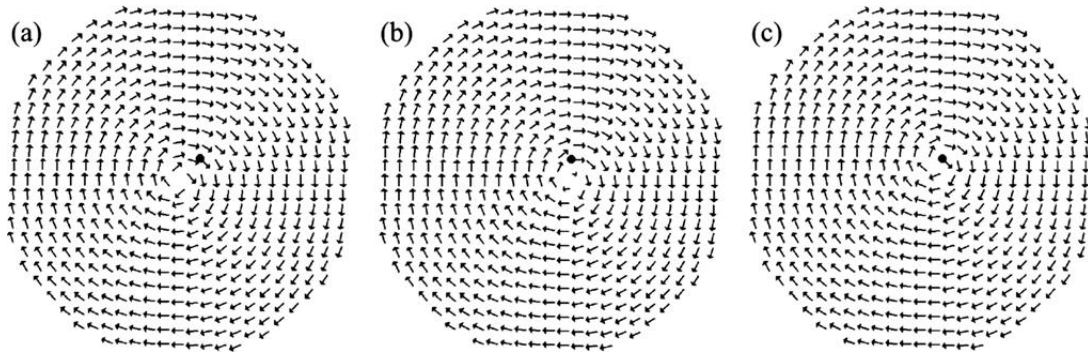


Figura 4.7: *Comportamentos dinâmicos instantâneos de um núcleo de vórtice perto de uma impureza magnética atrativa ($J' < J$). (a) Uma típica configuração inicial com o núcleo do vórtice no centro do nanodisco. O símbolo do círculo preto representa uma impureza magnética localizada a dois pontos de distância do centro. (b) Configuração após 120 passos de tempo. (c) Configuração após 350 passos de tempo, mostrando o núcleo do vórtice no local de impureza. A simulação para tempos mais tarde, demonstra que esta é uma posição de equilíbrio. Figura retirada da ref.[41]*

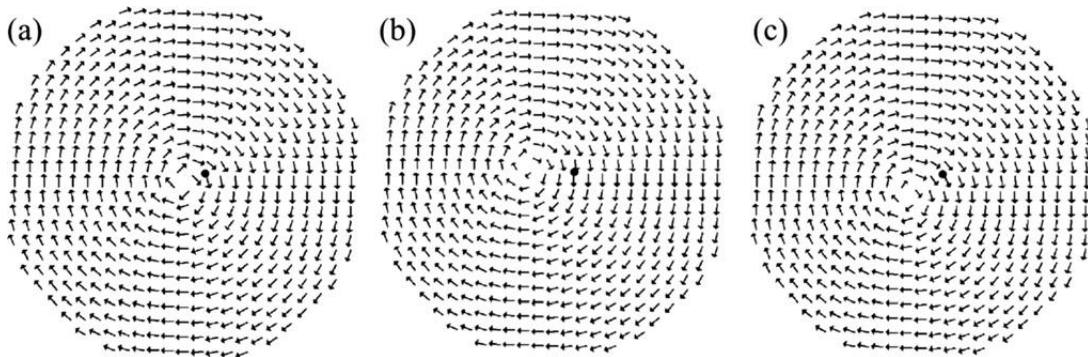


Figura 4.8: *comportamentos instantâneos dinâmicos de um núcleo de vórtice repulsivo perto de impurezas magnéticas ($J' > J$). (a) Uma típica configuração inicial com o núcleo de vórtice localizado no centro do nanodisco na presença de uma impureza magnética. (b) Configuração após 300 passos de tempo de simulação. (c) configuração depois de 600 passos de tempo da simulação mostrando a posição de equilíbrio do núcleo do vórtice em relação a impureza. Figura retirada da ref.[41]*

4.2 Nanofita

4.2.1 Domínios Magnéticos

Um material ferromagnético no estado desmagnetizado está dividido em pequenas regiões chamadas *domínios magnéticos*, como podemos ver na fig.(4.9)

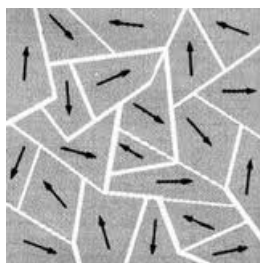


Figura 4.9: *Representação macroscópica de domínios magnéticos.*

Cada domínio é espontaneamente magnetizado a um valor de saturação M_s , mas a direção da magnetização é aleatória para cada domínio tal que a soma das magnetizações dos domínios é nula. Um exemplo de processo de magnetização de um material é mostrado na fig.(4.10).

O material em (a) está dividido em dois domínios, a separação entre esses domínios é chamada “*parede de domínios*”. Os domínios estão espontaneamente magnetizados em direções opostas, tendo o material uma magnetização total zero. Em (b) um campo externo é aplicado, causando um aumento do domínio superior fazendo com que a parede de domínio se propague, invertendo o domínio inferior até o ponto (c). Finalmente, temos a rotação da magnetização em direção ao campo aplicado, como em (d).

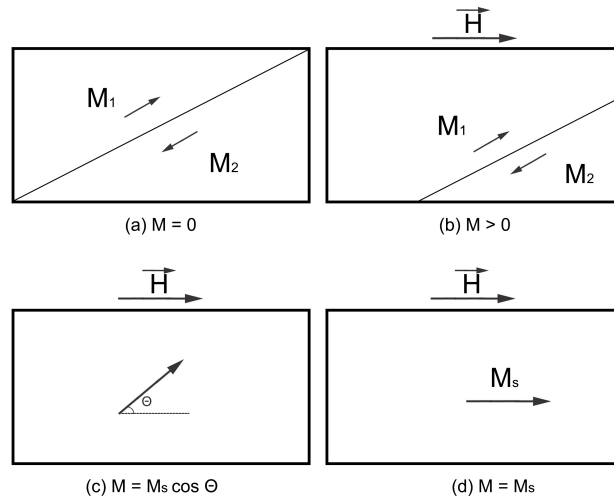


Figura 4.10: *Processo de magnetização.*

4.2.2 Paredes de Domínios

Paredes de domínios são interfaces entre regiões de um material ferromagnético onde a magnetização espontânea tem diferentes direções. À primeira vista, poderíamos imaginar a reversão da magnetização como uma mudança abrupta, para uma parede 180° , como mostra a fig.(4.11). No entanto isto não acontece. A interface entre domínios é uma transição suave e a parede tem uma largura finita definida pelas energias de troca e de anisotropia, fig.(4.12).

O mínimo para a energia de troca é observado quando spins adjacentes são paralelos, enquanto na fig.(4.11), a energia de troca associada seria máxima pelos spins estarem antiparalelos.

Por outro lado, a energia de anisotropia é mínima para spins alinhados na direção de fácil magnetização. O que não acontece para uma transição suave na direção dos spins adjacentes entre dois domínios.

Assim, enquanto a energia de troca tenta fazer com que a parede de

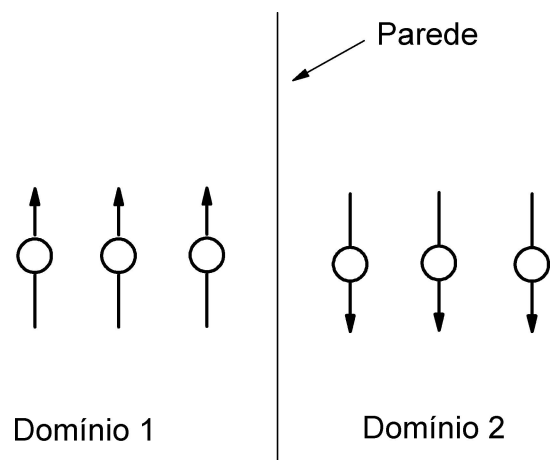


Figura 4.11: *Hipotética reversão infinitesimal de 180°.*

domínio seja extensa (ϕ sendo o menor possível), a energia de anisotropia tenta encurtar a parede de domínio aumentando o número de spins apontando para o eixo de fácil magnetização. Essa competição entre energia de troca e energia de anisotropia é que determina a largura da parede de domínio.

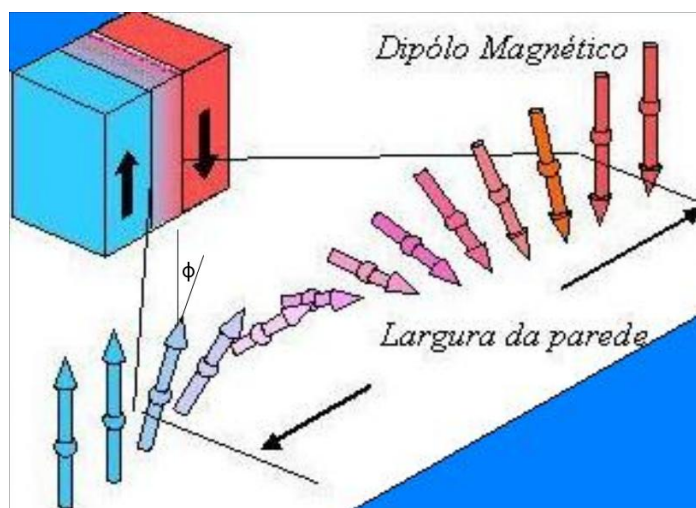


Figura 4.12: *Parede de domínio de 180°.*

4.2.3 Largura de uma Parede de Domínio

A largura de uma parede de domínios pode ser calculada aproximadamente como a seguir. A energia de troca entre um par de átomos, cada um com spin S é dado por

$$E_{tr} = -2JS^2 \cos\phi, \quad (4.2)$$

onde J é a integral de troca e ϕ é o ângulo entre os spins. Expandindo $\cos\phi$ em série,

$$\cos\phi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \phi^{2n}}{2n!} = 1 - \frac{\phi^2}{2!} + \frac{\phi^4}{4!} - \frac{\phi^6}{6!} + \dots \quad (4.3)$$

e desprezando termos de quarta ordem e de ordens superiores (pois ϕ é muito pequeno) temos, substituindo em (4.2), teremos

$$E_{tr} = JS^2\phi^2 - 2JS^2. \quad (4.4)$$

O segundo termo é independente do ângulo e tem o mesmo valor na parede e no domínio, podendo assim ser desprezado, então temos,

$$E_{tr} = JS^2\phi^2. \quad (4.5)$$

Lembrando que para um material amorfo não temos uma ordem de longo alcance, mas sim uma ordem de curto alcance, J deve ser substituído por um J_{ef} . Logo, se pensarmos em uma célula com parâmetro de rede a que contenha N átomos, teremos a área por unidade de átomos $A = a^2/N$, e a energia de troca por unidade de área é,

$$E_{tr} = J_{ef}S^2\phi^2 \frac{N}{a^2}. \quad (4.6)$$

Para uma reversão de 180° da parede, fazemos $\phi = \pi/N$ e

$$E_{tr} = J_{ef}S^2 \frac{\pi^2}{Na^2}. \quad (4.7)$$

A energia de anisotropia é da ordem de K vezes o volume da parede, logo a energia de anisotropia por unidade de área da parede, será

$$E_{ani} = KNa = KL_p, \quad (4.8)$$

onde $L_p = Na$ é a largura da parede. A energia por unidade de área total é dada por

$$E = E_{tr} + E_{ani} = \frac{J_{ef}S^2\pi^2}{L_p a} + KL_p, \quad (4.9)$$

Encontrando o mínimo em relação à largura da parede

$$\frac{\partial E}{\partial L_p} = -\frac{J_{ef}S^2\pi^2}{L_p^2 a} + K = 0 \quad (4.10)$$

com isso temos, que

$$L_p = \sqrt{\frac{J_{ef}S^2\pi^2}{Ka}}. \quad (4.11)$$

Substituindo a eq.(4.11) em (4.9) temos, que

$$E = \sqrt{\frac{J_{ef}S^2\pi^2 K}{a}} + \sqrt{\frac{J_{ef}S^2\pi^2 K}{a}} = 2KL_p. \quad (4.12)$$

O mínimo para a energia total ocorre quando a energia de troca e de anisotropia são iguais. A largura de uma parede de domínio é proporcional à raiz quadrada da integral de troca e inversamente proporcional à raiz quadrada da constante de anisotropia. Portanto, em materiais amorfos onde a anisotropia é pequena temos uma diminuição de K , a largura da parede é maior do que em materiais cristalinos.

4.2.4 Parede de Domínio em Nanofitas Macias

Iremos definir aqui uma nanofita ferromagnética com dimensões de comprimento L , largura w , e espessura t ao longo dos eixos \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} respectivamente, com $L \gg w > t$. Como dito anteriormente, a estrutura de uma

parede depende de um equilíbrio entre as energias de troca e de anisotropia. A primeira é minimizada quando os spins estão paralelos um ao outro, já a energia de anisotropia é minimizada quando os spins estão paralelos ao longo do eixo. Em materiais moles, tais como Permalloy, há um domínio da anisotropia de forma e com isso, domínios se encontram ao longo do eixo da fita. Essas paredes que separam os domínios antiparalelos podem ocorrer em duas topologias: *transversal* e *vórtice*.

A parede transversal, fig.(4.13), em que \vec{m} gira continuamente através da parede, e de forma eficiente minimiza a energia de troca, em detrimento da liberdade dos pólos magnéticos em suas extremidades. A energia magnetostática resultante cresce com w e t . Com qualquer um desses aumentos de dimensões, o sistema eventualmente favorece uma estrutura de “fechamento”, tais como a parede de vórtice da fig.(4.14), em que a magnetização se torna um círculo no plano sobre um pequeno núcleo de vórtice perpendicular a este plano. Esta configuração minimiza pólos livres, mas aumenta a energia de troca.

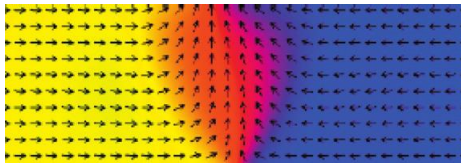


Figura 4.13: *Parede de domínio transversal simétrica.*

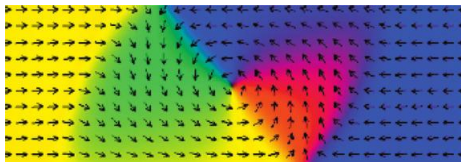


Figura 4.14: *Parede de domínio tipo vórtice.*

Parede transversal simétrica (TWS) são estáveis em fitas finas e estreitas,

mas paredes de domínio tipo vórtice (VW) são preferidas quando qualquer dimensão é aumentada. As modernas técnicas de fabricação de nanoestruturas magnéticas muito tem ajudado nas verificações experimentais de tais estruturas de parede e nas medidas de suas energias relativas [42].

Capítulo 5

Resultados

Neste capítulo apresentaremos nossos resultados obtidos através de simulações computacionais. Foi criado um algoritmo em linguagem Fortran 90 tanto para os trabalhos em nanodiscos quanto nas nanofitas. Em ambos os trabalhos, foram utilizados o método de Monte Carlo Metropolis. Estimamos a intensidade de campo magnético externo limite para que o núcleo do vórtice não se desprendesse da região de um anel de impurezas, inserido em um nanodisco. Nas nanofitas, variando a espessura e a largura de uma nanofita de comprimento fixo, fizemos um diagrama de fase, porém com uma metodologia diferente do que se encontra em outras referências.

5.1 Nanodisco com Anéis de Impurezas

Como dito anteriormente, nosso trabalho foi dividido em duas partes. A primeira é baseada em controle do núcleo do vórtice através de campo magnético externo, \vec{B}^{ext} , aplicado paralelamente a um nanodisco de Permalloy. O trabalho dos autores da ref.[45] serve como motivação do nosso trabalho. Usando simulações numéricas, seus autores estudaram o efeito de

um anel de impurezas magnéticas na dinâmica de um nanodisco de Permalloy. Eles verificaram, via método da Dinâmica Molecular, que a inversão de polaridade do núcleo do vórtice pode ser obtida a partir da interação entre impureza e núcleo do vórtice, sob condições peculiares. Neste mesmo trabalho, utilizaram da aplicação de um campo magnético externo para que houvesse o deslocamento do núcleo do vórtice. No entanto, dependendo do campo externo aplicado, o núcleo do vórtice pode sair desta região do anel de impurezas.

Em nosso trabalho, inserimos um anel de impurezas em um nanodisco de Permalloy e variamos tanto a largura quanto o raio do anel de impurezas, a fim de estimar a intensidade do campo externo limite para que o núcleo do vórtice não deixasse essa região do anel de impurezas.

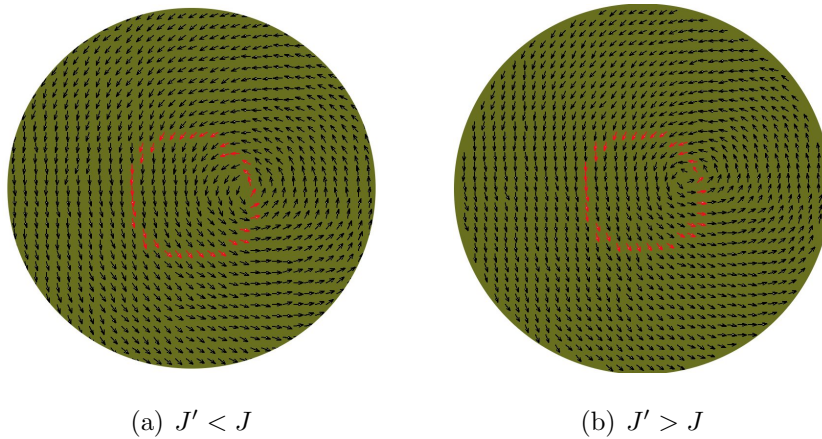


Figura 5.1: Configurações onde o núcleo do vórtice encontra-se na borda do anel de impurezas (de vermelho), após 200000 passos de Monte Carlo. Isso quer dizer que o campo externo aplicado tem um valor menor que o campo limite para que o vórtice seja expulso dessa região. Vemos que em (a) o núcleo do vórtice está preso à borda do anel de impurezas, já em (b) o núcleo do vórtice fica deslocado a uma certa distância da borda do anel

Num primeiro instante, usando técnicas de Monte Carlo Metropolis e a eq.(4.1) com o termo de Zeeman inserido, colocamos um anel de impurezas com raio de 4 parâmetros de rede ($20nm$) e com uma largura de 1 parâmetro

de rede ($5nm$) centrado no nanodisco. Variamos a constante de acoplamento, $J' = 0.0, 0.25, 0.50, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0$. Se voltarmos a seção 4.1.1, veremos que se $J' < J$ a interação entre o vórtice e a impureza é atrativa, e se $J' > J$ a interação entre os dois é repulsiva, estes fenômenos são visualizados na fig.(5.1). Quando o campo magnético externo é menor que o valor do campo limite, o núcleo do vórtice fica preso à região do anel, como mostra a fig.(5.1), essas figuras são apenas representativas, pois estudamos sistemas com dimensões maiores.

Sabemos que, quanto maior for a intensidade do campo aplicado no disco, maior será o deslocamento do vórtice. Com isso, fizemos a diferença dos campos externos para cada J' em relação a $J' = 1.0$, pois este valor consiste de um sistema puro ($J' = J$).

As mesmas simulações anteriores foram realizadas para um nanodisco, porém com um anel de impurezas com largura de 2 parâmetros de rede ($10nm$), como podemos ver uma configuração inicial na fig.(5.2). Suas diferenças de campo limite encontram-se na fig.(5.3). Vemos que para valores de $J'/J < 1$ precisamos de um campo magnético externo mais intenso no sistema cujo o anel de impurezas tem largura de 2 parâmetros de rede do que para o sistema que contém um anel de impurezas com $5nm$ de largura. Porém para valores $J'/J > 1$ o caso se inverte, para que o núcleo do vórtice seja retirado da região dos anéis de impurezas, precisaremos de um campo mais intenso no sistema de um anel impurezas com uma largura de 1 parâmetro de rede. Porém essas diferenças são pequenas.

Em seguida, variamos o raio do anel de impurezas para a metade do raio do nanodisco. As simulações foram as mesmas dos nanodiscos acima. Fizemos simulações também com anéis de impurezas com larguras de 1 e 2 parâmetros de rede e estimamos o campo magnético limite para cada confi-

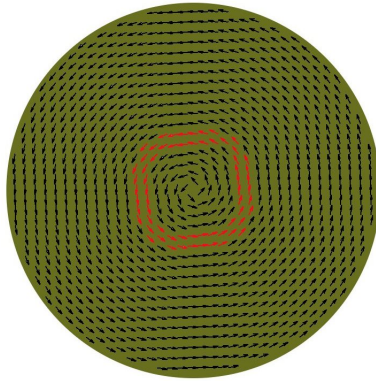


Figura 5.2: *Configuração inicial para um sistema com um anel de impurezas (de vermelho) com largura de 2 parâmetros de rede (10nm).*

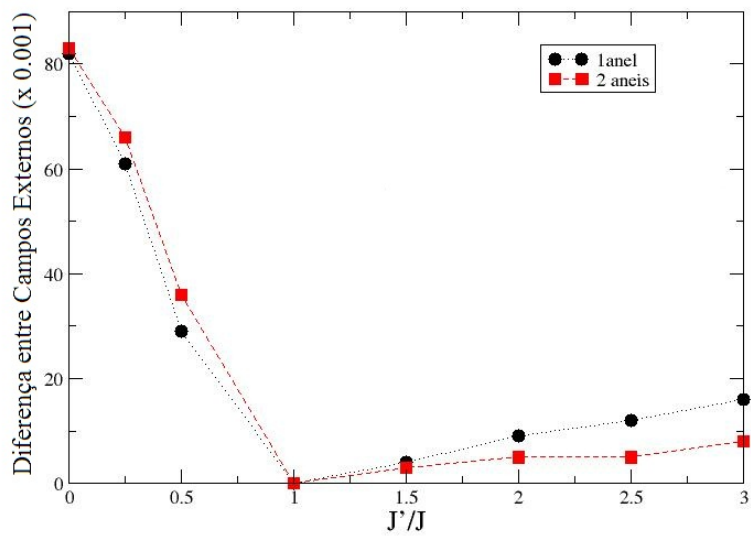


Figura 5.3: *Gráfico com resultados das diferenças dos campos magnéticos externos limite por J'/J para anéis de impurezas com 20nm de raio e larguras de 1 e 2 parâmetros de rede. A unidade dos campos é Tesla[T].*

guração. A fig.(5.4) nos mostra uma configuração de nanodisco com um anel de impurezas com largura de 1 parâmetro de rede, onde $J'/J < 1$ e $J'/J > 1$. Percebemos em que ambos os vórtices, após 200000 passos de Monte Carlo continuam na região do anel de impurezas, mais uma vez isso ocorre devido a intensidade do campo magnético aplicado para este sistema ser menor que a do campo magnético limite.

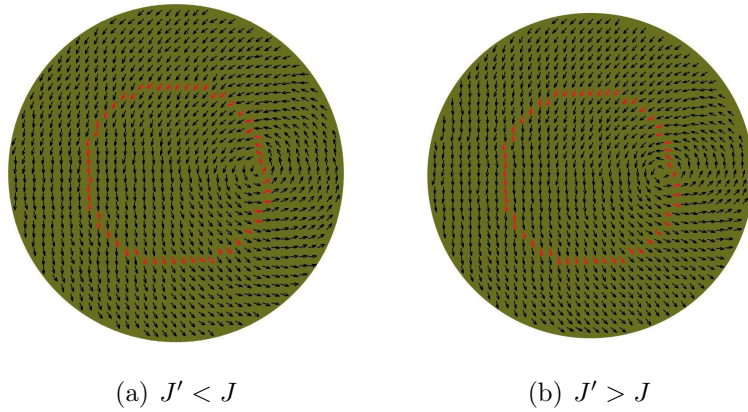


Figura 5.4: Configurações onde o núcleo do vórtice encontra-se na borda do anel de impurezas (de vermelho), cujo raio é a metade do raio nanodisco, após 200000 passos de Monte Carlo. Isso quer dizer que o campo externo aplicado tem um valor menor que o campo limite para que o vórtice seja expulso dessa região. Vemos que em (a) o vórtice está preso à borda do anel de impurezas, já em (b) o vórtice fica deslocado a uma distância da borda do anel

Na fig.(5.5) seguem as diferenças dos campos limites dos sistemas descritos acima. Podemos perceber que para valores de $J'/J < 1$, o valores são praticamente os mesmos para os dois sistemas. Porém, para valores de $J'/J > 1$, essa diferença de campo é maior para o sistema que contém um anel de impurezas com uma largura de 1 parâmetro de rede.

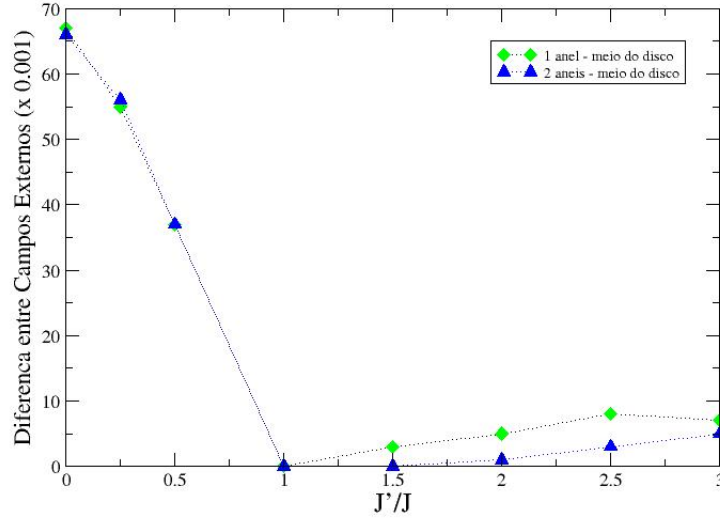


Figura 5.5: Gráfico com resultados das diferenças dos campos magnéticos externos limite por J'/J para anéis de impurezas com larguras de 1 e 2 parâmetros de rede, cujo raio é a metade do raio do nanodisco. A unidade dos campos é Tesla[T].

Dando continuidade, colocamos anéis de impurezas na borda do nanodisco, como podemos ver na fig.(5.6), esta é uma configuração inicial de um nanodisco com um anel de impurezas com 2 parâmetros de rede de largura. Utilizando as mesmas técnicas para os outros sistemas, simulamos sistemas com um anel de impurezas com 2 parâmetros de rede de largura inseridas na borda do nanodisco. Variamos a constante de acoplamento, J' , nos mesmos valores citados anteriormente. Estimamos o valor do campo externo limite para que o vórtice fique dentro do nanodisco, ou seja, sem saturar a magnetização do nanodisco. Assim como os outros, também realizamos a diferença dos campos limites, os resultados encontram-se na fig.(5.7).

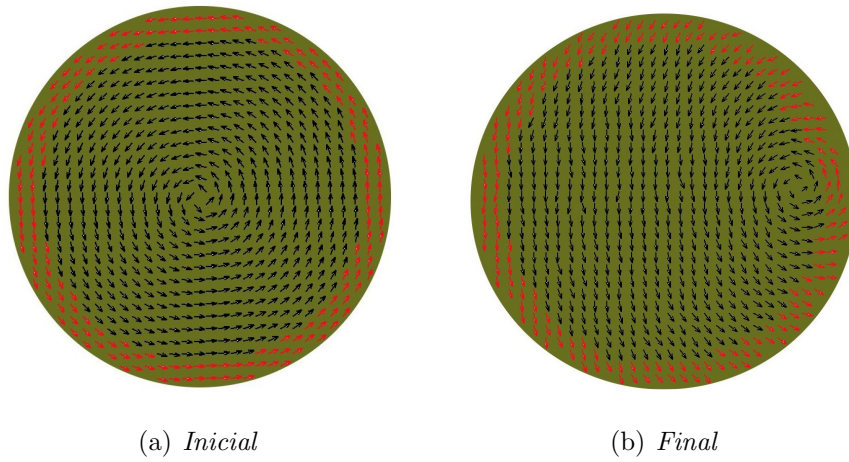


Figura 5.6: Em (a) configuração inicial de um anel de impurezas com largura de 2 parâmetros de rede inserido na borda do nanodisco, e em (b) configuração final após 200000 passos de Monte Carlo.

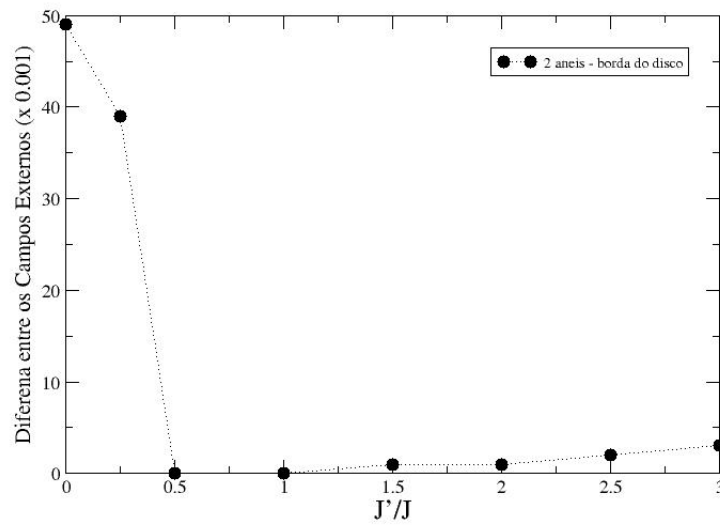


Figura 5.7: Gráfico com resultados das diferenças dos campos magnéticos externos limite por J'/J para um anel de impurezas com largura de 2 parâmetros de rede inserido na borda do nanodisco. A unidade dos campos é Tesla[T].

No geral, quando $J'/J < 1$, a diferença dos campos limites é sempre maior com relação aos valores encontrados para $J'/J > 1$. Porém para o sistema onde o anel de impurezas está inserido na borda do disco, a partir de $J'/J = 0.50$ praticamente não existe essa diferença. Isso pode ocorrer devido a saturação do sistema, tendo em vista que nos outros ainda existe uma interação entre o lado externo do anel de impurezas e o núcleo do vórtice, o sistema ainda não está saturado.

5.2 Nanofitas

Nesta segunda parte realizamos simulações computacionais de nanofitas, cujos detalhes encontram-se na seção 4.2. Consideremos que uma nanofita é definida com o comprimento L , largura w e espessura t ao longo de \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} respectivamente. Nosso trabalho teve como motivação os resultados encontrados nas ref.[44, 46]. Em ambos trabalhos, utilizando Dinâmica Molecular, foram estimadas um diagrama de fase para estruturas de nanofitas de Permalloy, ver fig.(5.8). De acordo com seus autores, para nanofitas muito finas e estreitas a configuração de menor energia é do tipo parede transversa, mas paredes do tipo vórtice são preferidas quando qualquer dimensão da nanofita é aumentada.

Nas simulações realizadas pelos autores das referências citadas acima, além de utilizarem em sua hamiltoniana os termos de Zeeman e de troca, também adicionaram um termo referente a um campo desmagnetizante[44] na direção \hat{z} e outro referente a anisotropias nas direções \hat{x} e \hat{y} .

Já em nosso trabalho, utilizamos a anisotropia magnetostática (ou termo de interação dipolar) em nossa hamiltoniana, onde se considera a interação entre um momento magnético com todos os outros da rede.

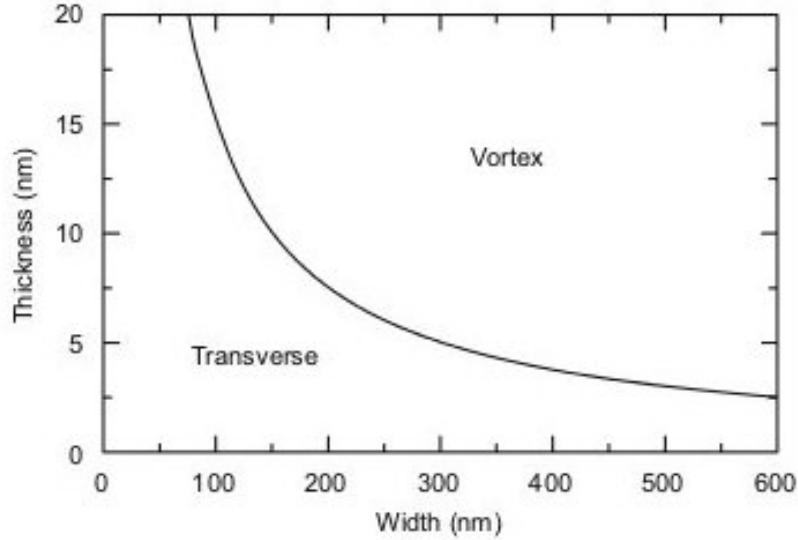


Figura 5.8: Diagrama de fase de uma nanofita, com dois tipos de estruturas, parede de domínio tipo transversa e tipo vórtice. Figura retirada da ref.[44]

Simulamos fitas de comprimento fixo, $L = 1.25\mu m$, com espessuras, $t = 5nm, 10nm$. Para cada espessura variamos a largura da fita, $w = 20nm, 30nm, 40nm, 50nm$. Usamos em nossas simulações o método Monte Carlo Metropolis, com um processo térmico dito recozimento (ou *annealing*), onde as nanofitas iniciam com uma temperatura alta, e gradativamente o sistema é resfriado até uma dada temperatura final. Utilizamos uma temperatura inicial de $T_0 = 0.4$ e resfriamos o sistema até uma temperatura final de $T_F = 0.05$, em intervalos de $\Delta T = 0.05$. Cada temperatura foi realizada com 200000 passos de Monte Carlo.

As dimensões dos sistemas em nossa simulação em comparação com a fig.(5.8), se concentra nas regiões de dimensões bem pequenas em relação ao gráfico, como pode ser visto na fig.(5.9).

Realizamos simulações com 4 configurações iniciais diferentes: nanofita

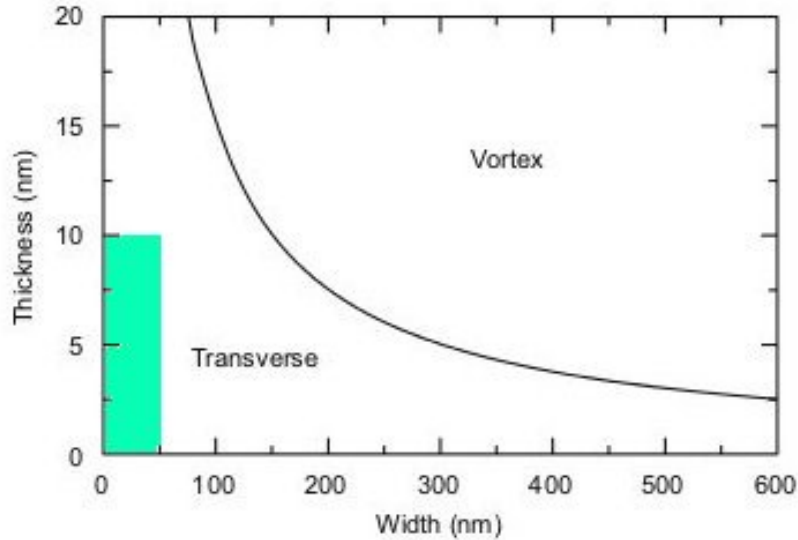


Figura 5.9: Diagrama de fase de uma nanofita, com dois tipos de estruturas, parede de domínio tipo transversa e tipo vórtice. Figura retirada da ref.[44], porém a parte colorida indica as dimensões de nossas simulações.

com momentos magnéticos aleatórios, nanofita com parede de domínio transversa em seu centro, configuração de vórtice localizada no centro da fita e nanofita com estrutura de monodomínio onde os spins estão orientados em uma única direção. Podemos ver uma representação destas 4 configurações iniciais na fig.(5.10). Os tamanhos das fitas foram reduzidas nas figuras para uma melhor visualização.

Como resultado de nossas simulações, todas as configurações iniciais, para todos os sistemas tendem para uma estrutura de monodomínio. Isso quer dizer que para cada sistema simulado, na temperatura final, $T_F = 0.05$, os momentos magnéticos tendem a se alinhar ao longo da fita.

Em algumas simulações, as configurações finais obtidas utilizando o método Monte Carlo Metropolis é a de parede de domínio transversa simétrica. No

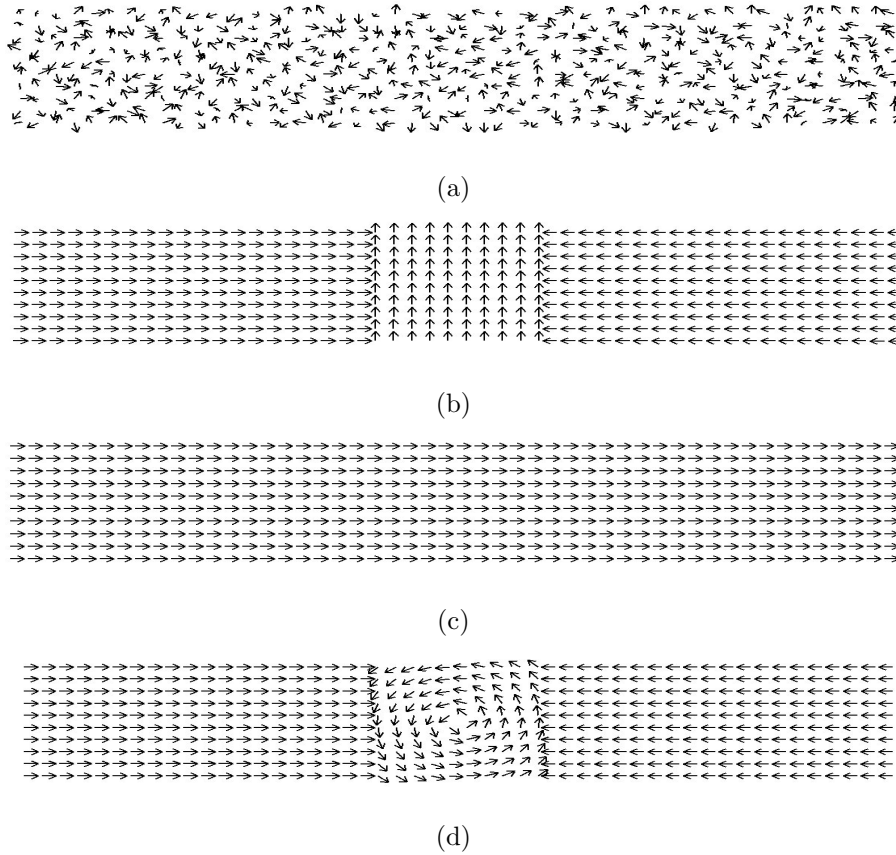


Figura 5.10: Configurações iniciais para simulações de nossas nanofitas. (a) Configuração onde os spins tem orientação aleatório, (b) parede de domínio tipo transversa, (c) configuração de monodomínio e (d) parede tipo vórtice.

entanto, para todos esses estados, as médias das energias por spin na temperatura final em comparação com as médias das energias por spin na temperatura final de uma configuração de monodomínio é sempre de mais alta energia. Podemos concluir que essas configurações finais de parede de domínio são configurações metaestáveis. Abaixo mostramos dois exemplos, ambas para fitas com espessura $t = 5nm$.

largura(w)	Cofiguração Inicial	Energia Média	Configuração Final
30nm	Aleatório	-1.93517 [J]	Parede tipo Transversa
30nm	Monodomínio	-1.93951 [J]	Monodomínio

largura(w)	Cofiguração Inicial	Energia Média	Configuração Final
50nm	Parede tipo Transversa	-2.00130 [J]	Parede tipo Transversa
50nm	Vórtice	-2.00526 [J]	Monodomínio

Na tabela acima vemos que a diferença de energia é muito pequena, da ordem de $10^{-3}eV$. Mesmo variando o número de passos de Monte Carlo de 200000 para 2 milhões continuamos obtendo estes estados metaestáveis, e com a mesma diferença de $10^{-3}eV$.

O diagrama de fases da ref.[44] nos mostra apenas 2 tipos de estruturas de spin que são, paredes de domínio tipo transversa e vórtice. Entretanto, os nossos resultados levam a crer que, nas dimensões estudadas o estado de menor energia é do tipo monodomínio.

Vale ressaltar que não obtivemos resultados para dimensões maiores, devido à memória dos computadores do nosso laboratório e também por questões de limites vetoriais do Fortran 90. Já que nosso programa é vetorizado e utilizamos em nossa hamiltoniana o termo de interação de dipolo-dipolo, onde um spin interage com todos os outros da rede, utilizando assim um número muito grande de memória dos computadores.

Capítulo 6

Conclusão

Com relação aos nanodiscos podemos dizer que, para valores onde $J'/J < 1$, a variação de intensidade de campo em que o vórtice não seja expulso da região do anel é maior do que para valores onde $J'/J > 1$. Entretanto, para o sistema onde colocamos um anel de impurezas com largura de 2 parâmetros de rede na borda do nanodisco, a partir do valor $J'/J = 0.50$ as variações dos campos magnéticos foram pequenas. A diferença das variações dos campos em cada raio estudado com anéis de impurezas com 1 e 2 parâmetros de rede de largura também é pequena. Não realizamos simulações para um anel de impurezas com largura de 1 parâmetro de rede na borda do nanodisco por questões de simulação, pois ficaria um anel incompleto por falta de spins, comprometendo assim nossos resultados.

Para as fitas, concluímos que a configuração de menor energia sempre será a configuração de monodomínio. Vimos que podem ocorrer algumas configurações metaestáveis. Isso ocorre devido ao método de Monte Carlo utilizado que não foi suficiente para que a configuração final deixasse de ser uma parede de domínio transversa simétrica e passasse para uma de monodomínio. Futuramente, com a chegada de novos equipamentos, temos

interesse em estudos de fitas com dimensões maiores, realizando assim uma análise mais completa do diagrama de fases para nanofitas.

Apêndice A

Apêndice

A.1 Interação Dipolo com Campo Magnético

Um meio material magnético pode ser modelado por uma distribuição contínua de dipolos magnéticos com densidade volumétrica dada por:

$$\vec{M}(\vec{r}) = \frac{d\vec{m}}{dV}, \quad (\text{A.1})$$

onde $d\vec{m}$ é o momento dipolar magnético líquido no volume dV do material. A quantidade $\vec{M}(\vec{r})$ é a magnetização do material no ponto \vec{r} . O potencial vetorial de um material magnetizado é, portanto, dado por:

$$\begin{aligned} \vec{A}(\vec{r}) &= \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{V'} d^3r' \frac{\vec{M}(\vec{r}') \times (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{V'} d^3r' \vec{M}(\vec{r}') \times \vec{\nabla}' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{V'} d^3r' \frac{\vec{\nabla}' \times \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{V'} d^3r' \vec{\nabla}' \times \left[\frac{\vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Aplicando a identidade vetorial

$$\int_V \nabla' \times \vec{F} dV' = - \oint_S \vec{F} \times dS' \quad (\text{A.3})$$

à segunda parcela da eq.(A.1), tem-se,

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{V'} d^3r' \frac{\vec{\nabla}' \times \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \frac{\mu_0}{4\pi} \oint_S dS' \frac{\vec{M}(\vec{r}') \times \hat{n}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (\text{A.4})$$

Definamos então,

$$\begin{aligned} \vec{J}_M(\vec{r}') &= \vec{\nabla}' \times \vec{M}(\vec{r}'), \\ \vec{j}_M(\vec{r}') &= \vec{M}(\vec{r}') \times \hat{n}', \end{aligned}$$

onde \vec{J}_M é a densidade de corrente de magnetização dentro do material magnetizado e \vec{j}_M é a densidade de corrente superficial na superfície do material magnetizado. Logo,

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{V'} d^3r' \frac{\vec{J}_M(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \frac{\mu_0}{4\pi} \oint_{S'} dS' \frac{\vec{j}_M(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (\text{A.5})$$

Assim, um material magnetizado é equivalente a uma distribuição de corrente \vec{J}_M interna ao material e uma corrente superficial \vec{j}_M .

Dentro do material magnetizado, portanto, temos:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{B}(\vec{r}) &= \mu_0 \left[\vec{J}(\vec{r}) + \vec{J}_M(\vec{r}) \right] \\ &= \mu_0 \left[\vec{J}(\vec{r}) + \vec{\nabla} \times \vec{M}(\vec{r}) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

ou seja

$$\vec{\nabla} \times \left[\frac{\vec{B}(\vec{r})}{\mu_0} - \vec{M}(\vec{r}) \right] = \vec{J}(\vec{r}). \quad (\text{A.7})$$

Definimos o campo intensidade magnética por:

$$\vec{H}(\vec{r}) = \frac{\vec{B}(\vec{r})}{\mu_0} - \vec{M}(\vec{r}) \quad (\text{A.8})$$

e a Lei de Àmpere agora fica:

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}) = \vec{J}(\vec{r}), \quad (\text{A.9})$$

onde \vec{J} é a densidade de corrente livre, sobre a qual em geral temos controle, enquanto que não temos controle direto sobre \vec{J}_M .

Definido um novo campo \vec{H} dado pela eq.(A.8), vemos também que sua unidade é o Ampère/metro, como a de \vec{M} . As fontes de \vec{H} são apenas as correntes livres. Por outro lado,

$$\text{div} \vec{H} = -\text{div} \vec{M} \quad (\text{A.10})$$

de forma que as linhas de \vec{H} não são fechadas, como as de \vec{B} , se \vec{M} não é homogêneo (ou se é descontínuo, como ocorre na interface entre um meio magnetizado e o vácuo).

Se tivermos um meio magnético linear, homogêneo e isotrópico, a magnetização \vec{M} é proporcional ao campo \vec{B} (ou, equivalente, \vec{H}) no interior do meio, dado como,

$$\vec{M} = \chi_m \vec{H} \quad (\text{A.11})$$

onde χ_m é a susceptibilidade magnética do meio. Temos então que

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) = \mu_0(1 + \chi_m)\vec{H} \equiv \mu\vec{H} \quad (\text{A.12})$$

onde

$$\mu = \mu_0(1 + \chi_m) \quad (\text{A.13})$$

A constante material μ chama-se *permeabilidade magnética* do meio. Em particular, no vácuo, $\mu = \mu_0$; por isso chamamos μ_0 de *permeabilidade magnética do vácuo*

Os materiais magnéticos lineares são de dois tipos, *diamagnéticos* ($\mu < \mu_0, \chi_m < 0$) e *paramagnéticos*, ($\mu > \mu_0, \chi_m > 0$). Em ambos os casos,

$|\chi_m| \ll 1$: valores típicos são da ordem de 10^{-3} e 10^{-5} [43], ou seja, tratam-se de efeitos muito pequenos; a polarização de dielétricos é muito mais forte (comparativamente), do que a magnetização destes materiais. Isso implica que $\mu \approx \mu_0$ e $\vec{B} \approx \mu_0 \vec{H}$.

Efeitos fortes são encontrados apenas para materiais *ferromagnéticos*, mas estes são não-lineares, o que equivale a dizer que χ_m e μ variam com \vec{B} .

A.2 Cálculo das equações de Movimento

Pode-se estudar a evolução dos momentos magnéticos, utilizando a seguinte hamiltoniana:

$$H = - \sum_{i \neq j} J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + D \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{|r_{ij}|^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^5} \right] - \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \cdot \vec{B}, \quad (\text{A.14})$$

onde \vec{S}_i é o momento magnético do sítio i , \vec{S}_j é o spin do sítio vizinho j e r_{ij} é a distância entre o sítio i e o sítio j , \vec{B} é o campo externo aplicado ao sistema.

Abaixo escrevemos os resultados obtidos teoricamente, onde utiliza-se a eq.(3.10), fazendo $\vec{M} = \vec{S}$, que é o momento de spin.

Para o termo de energia de troca teremos as seguintes equações de movimento:

$$\frac{dS_{itroca}^x}{dt} = J \sum_{ij} (S_i^z S_j^y - \lambda S_i^y S_j^z)$$

para a componente na direção x ;

$$\frac{dS_{itroca}^y}{dt} = J \sum_{ij} (\lambda S_i^x S_j^z - S_i^z S_j^x),$$

para a componente na direção y ;

$$\frac{dS_{itroca}^z}{dt} = J \sum_{ij} (S_i^y S_j^x - S_i^x S_j^y),$$

para a componente na direção z ;

sendo λ a constante de anisotropia, e como podemos perceber, sempre está ao lado da componente z do spin vizinho.

Para o termo de Energia de interação Dipolo-Dipolo:

$$S_{eff} = S_j^x r_{ij}^x + S_j^y r_{ij}^y + S_j^z r_{ij}^z, \quad (\text{A.15})$$

sendo S_{eff} o produto escalar $(\vec{S}_j \cdot r_{ij})$ e r_{ij}^x , r_{ij}^y e r_{ij}^z as componentes do vetor unitário da distância entre o sítio estudado (i) e seu vizinho (j). Assim, podemos escrever as componentes de \vec{B}_{eff} como:

$$\begin{aligned} \mathbb{B}_{eff}^x &= D \sum_{ij} (S_j^x - 3r_{ij}^x S_{eff}) / |\mathbf{r}_{ij}|^3 \\ \mathbb{B}_{eff}^y &= D \sum_{ij} (S_j^y - 3r_{ij}^y S_{eff}) / |\mathbf{r}_{ij}|^3 \\ \mathbb{B}_{eff}^z &= D \sum_{ij} (S_j^z - 3r_{ij}^z S_{eff}) / |\mathbf{r}_{ij}|^3 \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Por fim, utilizando as equações acima, chegamos nas expressões que definem $\frac{dS_{iDip}^x}{dt}$, $\frac{dS_{iDip}^y}{dt}$ e $\frac{dS_{iDip}^z}{dt}$:

$$\begin{aligned} \frac{dS_{iDip}^x}{dt} &= \sum_i (S_i^y \cdot \mathbb{B}_{eff}^z - S_i^z \cdot \mathbb{B}_{eff}^y) \\ \frac{dS_{iDip}^y}{dt} &= \sum_i (S_i^z \cdot \mathbb{B}_{eff}^x - S_i^x \cdot \mathbb{B}_{eff}^z) \\ \frac{dS_{iDip}^z}{dt} &= \sum_i (S_i^x \cdot \mathbb{B}_{eff}^y - S_i^y \cdot \mathbb{B}_{eff}^x) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Para o termo de Energia de Zeeman teremos para cada componente:

$$\begin{aligned}
\frac{dS_{iZee}^x}{dt} &= \sum_i S_i^z B_y - S_i^y B_z \\
\frac{dS_{iZee}^y}{dt} &= \sum_i S_i^x B_z - S_i^z B_x \\
\frac{dS_{iZee}^z}{dt} &= \sum_i S_i^y B_x - S_i^x B_y
\end{aligned} \tag{A.18}$$

sendo B_x , B_y e B_z as respectivas componentes de campo magnético aplicado em nosso sistema.

Para evoluir cada passo no tempo, temos que somar as componentes de cada termo das equações encontradas para a interação de troca, interação Dipolo-Dipolo e energia de Zeeman, e por fim, integrá-las no tempo, para isso pode-se utilizar um método de passo múltiplo muito eficaz denominado Preditor-Corretor.

Referências Bibliográficas

- [1] S. M. REZENDE, *Rev. Bras. Ens. Fís.* 22, 293 (2000);
- [2] M. E. EVANS AND F. HELLER, *Environmental Magnetism: Principles and Applications of Enviromagnets*, Academic Press, San Diego (2003);
- [3] A. K. SALEM, P. C. SEARSON, K. W. LEONG, *Nat. Mater.* 2, 668 (2003);
- [4] K. M. KRISHNAN, A. B. PAKHOMOV, Y. BAO, P. BLOMQUIST, Y. CHUN, M. GONZALEZ, K. GRIFFIN, X. JI, B. K. ROBERTS, *J. Mater. Sci.* 41,793(2006);
- [5] D. H. KIM, et., *Nature Mat.* 9, 165(2010);
- [6] J. I. MARTIN, et al., *J. Magn. Magn. Mater.* 256, 449 (2003);
- [7] J. C. S. ROCHA; Um Estudo de Nano-partículas Magnéticas via Simulação Computacional; tese de doutorado; UFMG, (2011);
- [8] M. SCHNEIDER, H. HOFFMAN, AND J. ZWECK, *Appl. Phys. Lett.* 77, 2909 (2000);
- [9] R. PULWEY, M. RAHM, J. BIBERGER, and D. WEISS, *IEEE Trans. Magn.* 37, 2076(2001);

- [10] R. P. COWBURN, D. K. KOLSTOV, A. O. ADEYEYE, M. E. WEL-
LAND, AND D. M. TRICKER, *Phys. Rev. Lett.* 83, 1042 (1999);
- [11] T. UHLIG et al., *Phys. Rev. Lett.* 95, 237205 (2005);
- [12] R. L. COMPTON and P. A. CROWELL, *Phys. Rev. Lett.* 97, 137202
(2006);
- [13] C. A. ROSS et al., *J. Appl. Phys.* 89, 1310 (2001);
- [14] J. RAABE, R. PULWEY, A. SATTLER, T. SCHWEINBOCK, J.
ZWECK AND D. WEISS, *J. Appl. Phys.* 88, 4437 (2000);
- [15] W. K. HIEBERT, A. STANKIEWICZ, AND M. R. FREEMAN, *Phys.*
Rev. Lett. 79, 1134 (1997);
- [16] K. W. CHOU et al., *Appl. Phys. Lett.* 90, 202505 (2007);
- [17] S. D. BADER, *Surf. Sci.* 500, 172(2001);
- [18] S. D. BADER, *Rev. Mod. Phys.* 78, 1 (2006);
- [19] M. KNOBEL, W. A. A. MACEDO, *Física na Escola* 8, 33 (2007);
- [20] S. A. WOLF, D. D. AWSCHALOM, R. A. BHURMAN, J. M. DAUGH-
TON, S. VON MOLNÁR, M. L. ROUKES, A. Y. CHTCHELKA-
NOVA, AND D. M. TREGÉ, *Science* 294, 1488 (2001);
- [21] M. TEHRANI, E. CHEN, M. DURLAM, M. DE HERRERA, J. M.
SLAUGHTER, J. SHI, AND G. KERZYDOWSKI, *J. Appl. Phys.* 85,
5822 (1999);
- [22] J. H. SILVA; Estudo via Simulação Computacional do Efeito de Im-
purezas no Modo Girotrópico em Nanodisco Magnético; dissertação de
mestrado; UFJF, (2011);

- [23] S. S. P. PARKIN et al., *J. Appl. Phys.* 85, 5828 (1999);
- [24] BUSCHOW, K.; BOER, F. *Physics of Magnetism and Magnetic Materials*. [S.l.]: Kluwer Academic Publishers, (2003);
- [25] K. D. MACHADO. *Teoria do Eletromagnetismo*. vol II, UEPG, (2002);
- [26] NOLTING, W.; RAMAKANTH, A. *Quantum Theory of Magnetism*. [S.l.]: Springer, (2009);
- [27] SALINAS, S. *Introdução a Física Estatística*. [S.l.]: EDUSP, (1999);
- [28] CHAPMAN, J. N.; AITCHISON, P. R. ;KIRK, K. J.; MCVITIE, S.; KOOLS, J. C. S.; GILLIES, M. F 5828(1999);
- [29] N. A. USOV AND S. E. PESCHANY, *J. Magn. Magn. Mater.* 118, L290 (1993);
- [30] M. R. BRAGA; *Estudo de filmes magnéticos ultrafinos e pelo método de Monte Carlo; dissertação de mestrado; UFMG,2006.*
- [31] WYSIN, G. M. Vortex-in-nanodot potentials in thin circular magnetic dots. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 22, n. 376002, (2010);
- [32] BERTOTTI, G.; *Hysteresis in Magnetism for Physicists, Materials Scientists and Engineers*. [S.l.]: Academic Press, (1998);
- [33] D.TOSCANO, "Estudo via Simulação Computacional da Formação de Vórtice e do Modo Girotrópico em Nanodiscos", *Dissertação de Mestrado, UFJF (2011);*
- [34] CHOE, S. B.; PADMORE, H. A.; STOHR, J. Vortex core-driven magnetization dynamics. *Science* v. 304, p. 420, (2004);

- [35] PARK, J.; EAMES, P.; CROWELL, P. Imaging of spin dynamics in closure domain and vortex structures. *Physical Review B*, v. 67, n. 020403, (2003);
- [36] STOLL, H.; PUZIC, A.; WEISS, D. High-resolution imaging of fast magnetization dynamics in magnetic nanostructures. *Applied Physics Letters*, v. 84, n. 17, (2004);
- [37] GUSLIENKO, K.; LEE, K.-S.; KIM, S.-K. Dynamics origin of vortex core switching in soft magnetic nanodots. *Physical Review Letters*, v. 100, n. 027203, (2008);
- [38] T. S. MACHADO; *Portas Lógicas Magnéticas*, CBPF, Rio de Janeiro, Fevereiro, (2006);
- [39] R. L. DA SILVA; *Dinâmica de Spins na Presença Defeitos em Estruturas Magnéticas Confinadas: Aplicações a Nanodiscos Magnéticos*; Tese de Pós Graduação; UFV, (2009);
- [40] A.R. PEREIRA, L. A. S. MÓL, S. A. LEONEL, P. Z. COURA, AND B. V. COSTA, *Phys. Rev. B*. 68, 132409 (2003);
- [41] D. TOSCANO, S. A. LEONEL, R. A. DIAS, P. Z. COURA, AND B. V. COSTA; Vortex Core and Pinning by Impurities in Nanomagnets. *Journal of Applied Physics* 109, 0761104 (2011);
- [42] M. LAUFENGERG, et al., *Appl. Phys. Lett.* 88 (2006) 052507;
- [43] H. MOYSÉS NUSSENZVEIG, *Curso de Física Básica Eletromagnetismo*, vol. 3; Rio de Janeiro, (1997);

- [44] G. S. D. BEACH, M. TSOI, J. L. ERSKINE; Current-induced domain wall motion, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 320 (2008) 1272-1281;
- [45] D. TOSCANO, S. A. LEONEL, F. SATO, R. A. DIAS, P. Z. COURA, AND B. V. COSTA; Dynamics of the vortex core in magnetic nanodisks with a ring of magnetic impurities. *Applied Physics Letters* 101, 252402 (2012);
- [46] Y. NAKATANI, A. THIAVILLE, J. MILTAT; Heat-to-Heat domain walls in soft nano-strips: a refined phase diagram. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 290-291 (2005) 750-753.