

6/99

TESE DE
DOUTORADO

RELAXAÇÃO DA MAGNETIZAÇÃO
E FORMAÇÃO DE DOMÍNIOS
MAGNÉTICOS EM FILMES FINOS

FORTUNATO S. DE MENEZES

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

RIO DE JANEIRO, JANEIRO DE 1999

RELAXAÇÃO DA MAGNETIZAÇÃO E
FORMAÇÃO DE DOMÍNIOS MAGNÉTICOS EM



1999/06

M543

020932

AGRADECIMENTOS

- À Luiz Sampaio pela amizade desde a época da graduação e Mestrado, orientação, incentivo e mudança do projeto de tese.

- À Evaldo Curado pelas discussões sobre o projeto original em redes neuronais.

- Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela bolsa concedida.

- Aos Amigos do CBPF/DMF, Ladário da Silva, José Arnaldo Redinz, Crisógono, Carmem Ochi, Isaias de Oliveira, Andres Papa, Pedro Santoro, Francisco Tamarit, Luciano da Silva, que durante minha estada contribuíram para um ambiente de cooperação e amizade.

- Ao grupo de Mecânica Estatística do CBPF/DMF pelo acesso a sala e máquinas do departamento.

- A Wanda Wood e Miriam Simões Coutinho pela amizade e presteza com que sempre nos trataram.

- A Marcio Albuquerque e todo pessoal do CAT, pela presteza com que sempre nos atenderam.

- Aos Amigos e colegas da Universidade Federal de Lavras pela convivência e companheirismo.

RESUMO

Neste trabalho simulamos a relaxação magnética e a formação de domínios em filmes ultrafinos com forte anisotropia perpendicular ao plano do filme. Utilizamos a técnica de simulação de Monte Carlo no modelo de Ising bi-dimensional incluindo a interação de dipolo-dipolo de longo alcance e um campo magnético externo. Estudamos o processo de relaxação da magnetização e o efeito da intensidade da interação de dipolo-dipolo. Verificamos dois comportamentos distintos da relaxação: (1) nucleação de muitos domínios em pontos distintos da rede para α (intensidade da interação dipolo-dipolo) maior que um valor crítico $\alpha > \alpha_c$ ($\alpha_c \sim 0.37$), caracterizado por um decaimento **temporal tipo lei de potência da magnetização** e (2) nucleação de **poucos** domínios, cujas paredes se expandem rapidamente no processo de relaxação para $\alpha < \alpha_c$, caracterizado por um **decaimento exponencial com o tempo da magnetização**. Em ambos os casos o sistema relaxa em direção ao estado fundamental que corresponde a uma estrutura em forma de listras, cuja largura depende da intensidade da interação dipolar. Obtivemos também com este modelo, a energia de nucleação dos domínios em função de α para $\alpha < \alpha_c$. Os resultados obtidos com o modelo foram comparados com resultados experimentais. Neste contexto, explicamos a dinâmica de formação de domínios através de propriedades magnéticas do modelo microscópico sem entrar em detalhes das propriedades estruturais do filme; como por exemplo, espessura do filme, deformações da rede, rugosidade interfacial, etc.

Na segunda parte utilizamos uma variação do modelo acima (mudamos o alcance da interação dipolo-dipolo) para testar uma conjectura proposta na estatística de Tsallis, com relação à não extensividade nas funções termodinâmicas que surge em sistemas, onde a razão do alcance das interações (valores decrescentes de α) e a dimensão(d) do sistema é menor que um certo valor crítico - ($\alpha/d < 1$).

ABSTRACT

We have simulated the magnetic relaxation and the formation of magnetic domains in very thin films with anisotropy perpendicular to the film plane. We have used Monte Carlo simulation on a two-dimensional classical Ising model on a square lattice including the long-range dipole-dipole interaction and an external magnetic field. We studied the magnetic relaxation process and the effect of the dipole-dipole interaction in that system. We have verified two distinct behaviors on the relaxation process: (1) The nucleation of *many* domains at random points of the lattice for α (the intensity of dipole-dipole interaction) greater than a critical value ($\alpha > \alpha_c$; $\alpha_c \sim 0.37$), characterized by a **power law decay on time of the magnetization** and (2) the nucleation of *few* domains, followed by a rapid growth of domain size for $\alpha < \alpha_c$, characterized by a **exponential decay on time of magnetization**. In both cases, the system relaxes towards a ground state signed by a striped structure, which width depends on the intensity of the dipole-dipole interaction. We have also obtained using this model, the energy for domain nucleation as a function of α for $\alpha < \alpha_c$. The results obtained with this model were compared with direct experiments. In this context, we were able to explain the dynamics of domain formation through the magnetic properties of the microscopic model, without the details of structural properties of the film; for example, film thickness, lattice mismatch, interfacial roughness, etc.

In the second part of this work, we used a variation of the model (we change the range of the long-range dipole-dipole interaction) to test Tsallis's conjecture, concerning to the non-extensivity of the thermodynamic functions which arises in systems, where ratio of the range of interactions (parameter α) and the dimension d of the system is lower than a critical value - ($\alpha/d < 1$).

Índice

Agradecimentos	i
Resumo	ii
Abstract	iii
Índice	iv
Lista de figuras	vii
1 Introdução	1
2 Filmes finos magnéticos e formação de domínios	5
2.1 Introdução	5
2.2 Domínios magnéticos e anisotropia em filmes finos	6
2.3 Conclusão	18
3 Método Monte Carlo (MC)	20
3.1 Introdução	20
3.2 Método Monte Carlo	20
3.3 Amostragens simples e ponderadas	21
3.4 O algoritmo	24
3.4.1 Cadeia de Markov	27
3.4.2 Equação Mestre	28
3.5 Conclusão	30
4 Relaxação da magnetização e formação de domínios magnéticos em	

filmes finos com anisotropia perpendicular	31
4.1 Introdução	31
4.2 Hamiltoniana	35
4.3 Dinâmica da relaxação magnética	38
4.4 Dependência da relaxação magnética com α e a temperatura (T)	47
4.5 Energia de nucleação dos domínios	49
4.6 Histerese Magnética	52
4.7 Dinâmica da formação e crescimento dos domínios magnéticos	53
4.8 Aspectos geométricos da relaxação: Dependência com relação a α e campo magnético	55
4.9 Forma e geometria dos domínios: comparação com dados experimentais	59
4.10 Resumo e conclusão	62
5 O efeito do alcance das interações em sistemas magnéticos	67
5.1 Introdução	67
5.2 Breve introdução à estatística de Tsallis	69
5.3 Não extensividade em sistemas magnéticos	71
5.4 Modelo	73
5.5 Resultados: Curvas de magnetização vs. campo aplicado $m = m(T, H)$	74
5.5.1 $m = m(T, H)$: regime extensivo ($\alpha/d > 1$: $\alpha = 3$ e $d = 2$)	75
5.5.2 $m = m(T, H)$: limite regime extensivo/não-extensivo ($\alpha/d = 1$: $\alpha = 2$ e $d = 2$)	76
5.5.3 $m = m(T, H)$: regime não extensivo : ($\alpha/d < 1$: $\alpha = 1$ e $d = 2$)	77
5.5.4 Curvas de magnetização $m = m(T^*, H^*)$ vs. campo aplicado reescalado H^* , com temperatura reescalada T^*	77
5.5.5 Comparação do resultado analítico com $\alpha = 1$ e simulação	79
5.6 Conclusões	79
Conclusões	86

Lista de Figuras

2.1 (a) Uma amostra com um único domínio com um grande campo magnético local. A “auto-energia” magnetostática é armazenada neste campo. (b) Uma amostra é dividida em dois domínios a fim de reduzir a “auto-energia” magnetostática. As linhas indicam a direção da magnetização dentro de cada domínio. A auto-energia magnetostática armazenada no campo externo agora é menor, comparada com (a). (c) Uma amostra separada dentro de quatro domínios. Os domínios fechados nos finais da amostra asseguram um campo local nulo e uma “auto-energia” magnetostática zero. 7

2.2 Curva de histerese magnética de uma amostra magnética. M é a magnetização e H é a intensidade do campo externo aplicado. H_s é o campo de saturação para o qual a magnetização satura. M_r (magnetização remanente) é a magnetização a campo nulo e H_c é o campo coercivo; campo necessário para reduzir a magnetização a zero. 8

2.3 Diagrama esquemático de uma parede de domínio. O ângulo entre os momentos magnéticos adjacentes é $\phi = \pi/N$ 11

2.4 (a) Diagrama esquemático de um único domínio magnético em filme fino com magnetização paralela ao plano do filme. (b) Diagrama esquemático de um filme fino com eixo fácil de magnetização perpendicular ao plano do filme, separado em vários domínios. t é a espessura, L é o comprimento e W a largura da amostra. 13

2.5	Imagem de domínios magnéticos de 3 monocamadas de um filme de Co sobre Au(111). extraído de Allenspach <i>et al.</i> (1993).	15
2.6	Curvas de magnetização para multicamadas de Fe/Ag. extraído de Barthelemy <i>et al.</i> (1992).	17
2.7	A energia de anisotropia uniaxial vezes a espessura da camada de Co graficada versus a espessura do Co para multicamadas de Co/Pd. Conjuntos de dados são para diferentes orientações cristalográficas de Co/Pd. (extraído de Engel <i>et al.</i> (1991).)	18
3.1	Ilustração da integral de $f(x)$ por uma amostragem simples . A função de distribuição $p(x)$ é constante em todo o intervalo.	22
3.2	Ilustração da integral de $f(x)$ por uma amostragem ponderada . A função de distribuição $p(x)$ varia e “imita” a função $f(x)$	23
4.1	Evolução temporal de estrutura de domínio para amostra de Au/Co/Au com campo aplicado.	33
4.2	Estado fundamental da relaxação de momentos magnéticos interagindo com uma hamiltoniana dipolo-dipolo.	34
4.3	Padrão de domínio durante a relaxação magnética. Fig. 8 de Sampaio et al. '96.	40
4.4	Relaxação magnética de um sistema de 64×64 momentos magnéticos. Fig. 3 de Sampaio et al. '96.	42
4.5	Relaxação magnética para diferentes valores de α . Fig. 1 de Sampaio et al. '96.	44
4.6	Configurações de padrões de domínios correspondente à Fig. 4.5	45
4.7	Gráfico de $\ln \tau$ vs. $1/T'$. Fig. 4 de Sampaio et al. '96.	47
4.8	Gráfico da energia de nucleação vs. α em escala log-log. Fig. 5 de Sampaio et al. '96.	49

4.9	Dependência do tempo de relaxação com o tamanho do sistema. Fig. 6 de Sampaio et al. '96	51
4.10	Histerese magnética para diferentes valores de α . Fig. 7 de Sampaio et al. '96.	52
4.11	Energia de relaxação relativa ao estado fundamental em escala log-log, para as mesmas condições que Fig. 4.3. Fig. 9 de Sampaio et al. '96.	53
4.12	Evolução das bordas para valores disntintos de campo magnético aplicado (h).	55
4.13	Relaxação da magnetização para alguns valores de α e campo aplicado (h).	56
4.14	Curvas de histerese medidos por VSM para subcamadas de Co de diferentes espessuras. Fig. 1 de Sug-Bong <i>et al.</i> '98.	63
4.15	Observação direta de padrões de domínios vs. tempo para diferentes subcamadas de Co/Pd. Fig. 2 Sug-Bong <i>et al.</i> '98.	64
4.16	Curvas de viscosidade magnética para diferentes campos aplicados (h).Fig. 3 Sug-Bong <i>et al.</i> '98.	65
4.17	Magnetização fora do plano vs. tempo e tempo de relaxação para uma amostra de Fe/Ag(100). Fig. 2 - Berger <i>et al.</i> '96.	66
5.1	Curvas de magnetização em função do campo magnético para redes de tamanhos 32x32(\square), 48x48(\triangle), e 64x64(*) spins para a interação dipolo-dipolo usual ($\alpha = 3$) para a temperatura $T=0.3$	75
5.2	Curva de magnetização em função do campo magnético para $\alpha = 2$ na temperatura $T = 0.3$ para redes de tamanho 32x32(\square), 48x48(\triangle), e 64x64 (*).	76
5.3	Curva de magnetização em função do campo magnético para $\alpha = 1$ na temperatura $T = 0.3$ para redes de tamanho 32x32(\square), 48x48(\triangle), e 64x64 (*).	80

- 5.4 Curva de magnetização em função do campo magnético para $\alpha = 2$ na temperatura $T^* = 0.3$ para redes de tamanho $32 \times 32 (\square)$, $48 \times 48 (\triangle)$, e $64 \times 64 (*)$ ($T_{\square} = 2.08$, $T_{\triangle} = 2.32$, e $T_* = 2.49$). 81
- 5.5 Curva de magnetização em função do campo magnético para $\alpha = 1$ na temperatura $T^* = 0.3$ para redes de tamanho $32 \times 32 (\square)$, $48 \times 48 (\triangle)$, e $64 \times 64 (*)$ ($T_{\square} = 18.6$, $T_{\triangle} = 28.2$, e $T_* = 37.8$). 82
- 5.6 Curvas de magnetização em função das variáveis H^* para $T^* = 0.3$ para valores **abaixo e acima de $\alpha/d = 1$** ($\alpha = 1, 1.5, 2, 3$ e 4), $T_{\square}(\alpha = 1)$, $T_{\triangle}(\alpha = 1)$, $T_*(\alpha = 1)$ são os mesmos como na Fig. 5.5; ($T_{\square}(\alpha = 1.5) = 5.58$, $T_{\triangle}(\alpha = 1.5) = 7.11$, e $T_*(\alpha = 1.5) = 8.4$); ($T_{\square}(\alpha = 2)$, $T_{\triangle}(\alpha = 2)$, e $T_*(\alpha = 2)$ são os mesmos que indicados na Fig. 5.4); $T_{\square}(\alpha = 3) = 0.49$, $T_{\triangle}(\alpha = 3) = 0.51$, e $T_*(\alpha = 3) = 0.52$; $T_{\square}(\alpha = 4) = T_{\triangle}(\alpha = 4) = T_*(\alpha = 1.5) = 0.29$, (símbolos como na Fig. 5.1). 83
- 5.7 Curva de susceptibilidade $\chi(\alpha)$ obtida para campos baixos para $T^* = 0.3$ para $1 \leq \alpha \leq 4$. Os valores de $T_{\square}(\alpha)$, $T_{\triangle}(\alpha)$, e $T_*(\alpha)$ são os mesmos como na Fig. 5.6. A linha cheia é uma guia para os olhos. 84
- 5.8 Curva de magnetização em função do campo magnético reescalado ($H/(J 2^{\alpha} C_{\alpha}) N$) para $\alpha = 1$ na temperatura $T^* = 0.3$ para redes de tamanho $32 \times 32 (\square)$, $48 \times 48 (\triangle)$, e $64 \times 64 (\odot)$ ($T_{\square} = 18.6$, $T_{\triangle} = 28.2$, e $T_{\odot} = 37.8$). 85

Capítulo 1

Introdução

Nos últimos anos têm havido um interesse crescente nas propriedades magnéticas de filmes finos. Isto tem sido motivado pelo desenvolvimento de modernas técnicas de fabricação de filmes finos artificiais baseadas em elementos magnéticos (e não somente semicondutores), juntamente com as aplicações práticas baseadas em filmes finos magnéticos; como por exemplo, sensores de campo magnético [1], meios de gravação (fitas cassetes e de vídeo), meios de gravação magneto-ótica [2] e magnetos permanentes pequenos (por exemplo, fones de ouvido), entre outros.

Muitas destas técnicas de fabricação de filmes finos envolvem o uso de sistemas “ultra-high-vacuum” (UHV), nos quais nós podemos crescer filmes finos magnéticos, livres de contaminação e oxidação. Frequentemente, essas camadas são crescidas de forma epitaxial; ou seja, o filme fino ajusta sua constante de rede de forma à coincidir com a constante de rede do substrato e cresce como um filme de “cristal único” orientado. Para facilitar o crescimento epitaxial, substratos são escolhidos tais que suas **constantes de rede e simetria** sejam bem próximas do filme que desejamos crescer. O trabalho pioneiro de Bruck [3] em 1936 envolveu o crescimento de Fe sobre um substrato de NaCl. Isto se deveu

ao fato de a estrutura de rede e simetria do NaCl estarem muito próximas da estrutura de rede e simetria do Fe. Filmes ultrafinos com espessuras que se aproximam de algumas monocamadas representam modelos de sistemas para investigar a Física em sistemas bidimensionais (2D). Um dos assuntos muito estudados neste campo é o ferromagnetismo em dimensões reduzidas. Um outro aspecto interessante está ligado à ocorrência de um estado de monodomínio (ou seja, um único domínio) em filmes finos que seja o estado fundamental; isto nem sempre corresponde ao estado fundamental encontrado. De fato, é observado experimentalmente [52, 23] uma quantidade maior de filmes com estados de muitos domínios; ou seja, estruturas formadas de momentos magnéticos alternantes.

Do ponto de vista de aplicações práticas, multicamadas magnéticas, que são estruturas de camadas alternantes de metais magnéticos distintos, com uma alta anisotropia perpendicular parecem ser uma solução atrativa para aumentar a densidade de informação em meios de gravação magneto-ópticas [2]. Atualmente, sistemas de gravação magnética longitudinal alcançam densidades da ordem de 10 Gbits/polegada², enquanto simulações computacionais baseadas em modos de gravação magnética perpendicular (PRM) preveem densidades da ordem de 300 Gbits/polegada² [Vide Ref.1 de [2]]. Para alcançar a configuração PRM, muitos esforços são concentrados para os materiais magnéticos que exibem uma forte anisotropia magnética uniaxial e perpendicular ao plano do filme. Neste sentido, torna-se essencial controlar as condições de elaboração de tal modo que a direção do eixo de fácil magnetização seja perpendicular ao plano do filme. Recentemente, pesquisas têm sido direcionadas para ligas metálicas binárias que produzem uma anisotropia magnética uniaxial perpendicular ao plano do filme associada com uma transição de fase de ordenamento químico [2]. Neste sentido, camadas magnéticas de PtCo e PtFe com anisotropia magnética perpendicular ao plano do filme tem sido elaboradas [4].

No que concerne as anisotropias magnéticas, verifica-se uma forte discrepância entre as anisotropias magnéticas de superfície e volume em filmes magnéticos. Isto se deve à quebra de simetria na interface superfície/volume do filme. *Isto é de interesse fundamental porque somente sistemas anisotrópicos podem exibir uma ordem ferromagnética de longo-*

alcance em duas dimensões (2D). Neste sentido, filmes ultrafinos com uma anisotropia perpendicular ao plano do filme, poderiam ser modelizados por sistemas bidimensionais (2D). Filmes ultrafinos de Fe/Ag(100) exibem uma anisotropia magnetocristalina com um eixo fácil perpendicular ao plano da superfície [Vide Ref. 4 de [53]]. Além disso, observações **experimentais** do reverso da magnetização em ligas baseadas em Co [Vide Ref.11 de [52]], e sistemas de multicamadas [Ref. 12 a 15 de [52]] tem mostrado dois comportamentos limites do reverso da magnetização: (1) movimento de paredes e (2) processo de nucleação de domínios. A origem destes dois comportamentos distintos ainda permanece em aberto. A maioria dos estudos experimentais explicam que o comportamento do reverso da magnetização como governado por propriedades estruturais tais como: variação estrutural local, espessura do filme, rugosidade interfacial, entre outros. Por outro lado, trabalhos teóricos recentes baseados em simulação magnética em sistemas bi-dimensionais [37, 48, 49] e modelo de Ising com interação de dipolo-dipolo (de Menezes et. al '96) [51] têm mostrado que o comportamento do reverso da magnetização pode ser predito com base em propriedades magnéticas, sem considerar os detalhes da microestrutura do filme.

Neste sentido, a parte central e mais importante deste trabalho (Capítulo 4) é focado, utilizando o método simulação de Monte Carlo no modelo de Ising com interação de dipolo-dipolo de longo alcance, na obtenção de resultados; como por exemplo: (a) relaxação da magnetização com o tempo a campo nulo e diferente de zero; (b) efeito da relaxação com a intensidade da interação de longo-alcance; (c) curvas de magnetização com o campo (efeito de histerese) com relação à intensidade da interação dipolar; (d) efeito de nucleação de domínios em função da intensidade de interação de longo-alcance; (e) energia de nucleação dos domínios e (f) verificação da dinâmica de formação e crescimento dos domínios magnéticos. Comparamos os resultados obtidos através de simulação do modelo proposto com aqueles obtidos através de **experimentos** encontrados na literatura e verificamos a consistência de nossos resultados e conclusões.

Na segunda parte deste trabalho (Capítulo 5) estudamos o efeito do alcance das in-

terações em sistemas magnéticos (utilizando o modelo magnético de Ising com uma interação tipo dipolo-dipolo de alcance variável) com o intuito de investigar o efeito de não extensividade sugerido na estatística de Tsallis. Os resultados foram conclusivos e corroboram a conjectura, já verificada, em outros sistemas (não magnéticos) da relação da não extensividade com a dimensão e o alcance das interações (de Menezes et al. '97) [70].

No capítulo 2, apresentamos uma introdução a filmes finos magnéticos; descrevemos o processo de formação de domínios e o papel que a anisotropia apresenta na formação de domínios magnéticos. No capítulo 3, apresentamos uma introdução ao Método Monte Carlo, os tipos de amostragens mais utilizadas e os tipos de dinâmicas utilizadas. No capítulo 6, apresentamos as conclusões e perspectivas futuras deste trabalho.

Capítulo 2

Filmes finos magnéticos e formação de domínios

2.1 Introdução

Neste capítulo discutiremos as propriedades relevantes na descrição de filmes magnéticos, e a estrutura de domínios nos mesmos. Os detalhes apresentados são de validade geral, incluindo os filmes finos como caso particular. Veremos que a compreensão das estruturas de domínios e a predictibilidade da direção de magnetização dentro de um domínio são essenciais para a interpretação das propriedades magnéticas de um ferromagneto, e em particular, um ferromagneto com algumas monocamadas.

O conceito de domínio magnético foi postulado no início do século 20 (1907) por Weiss [5]. Weiss foi o primeiro a conectar duas observações que são únicas para materiais ferromagnéticos, a saber: (i) uma enorme magnetização do material ferromagnético como uma resposta a um pequeno campo externo aplicado; ou seja, alta susceptibilidade (χ) $\chi \equiv \frac{\partial M}{\partial H} |_{H=0}$ e (ii) uma magnetização remanente que, pode ou não se anular, dependendo da história magnética da amostra. Estas duas observações foram os ingredientes chave no postulado de que um material ferromagnético na ausência de campo magnético externo usualmente apresenta regiões com magnetização não nula, enquanto a direção desta mag-

netização “espontânea” varia de região para região (chamada de **domínios magnéticos**), de tal forma que a soma das magnetizações sobre toda a amostra ferromagnética se anula. O efeito de um pequeno campo magnético externo aplicado na amostra é alinhar as direções de magnetização dos vários domínios ao invés de induzir a magnetização nas escalas atômicas.

Em filmes magnéticos ultra finos, ou seja, um amostra ferromagnética com apenas algumas monocamadas, nós esperaríamos ser energeticamente favorável para a magnetização se alinhar no **plano do filme**, a fim de minimizar a energia magnetostática, como veremos adiante. Contudo, em muitos dos filmes magnéticos a magnetização se alinha **perpendicularmente** ao plano do filme; isto é, eles exibem uma anisotropia magnética uniaxial perpendicular ao plano do filme. Esta anisotropia é frequentemente referida como “anisotropia de superfície” e a magnetização perpendicular ao plano do filme tem implicações importantes em gravação magneto-ótica [2].

2.2 Domínios magnéticos e anisotropia em filmes finos

Há duas propriedades relacionadas que são importantes para a compreensão de como materiais magnéticos respondem a um campo externo aplicado. Estas são: (i) A **anisotropia magnética** e (ii) A **estrutura de domínio**. A fim de minimizar sua “auto-energia” magnetostática o material magnético, em geral, se divide em domínios magnéticos. Na Fig. 2.1a o material possui um único domínio magnético e há um grande campo magnético local, no qual esta “auto-energia” está armazenada. Na Fig. 2.1b a formação dos domínios reduz o campo local, enquanto na Fig. 2.1c a formação de domínios fechados assegura que o campo local, e conseqüentemente a “auto-energia” magnética, é nula. A direção da magnetização dentro de um domínio magnético é determinada pela anisotropia magnética, cuja direção é, em geral, um dos eixos de fácil magnetização do cristal.

A fim de estudar a resposta a um campo magnético externo aplicado sobre uma

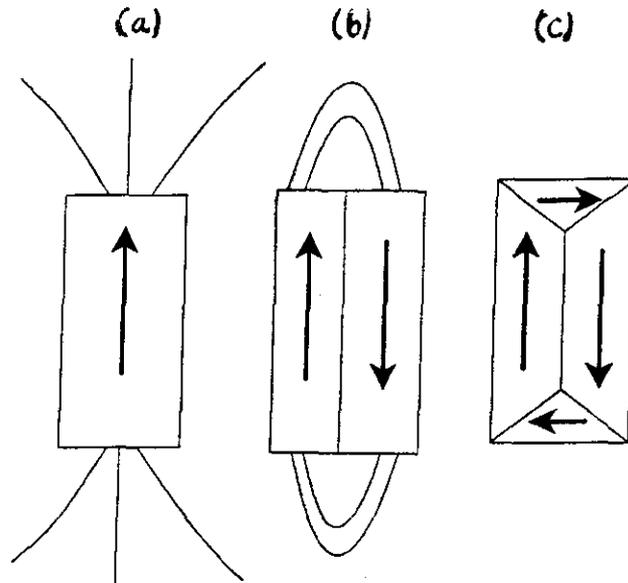


Figura 2.1: (a) Uma amostra com um único domínio com um grande campo magnético local. A “auto-energia” magnetostática é armazenada neste campo. (b) Uma amostra é dividida em dois domínios a fim de reduzir a “auto-energia” magnetostática. As linhas indicam a direção da magnetização dentro de cada domínio. A auto-energia magnetostática armazenada no campo externo agora é menor, comparada com (a). (c) Uma amostra separada dentro de quatro domínios. Os domínios fechados nos finais da amostra asseguram um campo local nulo e uma “auto-energia” magnetostática zero.

amostra magnética, a medida mais comum realizada é a curva de magnetização vs. campo (h).

A Fig. 2.2 apresenta uma curva típica com histerese. O campo de saturação H_s é a intensidade de campo magnético acima do qual a magnetização satura. Se o campo magnético é reduzido a zero haverá uma magnetização remanente M_r na amostra, e se invertemos o sentido do campo magnético, teremos uma intensidade de campo magnético particular (chamada campo coercivo H_c) que irá levar a magnetização da amostra a zero. Tais grandezas dependem de um número de propriedades da amostra que determinam a estrutura de domínio, e conseqüentemente, a energia magnética total da amostra sem campo externo. Entre essas propriedades estão (i) A energia de troca (E_{TROCA}) entre os momentos magnéticos atômicos, (ii) A energia de anisotropia magnetocristalina (E_{ANIS}), (iii) A energia magnetostática, também conhecida como energia de desmagnetização ou anisotropia de forma (E_{FORMA}), que está relacionada com a “auto-energia” magnética.

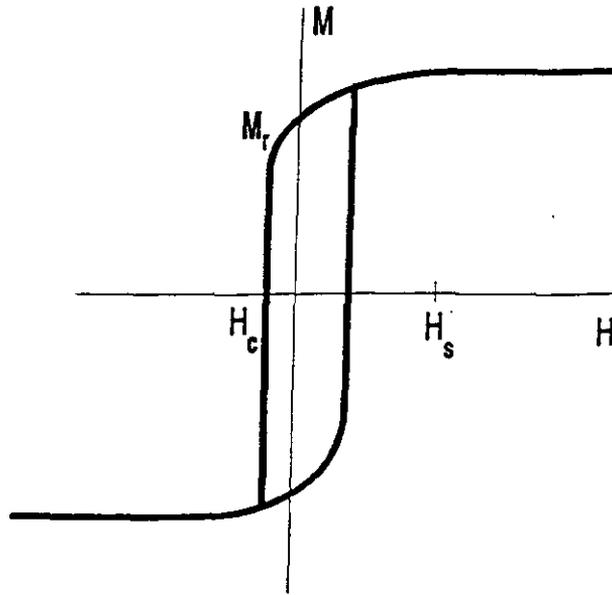


Figura 2.2: Curva de histerese magnética de uma amostra magnética. M é a magnetização e H é a intensidade do campo externo aplicado. H_s é o campo de saturação para o qual a magnetização satura. M_r (magnetização remanente) é a magnetização a campo nulo e H_c é o campo coercivo; campo necessário para reduzir a magnetização a zero.

Nós podemos portanto, atribuir um termo de energia $E_{TROCA} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ para esta interação de troca, onde \mathbf{S}_i são os spins dos elétrons i e J é a constante de troca ($J > 0$ para ferromagnetos, $J < 0$ para antiferromagnetos). Se esta descrição parece sugerir uma interação entre os momentos magnéticos de spin, tal conclusão é fisicamente errada. Isto porque a interação de troca é uma consequência direta do princípio de exclusão de Pauli, e de **origem eletrostática**. Assim, a consequência desta interação de origem eletrostática é a existência de **ordenamento magnético** (vide Ref. [6] - Section 3.1).

A energia de anisotropia magnetocristalina (E_{ANIS}) descreve o acoplamento dos spins eletrônicos com a sua vizinhança, a rede cristalina, por uma energia de acoplamento spin-órbita. Ela resulta em direções cristalográficas ao longo das quais os spins alinhados (ou a magnetização) apontam preferencialmente. O termo geral de anisotropia pode ser deduzido da simetria da rede cristalina. Em sua forma mais simples, o caso de anisotropia 'uniaxial', pode ser descrito por um termo de energia $E_{ANIS} = K \sin^2(\theta)$, onde K é a constante de anisotropia (K é uma constante positiva, $K > 0$) e θ o ângulo entre a

direção de anisotropia e a magnetização. Devido a dependência quadrática em $\sin(\theta)$ é imediatamente claro que pelo menos duas orientações são energeticamente favoráveis (para $\theta = 0$ e $\theta = \pi$); i.e., o sinal da magnetização pode ser escolhido arbitrariamente.

O terceiro termo relevante é a energia magnetostática (ou energia de forma - E_{FORMA}). Alinhando todos os spins no volume de uma amostra de material magnético ao longo da direção de fácil magnetização, determinada pela anisotropia cristalina, produzimos um enorme campo magnético fora da amostra. Essa energia é dada pelo campo demagnetizante definido como $E_D = \frac{1}{2}M \cdot B_D = \frac{1}{2}\mu_0 \times M H_D$, onde \mathbf{M} é o vetor de magnetização por unidade de volume e H_D é o campo de demagnetização, que é igual a $D M$ onde D é um fator geométrico (constante de demagnetização) que depende da fração da área da amostra onde a magnetização termina. Os valores do fator de demagnetização D estão no intervalo $0 \leq D \leq 1$ (vide ref. [6] Table 1.3). Por exemplo, $D = 0$ para um tubo fino infinitamente longo com magnetização direcionada ao longo do eixo de simetria do tubo, pois a área fracional dos extremos do tubo é nula comparada a área total. Por outro lado, $D = 1$ para uma chapa plana com magnetização normal à superfície da mesma, pois a magnetização termina na superfície total da chapa. Essa é a razão porque essa energia de demagnetização é também chamada anisotropia de forma. Separando a amostra em domínios, reduzimos a energia magnetostática E_{FORMA} (a “auto-energia”) pois reduzimos a área onde a magnetização termina, reduzindo assim o fator de demagnetização D . O valor máximo da energia magnetostática é obtido em um estado uniforme com **todos** os spins paralelos. Portanto, é energeticamente favorável finalizar com uma configuração de spins onde todos os spins são alinhados dentro de certas regiões, mas ao longo de direções distintas de região para região de forma tal que o campo magnético local, fora da amostra, gerado pela anisotropia de forma é cancelado consideravelmente. Dentro destas regiões - **os domínios magnéticos** - os spins apontam ao longo de um dos eixos de fácil magnetização, e somente em zonas de transição estreitas - **as paredes de domínios** - os spins se desviam destes eixos. Uma outra maneira de observar esta situação é perceber que a “auto-energia” está armazenada no campo magnético externo gerado H . Na Fig. 2.1 nós

vemos que, separando a amostra em domínios, a extensão do campo magnético gerado é reduzida drasticamente e, introduzindo domínios de fechamento, o campo externo pode ser reduzido a zero.

O comportamento magnético global em um filme magnético envolve portanto um balanço da energia de troca (E_{TROCA}), a energia de anisotropia (E_{ANIS}) e a energia de forma (E_{FORMA}). Um material magnético irá se dividir em domínios dependendo do balanço da energia de troca (E_{TROCA}) e anisotropia (E_{ANIS}) de tal forma que os domínios adjacentes irão apontar em direções diferentes e serão separados por uma parede de domínio gerando uma energia (E_{PAREDE}) resultado do balanço de E_{TROCA} e E_{ANIS} . A energia de parede (E_{PAREDE}) descreve a energia necessária para estabilizar uma parede de certo *tipo, largura e comprimento*. Como dentro dos domínios a magnetização encontra-se o mais próxima possível do eixo de anisotropia (eixo fácil de magnetização), a **formação de domínio** é então dada pela balanço entre a energia magnetostática (E_{FORMA}) e a energia de parede (E_{PAREDE}), a primeira favorecendo a criação de domínios de forma a diminuir o campo magnético local, a última tentando conservar a *largura* da parede de domínio a um mínimo.

Se considerarmos uma parede de domínio de $180^\circ(\pi)$ (vide Fig. 2.3) com uma largura de N átomos, cada um dos quais com spin S , o ângulo médio entre spins vizinhos é π/N , e a energia por par de vizinhos é então $E_{troca} = JS^2(\pi/N)^2$. Para os N átomos, obtemos então que

$$NE_{troca} = JS^2(\pi/N)^2 \times N = JS^2\pi^2/N \quad (2.1)$$

A condição para que a energia de troca seja mínima é então que N cresça indefinidamente: no entanto, se N cresce a energia de anisotropia magnetocristalina cresce, já que o número de spins não alinhados na direção de fácil magnetização também cresce. Se a separação entre os spins é a , haverá $1/a^2$ linhas de átomos por unidade de área do filme, e a energia de troca por unidade de área será

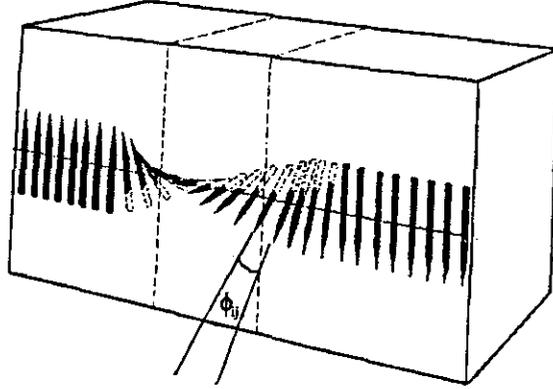


Figura 2.3: Diagrama esquemático de uma parede de domínio. O ângulo entre os momentos magnéticos adjacentes é $\phi = \pi/N$.

$$e_{troca} = JS^2\pi^2/(Na^2) \quad (2.2)$$

A energia de anisotropia é da ordem da constante de anisotropia vezes a largura Na da parede:

$$e_{anis} \cong KNa \quad (2.3)$$

A condição que minimiza a energia total por unidade de área $e = e_{troca} + e_{anis}$ é dada por

$$de/dN = -\pi^2JS^2/N^2a^2 + Ka = 0 \quad (2.4)$$

e a largura resultante é dada por

$$N = \frac{\pi S}{a^{3/2}}\sqrt{J/K} \quad (2.5)$$

Da discussão acima, fica claro que essencialmente o balanço entre as energias de parede (E_{TROCA}) e magnetostática (E_{FORMA}) é responsável pela existência de **domínios**. O balanço entre as anisotropias de troca (E_{TROCA}) e cristalina (E_{ANIS}) determina a largura N (Eq. 2.5) das paredes de domínio. A interação de troca (E_{TROCA}), que favorece

uma ordem de *longo alcance*, induz uma parede larga ($J/K \gg 1$) a fim de permitir apenas uma ligeira variação dos ângulos dos spins adjacentes, enquanto que a energia de anisotropia (E_{ANIS}) favorece mudanças abruptas das direções de spins; ou seja, paredes estreitas ($J/K \ll 1$) tendem a alinhar os spins ao longo dos eixos de fácil magnetização.

Estes argumentos explicam qualitativamente porque domínios podem se formar em um ferromagneto, seja ele no volume e um filme fino. O argumento quantitativo, contudo, é muito mais complexo. Primeiro de tudo, as dimensões da amostra representam um papel fundamental. Para $D = 0$ (magnetização paralela ao plano do filme), a energia magnetostática não pode ser mais reduzida pela formação de domínios pois a energia magnetostática já é nula. Somente os momentos magnéticos da superfície (ou extremidades) contribuem. Isto explica porque um filme fino com magnetização no plano é necessariamente um filme fino com um **único** domínio. Mas até mesmo para amostras de forma mais irregulares, a situação pode ser mais complexa do que a inferida da discussão acima. Considere, por exemplo, que o tamanho da amostra é comparável ou até mesmo menor que uma largura de parede típica. Então um estado de único domínio será preferível não importando o quão grande seja o campo magnético local, já que nenhuma parede de domínio pode ser formada. Um argumento similar foi usado por Kittel [7] para filmes finos de espessura t com um eixo de fácil magnetização **perpendicular** ao plano do filme. Na Fig. 2.4 vemos duas amostras de domínios. A energia por unidade de área da parede associada com a formação da parede de domínio (E_{PAREDE}) é a soma da energia de troca (E_{TROCA}) e a energia de anisotropia (E_{ANIS})

$$E_{PAREDE} = E_{TROCA} + E_{ANIS} \approx 4(JK)^{1/2}. \quad (2.6)$$

A formação ou **aniquilação** de um domínio magnético depende de um balanço de aumento na energia da parede do domínio (Eq. 2.6) com uma redução na auto-energia magnetostática $E_{FORMA} = \mu_0/2 \times DM^2$.

Um cálculo simples mostra que domínios magnéticos *não* devem existir em filmes fi-

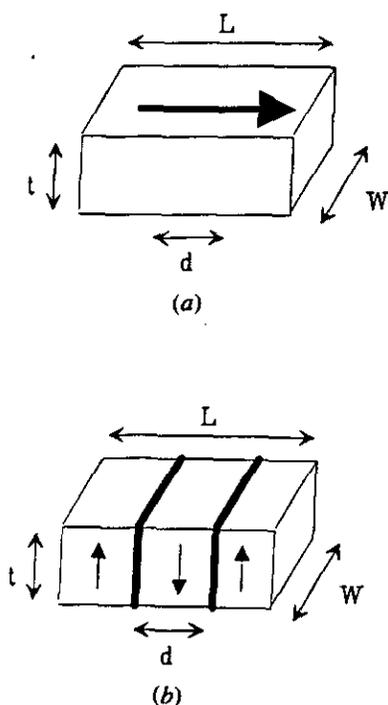


Figura 2.4: (a) Diagrama esquemático de um único domínio magnético em filme fino com magnetização paralela ao plano do filme. (b) Diagrama esquemático de um filme fino com eixo fácil de magnetização perpendicular ao plano do filme, separado em vários domínios. t é a espessura, L é o comprimento e W a largura da amostra.

nos. Na Fig. 2.4a. consideramos um único domínio num filme de *espessura* t . Já que a magnetização é **paralela** ao plano do filme, a energia magnetostática (E_{FORMA}) é muito pequena, e nós esperamos ser esta a configuração de energia mais baixa. Se domínios fossem formados, a energia de parede E_{PAREDE} iria facilmente exceder o pequeno decréscimo da energia magnetostática. Por outro lado, se o filme fosse monodomínio com o momento **perpendicular** ao plano do filme (Fig. 2.4b), então a “auto-energia” magnetostática seria muita grande, $(1/2)DM^2tWL$. Se o filme se dividisse em *domínios*, a energia da parede seria da ordem $4(JK)^{1/2}tWLd$, onde d é a largura do domínio. A “auto-energia” seria reduzida, pois o fator de desmagnetização D seria menor para cada domínio por um fator

d/t . A energia por unidade de área da superfície seria então dada por

$$E = E_{FORMA} + E_{PAREDE} = \frac{1}{2}DM^2d(t) + 4(JK)^{1/2}\frac{t}{d(t)} \quad (2.7)$$

onde $d(t)$ depende da espessura t do filme. Portanto, nós podemos minimizar esta expressão em relação a largura do domínio $d(t)$. Nós obtemos, imediatamente, que $d \propto t^{1/2}$. Como a energia de parede (E_{PAREDE}) é proporcional a $d(t)$ e a energia magnetostática (E_{FORMA}) é proporcional a t , concluímos que abaixo de uma espessura crítica ($t_{critica}$) o decréscimo na energia magnetostática (E_{FORMA}) NÃO é compensado pela criação de paredes de domínios (E_{PAREDE}), visto que, para ($t < t_{critico} \ll 1$), $t < t^{1/2}$. Portanto, nós poderíamos prever que, em ambos os casos de **anisotropia** no *plano* e *perpendicular*, filmes ultrafinos se apresentam com **um único domínio**.

Na prática este comportamento de único-domínio para filmes com um eixo de fácil magnetização perpendicular ao plano do filme não é observado (vide Fig. 2.5). O tamanho dos domínios observados é de vários micrometros [8]. Contudo, filmes de Co/Cu(100) com eixo fácil de magnetização no plano do filme apresentam o comportamento de único-domínio [10], o mesmo ocorrendo com Co/Cu(111) [11].

Fenomenologicamente, podemos entender a discrepância entre o comportamento previsto - (não existência de domínios com eixo anisotropia perpendicular ao filme) - com o observado (vide Fig. 2.5), pois a fórmula da energia magnetostática total não contém um termo de superfície de anisotropia que é essencial para a existência do eixo de fácil magnetização perpendicular ao plano em filmes finos. Se considerarmos um filme fino de cobre/cobalto, por exemplo, com único-domínio, a energia por unidade de volume pode ser escrita como

$$E \approx K \sin^2 \theta + \frac{1}{2}M^2 \cos^2 \theta - \frac{1}{2}\mathbf{M} \cdot \mathbf{H} \quad (2.8)$$

onde θ é o ângulo da magnetização da normal para o filme. O termo de anisotropia $K \sin^2 \theta$ é um mínimo quando a magnetização está perpendicular ao filme (e portanto no eixo fácil). O segundo termo é a energia magnetostática (E_{FORMA}), que é mínima

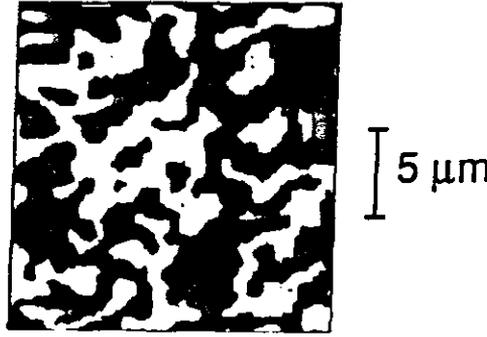


Figura 2.5: Imagem de domínios magnéticos de 3 monocamadas de um filme de Co sobre Au(111) mostrando domínios magnetizados perpendicularmente com magnetização “para fora” do filme (branco) e “para dentro” do filme (preto). extraído de Allenspach *et al.*(1993).

quando a magnetização se encontra no plano do filme. Estes dois termos competem entre si e para um filme fino a auto-energia (segundo termo da Eq. 2.8) deveria prevalecer e a magnetização conseqüentemente ocorrer no plano do filme, a campo magnético nulo. Este é o caso para um filme de Cu/Co de espessura maior que 2 nm, mas menor que algumas centenas de nanômetros. O último termo na Eq. 2.8 é a energia de interação entre a magnetização e o campo aplicado, que é mínima quando a magnetização se alinha com o campo externo.

No entanto, experimentos realizados por Barthelemy *et al.* (1992) [12] e Daboo *et al.* (1993). [11] tem mostrado, em aproximadamente todos os filmes magnéticos que tem sido estudados que, tão logo a espessura do filme é reduzida abaixo de algum valor crítico (tipicamente 2 nm), a magnetização torna-se perpendicular ao plano do filme. Há uma contribuição para a anisotropia que aumenta quando a espessura do filme é reduzida e eventualmente é grande o suficiente para sobrepor o efeito desmagnetizador (segundo termo da Eq. 2.8) e forçar a magnetização perpendicular ao plano do filme. Esta anisotropia é chamada **anisotropia de superfície** - referida no início deste capítulo, e fenomenologicament podemos escrever a energia de domínio como

$$E \approx (K_v + \frac{K_s}{t}) \sin^2 \theta + \frac{1}{2} M^2 \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}. \quad (2.9)$$

onde introduzimos uma nova contribuição para a anisotropia, a anisotropia de superfície K_s (o termo t é necessário por motivos dimensionais, pois K_v é a constante de anisotropia volumétrica).

Foi predito por Néel [13] em 1954 que tal anisotropia de superfície resulta da redução de simetria dos átomos da superfície. Em uma rede cúbica simples, por exemplo, cada átomo apresenta 6 primeiros vizinhos (no caso da fcc são 12) simetricamente dispostos, mas na superfície este arranjo simétrico de vizinhos é removido. A direção de fácil magnetização ao longo da qual a energia do momento magnético é mínima resulta da sobreposição dos orbitais atômicos sobre os sítios vizinhos dentro do cristal. Na superfície, onde uma camada de vizinhos foi efetivamente removida, o eixo de fácil magnetização é perpendicular a superfície. A origem desta anisotropia de superfície é, contudo, ainda um assunto não entendido de forma apropriada o que tem motivado muita pesquisa sobre o mesmo. A magnitude do efeito é algumas vezes muito maior do que o esperado, mas isto pode ser associado com a tensão na interface entre o filme e o substrato ou entre as camadas dentro de um multi-camada (vide Engel *et al.* (1991) [14]).

As curvas de histerese típicas são mostradas na Fig. 2.6. Na Fig. 2.6a a camada do Fe no filme é espessa o suficiente tal que a direção de fácil magnetização para saturar a magnetização está no **plano** do filme. Contudo, na Fig. 2.6b a camada do Fe no filme é mais fina tal que agora é mais fácil magnetizar a amostra **perpendicularmente** ao plano do filme, e a magnetização remanente no plano é nula. Destas espécies de curvas de histerese, a magnitude de K_s pode ser determinada, e na Fig. 2.7 apresentamos os resultados para multicamadas de Co/Pd. Aqui a magnitude da anisotropia total multiplicada pela espessura do filme foi graficada versus a espessura do filme. Usando a notação de Engel *et al.* [14], nós vemos que

$$K_u = K_v - \frac{1}{2}M_s^2 + \frac{K_s}{t}. \quad (2.10)$$

Portanto, o gráfico de $K_u t$ versus t produz uma linha reta com inclinação que fornece o valor de K_v e um coeficiente linear que fornece K_s . O gráfico mostra que o coeficiente

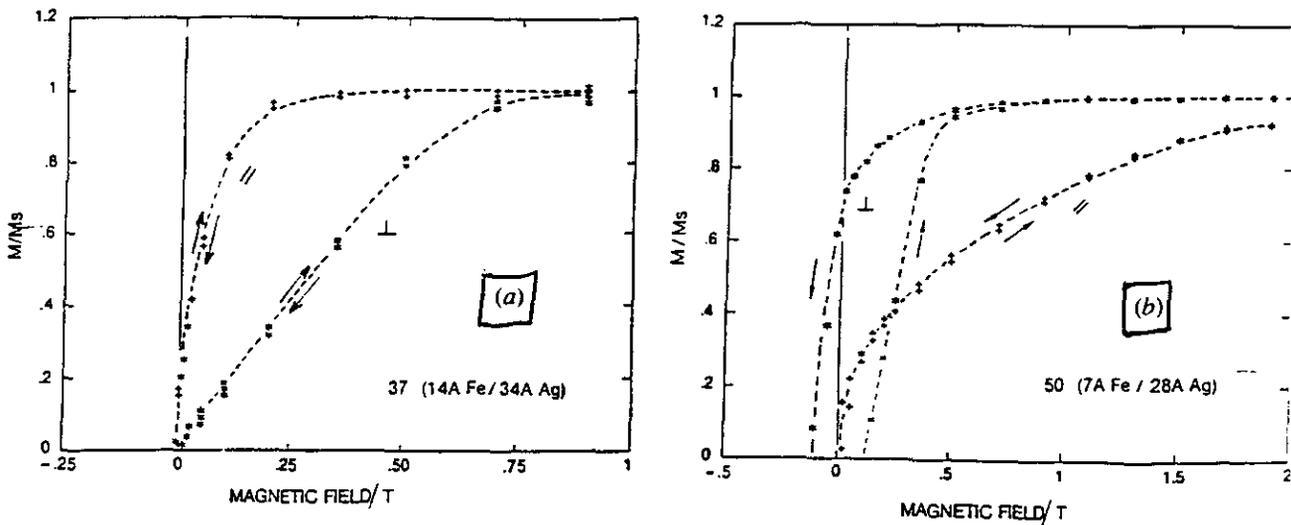


Figura 2.6: Curvas de magnetização para multicamadas de Fe/Ag:(a) para várias multicamadas de Fe o eixo de fácil magnetização é paralelo ao plano do filme; (b) para poucas multicamadas de Fe o eixo de fácil magnetização é perpendicular ao plano do filme. A amostra em (a) consiste de 37 bi-camadas com 14 Å de Fe e 34 Å de Ag enquanto a amostra em (b) consiste de 50 bi-camadas de 7 Å de Fe e 28 Å de Ag. (extraído de Barthelemy *et al.* (1992).)

linear (K_s) é independente da orientação do cristal da superfície apesar da larga variação na anisotropia magnetocristalina **no plano** K_v .

Concomitantemente com os primeiros experimentos em filmes magnéticos ultrafinos, Yafet e Gyorgy [15] realizaram um cálculo detalhado da estrutura de domínios a temperatura zero levando em consideração interação dipolar magnética, além da interação de troca. Eles mostraram que sobre certas condições um estado com domínios em forma de listras apresenta uma energia menor que um estado de mono domínio. Neste caso, no entanto, o filme deve ser magnetizado perpendicularmente, e a anisotropia uniaxial e a energia magnetostática deveriam se cancelar. Czech e Villain [16], através de um cálculo usando o modelo de Ising com interação dipolar com forte anisotropia, mostraram que uma estrutura de domínio em formato de “tabuleiro de xadrez” apresenta uma energia até menor que a estrutura listrada obtida por Yafet e Gyorgy [15]. Contudo, controvérsias em relação à configuração de domínios existem **apenas** para filmes magnetizados perpen-

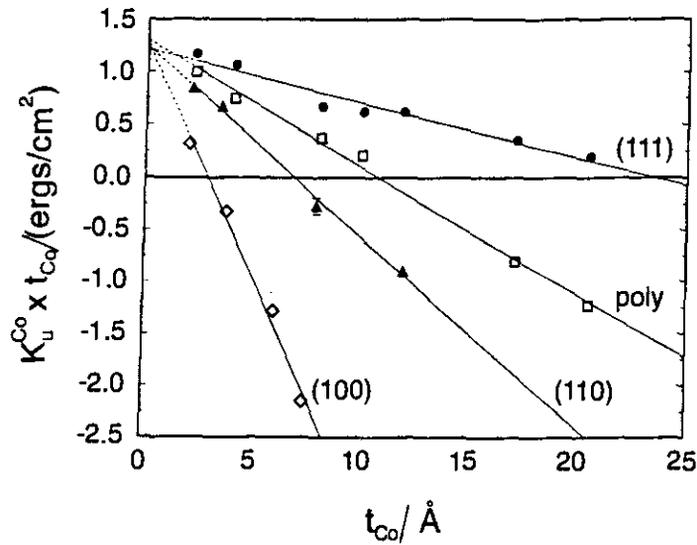


Figura 2.7: A energia de anisotropia uniaxial vezes a espessura da camada de Co graficada versus a espessura do Co para multicamadas de Co/Pd. A espessura na qual a anisotropia muda de sinal é a espessura crítica abaixo da qual o eixo de fácil magnetização é perpendicular ao plano do filme. Os diferentes conjuntos de dados são para diferentes orientações cristalográficas de Co/Pd. (extraído de Engel *et al.* (1991).)

dicularmente.

2.3 Conclusão

Neste Capítulo discutimos a origem da formação de domínios em ferromagnetos em geral e, em filmes finos, em particular. Descrevemos os termos energéticos relevantes na energia magnética total e o papel de cada um deles na geração de domínios magnéticos; estimamos a largura de uma parede de domínio (Eq. 2.5) em termos de constantes microscópicas (de troca J e anisotropia K).

Embora a Eq. 2.7 preveja a **não** existência de multidomínios perpendiculares ao plano, isto é observado experimentalmente (conforme indica as Figs. 2.5 e 2.6). Esta discrepância se deve ao fato que no modelo simplificado, Eq. 2.7, não se considerou a anisotropia de superfície, que está presente em filmes finos como indicad a Fig. 2.7 **resultado experimental**. Verifica-se da Fig. 2.7, imediatamente, que para espessuras finas ($t \sim 0$ a 5 Å)

existe um termo de anisotropia de superfície, cujo valor é constante e independente da direção cristalográfica, sendo portanto interpretado com um **termo de superfície**. Este é o termo responsável pela existência de múltiplos domínios magnéticos em filmes finos.

Capítulo 3

Método Monte Carlo (MC)

3.1 Introdução

Métodos de simulação computacional são, atualmente, ferramentas essenciais em muitos ramos da ciência. Uma das motivações da simulação computacional em Física é que podemos eliminar aproximações analíticas na abordagem do problema. Usualmente, para tratar um problema analiticamente, isto se o mesmo permite, precisamos recorrer a alguma espécie de aproximação como, por exemplo, a aproximação de campo médio. Com uma abordagem de simulação computacional nós somos capazes de estudar sistemas não tratáveis por métodos analíticos e, obter resultados quantitativos de parâmetros relevantes no mesmo.

Uma das vantagens da simulação computacional é que podemos variar da maneira desejada (quase sem limites) as variáveis do problema.

3.2 Método Monte Carlo

O método Monte Carlo (MC) pode ser definido como representando uma solução de um problema (por exemplo, a magnetização de um sistema de spins) como um parâmetro de uma população hipotética (por exemplo, conjunto de spins), onde usamos uma sequência aleatória de números para construir uma amostragem desta população, da qual estimati-

vas estatísticas do parâmetro podem ser obtidas.

A definição mostra que a faixa de aplicações do método MC é abrangente, envolvendo problemas não só relacionados à Física. Aqui nós nos concentramos na aplicação do método MC para problemas de mecânica estatística. Para outras aplicações vide referências [17, 18].

A abordagem tradicional para calcular propriedades de sistemas físicos é usar equações de movimento para gerar caminhos no espaço de fases. A quantidade de interesse (observável) é então calculada ao longo deste caminho. A seguinte relação fundamental assegura que a quantidade assim obtida é, além disso, estritamente igual à média de ensemble de sistemas

$$\langle A \rangle = \overline{A_\infty} \quad (3.1)$$

ou seja, que as médias de trajetórias $\overline{A_\infty}$ são iguais às médias de ensemble $\langle A \rangle$. O método MC na Física computacional apresenta uma abordagem diferente. Ele parte de uma descrição do sistema em termos de um Hamiltoniano, e um “ensemble” apropriado para o problema selecionado. Então, todos os observáveis são calculados usando uma função de distribuição ($p(x)$) e a função de partição (Z). *A idéia é “escolher” as contribuições principais a fim de obter uma boa estimativa do observável.* A técnica MC em Física estatística é centrada em torno do cálculo de valores médios esperados.

O objetivo então, é calcular quantidades que resultam de integrais multidimensionais. Contudo, uma compreensão melhor é obtida olhando, primeiramente, para o problema mais simples, o de uma integral uni-dimensional.

3.3 Amostragens simples e ponderadas

Como exemplo, focaremos inicialmente no problema do cálculo de uma integral unidimensional, que pode ser colocado da seguinte forma: Dada uma função $f(x)$ ($a \leq x \leq b$), calcule a integral.

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (3.2)$$

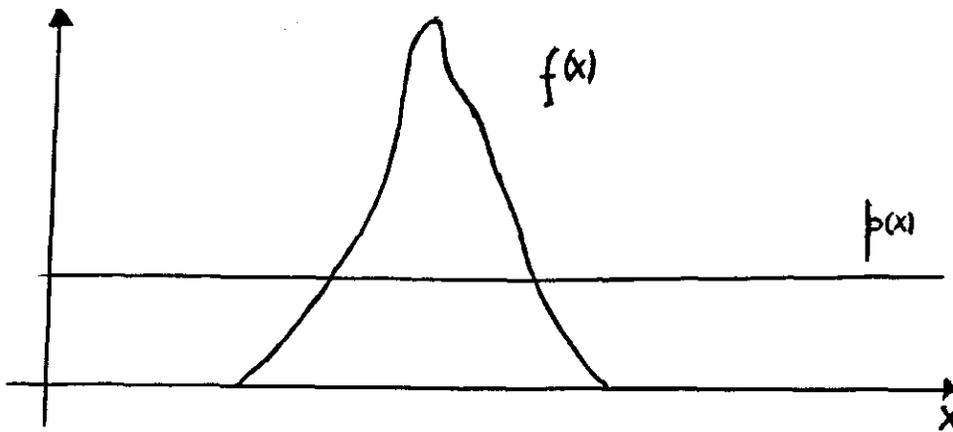


Figura 3.1: Ilustração da integral de $f(x)$ por uma amostragem **simples**. A função de distribuição $p(x)$ é constante em todo o intervalo.

Nós podemos reformular este problema em termos de uma média, e portanto, mudarmos a abordagem de um problema determinístico (Eq. 3.2) para um problema estocástico (Eq. 3.5). De acordo com o Teorema do valor médio do cálculo nós temos que,

$$\langle f(x) \rangle = \frac{I}{b-a} \quad (3.3)$$

A integral Eq. 3.2 pode ser calculada escolhendo n pontos x_i aleatoriamente do intervalo $[a, b]$ com a distribuição uniforme $p(x)$ (Fig. 3.1), formando a média das amostras das alturas de $f(x)$, ou seja,

$$I = \int_a^b f(x) dx \simeq \frac{b-a}{n} \sum_i^n f(x_i). \quad (3.4)$$

que resulta, da Eq. 3.3 em

$$\langle f(x) \rangle = \frac{I}{b-a} = \frac{1}{n} \sum_i^n f(x_i). \quad (3.5)$$

Tal abordagem é um exemplo do que se chama **amostragem simples** - vide Fig. 3.1

Na amostragem simples (Fig. 3.1), todos os pontos nos quais a função é calculada são escolhidos uniformemente. Nenhuma referência é feita a natureza da função. Se a função $f(x)$ tem uma grande variação, a incerteza da estimativa do Método MC para a integral será grande. Por outro lado, se a função é uniforme (**suave**) a estimativa desta mesma

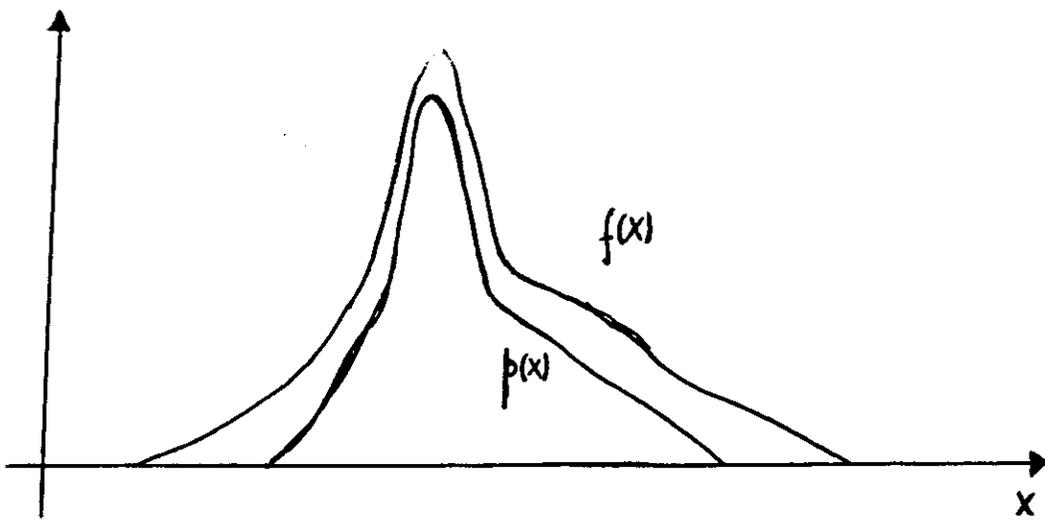


Figura 3.2: Ilustração da integral de $f(x)$ por uma amostragem **ponderada**. A função de distribuição $p(x)$ varia e “imita” a função $f(x)$.

integral será mais acurada. Suponha, por exemplo, que a função $f(x)$ tenha um pico em torno do seu valor médio. Pouca contribuição para o valor médio de $f(x)$ ($\langle f(x) \rangle$) vem das caudas da função $f(x)$, portanto será mais eficiente amostrar a função para pontos onde a contribuição principal se origina (ou seja, em torno do pico de $f(x)$) (vide Fig. 3.2). Suponha, além disso que nós podemos construir uma função $p(x) > 0$ tal que ela “imita” o comportamento de $f(x)$, e que pode ser calculada analiticamente

$$I = \int_a^b p(x) dx = 1, p(x) > 0. \quad (3.6)$$

Segue então, que

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx. \quad (3.7)$$

Podemos escolher os pontos x_i de acordo com a medida (ou probabilidade) $p(x)$ (vide Fig. 3.2), ao invés da medida uniforme ($p(x)=cte.$ - vide Fig. 3.1), e ponderar a função calculada em x_i apropriadamente. A média da função $f(x)$ será então,

$$\langle f(x) \rangle \simeq \frac{1}{n} \sum_i^n \frac{f(x_i)}{p(x_i)} \quad (3.8)$$

Calculando a variância (σ) nós obtemos

$$\sigma^2 = \int_a^b \left(\frac{f(x)}{p(x)} \right)^2 p(x) dx - \left[\int_a^b \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx \right]^2. \quad (3.9)$$

Sem perda de generalidade podemos considerar que $f(x) > 0$. Para tornar a variância (σ) tão pequena quanto possível, escolhemos

$$p(x) \simeq f(x) / \int_a^b f(z) dz, \quad (3.10)$$

Disto resulta então que a variância (σ^2 - (Eq. 3.9)) é praticamente zero. Podemos entender isto verificando que $p(x)$ “imita” quase perfeitamente $f(x)$, exceto por um fator de escala. Portanto, a variância tende a zero. Neste ponto chegamos a idéia de “**amostragem ponderada**”. Basicamente escolhemos uma medida $p(x)$ que “prefere” pontos que dão uma contribuição dominante para a integral. Pontos que se encontram nas caudas ocorrem menos frequentemente.

Com a amostragem ponderada nós conseguimos reduzir a incerteza estatística (variância) sem aumentar o tamanho da amostra, o que representa um ponto de vantagem para este tipo de amostragem (**ponderada**) em relação a amostragem anterior (**simples**).

3.4 O algoritmo

O problema em Mecânica Estatística que será abordado é o seguinte:

Seja N o número de sítios de uma rede quadrada. Associada a cada sítio i está um conjunto de variáveis dinâmicas, s_i , representando os graus de liberdade. O conjunto $\langle (s_1), \dots, (s_N) \rangle$ descreve o espaço de fases do sistema. Digamos que x denota um ponto no espaço Ω (espaço de fases). A evolução do sistema é governada por um hamiltoniano $\mathcal{H}(x)$.

Nós queremos calcular, por exemplo, o valor médio do observável A no sistema: ou seja, $\langle A \rangle$. Digamos que $f(\cdot)$ seja um ensemble apropriado; por exemplo, $f(\cdot)$ pode ser a função de distribuição do ensemble canônico. Então $\langle A \rangle$ é calculado como.

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \int_{\Omega} A(\mathbf{x}) f(\mathcal{H}(\mathbf{x})) dx, \quad (3.11)$$

onde

$$Z = \int_{\Omega} f(\mathcal{H}(\mathbf{z})) dz \quad (3.12)$$

é a função de partição. O método MC fornece informação sobre as propriedades configuracionais. Escolhendo um ensemble apropriado, como o ensemble canônico, o método MC pode *estimar* a média dos observáveis para um número fixo de sítios, volume e temperatura.

Para *estimar* a quantidade $\langle A \rangle$ nós encaramos o problema de realizar uma integral multi-dimensional (Eq. 3.11). Somente para um número limitado de problemas somos capazes de realizar a integração analiticamente. Para alguns tipos de problemas a integração pode ser realizada usando esquemas aproximados, como o método gradiente-descende. Com o método MC, nós não precisamos de qualquer aproximação para calcular a integral, exceto que consideramos o espaço de fases discretizado. Conseqüentemente, nós frequentemente substituímos integrais por somas.

Para resolver o problema, nós esboçamos as idéias desenvolvidas anteriormente para a integral uni-dimensional. Suponha que o ensemble apropriado é o ensemble canônico

$$f(\mathcal{H}(\mathbf{x})) \propto \exp[-\mathcal{H}(\mathbf{x})/k_B T]. \quad (3.13)$$

Todos os estados \mathbf{x} correspondendo a uma energia “grande” produzirão contribuições pequenas para a integral e, somente certos estados darão contribuições grandes. Portanto esperamos que a distribuição tenha um pico pronunciado (e fino) em torno do valor médio de $\mathcal{H}(\mathbf{x})$. Suponha agora, que calculemos a integral Eq. 3.11 selecionando aleatoriamente os estados \mathbf{x} e somemos as contribuições, de forma completamente análogo como a Eq. 3.4. Quanto mais estados geramos, mais acurada será a integral. Contudo, já que o espaço de fase é multi-dimensional necessitaremos de um número enorme de estados, para os

quais a contribuição da soma é desprezível. Para reduzir o problema a um nível factível fazemos o uso da idéia de **amostragem importante**. Como no caso para a integração uni-dimensional, nós não tomamos os pontos do espaço de fases de forma completamente aleatória, mas os selecionamos com uma probabilidade $P(\mathbf{x})$.

Mais formalmente, o primeiro passo é selecionar os estados do espaço de fases de forma aleatória. Isto dá uma aproximação para a integral (assumindo que n estados foram gerados)

$$\langle A \rangle \simeq \frac{\sum_i^n A(\mathbf{x}_i) f(\mathcal{H}(\mathbf{x}_i))}{\sum_i^n f(\mathcal{H}(\mathbf{x}_i))}. \quad (3.14)$$

Se vamos escolher estados com probabilidade $P(\mathbf{x})$, então a Eq. 3.14 torna-se

$$\langle A \rangle \simeq \frac{\sum_i^n A(\mathbf{x}_i) P^{-1}(\mathbf{x}_i) f(\mathcal{H}(\mathbf{x}_i))}{\sum_i^n P^{-1}(\mathbf{x}_i) f(\mathcal{H}(\mathbf{x}_i))}. \quad (3.15)$$

Escolhendo

$$P_{eq}(\mathbf{x}) = Z^{-1} f(\mathcal{H}(\mathbf{x})) = Z^{-1} \exp[-\mathcal{H}(\mathbf{x})/k_B T] \quad (3.16)$$

i.e., a probabilidade é igual a distribuição de equilíbrio, a variância, que nós queremos reduzir, é praticamente zero. Neste ponto encontramos a mesma dificuldade como aquela do caso uni-dimensional, ou seja, o conhecimento da função $f(\mathbf{x})$. Vamos aceitar a escolha da Eq. 3.16. O cálculo da quantidade A então se reduz a uma simples média aritmética,

$$\langle A \rangle \simeq \frac{1}{n} \sum_i^n A(\mathbf{x}_i). \quad (3.17)$$

Usando a idéia da amostragem importante nós consideravelmente reduzimos a tarefa de resolver o problema mecânico-estatístico. Eq. 3.11, numericamente. Para seguirmos adiante, um algoritmo foi inventado que gera estados distribuídos de acordo com

$$P_{eq}(\mathbf{x}) = Z^{-1} \exp[-\mathcal{H}(\mathbf{x})/k_B T]. \quad (3.18)$$

3.4.1 Cadeia de Markov

A escolha específica da função redução da variância significa que nós amostramos os estados do equilíbrio termodinâmico do sistema. Contudo, sua distribuição não é conhecida a priori. Para contornar este problema, Metrópolis [19] *et al.* seguiram a idéia de usar uma cadeia de Markov tal que partindo de um estado inicial \mathbf{x}_0 mais estados são gerados que são “efetivamente” distribuídos de acordo com $P(\mathbf{x})$.

Uma sequência $\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_n$, é chamada uma **cadeia de Markov** se para qualquer n nós temos

$$P(\mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_n) = P(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_{(n-1)}) \cdots P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_0) P(\mathbf{x}_0) \quad (3.19)$$

Devido a esta propriedade, as probabilidades condicionais são chamadas de *probabilidades de transição de um passo* ou simplesmente *probabilidades de transição*.

Estados subsequentes gerados pela cadeia de Markov são tais que o sucessor localiza-se próximo do estado predecessor. Segue então que há uma correlação bem definida entre estados subsequentes.

O que nós temos que especificar são as **probabilidades de transição** de um estado \mathbf{x} do sistema para um estado \mathbf{x}' por unidade de tempo. Em aplicações de Monte-Carlo as probabilidades de transição são usualmente definidas por $W(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$. Para assegurar que os estados são efetivamente distribuídos de acordo com $P(\mathbf{x})$, i.e., que eles são estados de equilíbrio termodinâmico, algumas restrições devem ser impostas sobre $W(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$.

- (i) Para todos os pares complementares (S, S^*) de conjuntos de pontos do espaço de fase existe $\mathbf{x} \in S$ e $\mathbf{x}' \in S^*$ tal que $W(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \neq 0$.
- (ii) Para todos \mathbf{x}, \mathbf{x}' : $W(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \geq 0$.
- (iii) Para todos \mathbf{x} : $\sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 1$.
- (iv) Para todo \mathbf{x} : $\sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x}, \mathbf{x}')P(\mathbf{x}') = P(\mathbf{x})$.

A restrição (i) é a afirmação da conectividade ou ergodicidade do espaço de fases; ou seja, todos os pontos são teoricamente acessíveis pelo o algoritmo acima. A condição (ii), a afirmação de positividade da probabilidade de transição. A restrição (iii) é a afirmação da conservação, i.e., a probabilidade **total** que o sistema virá para um estado \mathbf{x} é unitária. A restrição (iv) diz que a distribuição limite; ou seja, após de um tempo suficientemente longo, é a distribuição de equilíbrio de acordo com a qual nós queremos que os estados sejam distribuídos.

3.4.2 Equação Mestre

Consideremos que as probabilidades de transição são especificadas, e os estados $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots$ foram gerados. A evolução da probabilidade $P(\mathbf{x}_i)$ com que os estados estão distribuídos podem ser descritos pela equação Mestre [20]

$$\frac{dP(\mathbf{x}, t)}{dt} = - \sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x}, \mathbf{x}') P(\mathbf{x}, t) + \sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x}', \mathbf{x}) P(\mathbf{x}', t). \quad (3.20)$$

Aqui nós usamos a abreviação $P(\mathbf{x}_i) = P(\mathbf{x}, t)$. O primeiro termo descreve a taxa de todas as transições para fora do estado considerado, enquanto que o segundo termo descreve a taxa das transições fluindo para o estado considerado. A condição estacionária $\frac{dP(\mathbf{x}, t)}{dt} = 0$ (ou seja, equilíbrio) para $P(\mathbf{x}, t)$ resulta em

$$\sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x}, \mathbf{x}') P_{eq}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x}', \mathbf{x}) P_{eq}(\mathbf{x}', t). \quad (3.21)$$

Usando a condição de conservação (iii), segue que,

$$\sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x}', \mathbf{x}) P_{eq}(\mathbf{x}', t) = P_{eq}(\mathbf{x}, t). \quad (3.22)$$

A equação anterior juntamente com a Eq. 3.16 implica que a taxa de probabilidade de transição $W(\mathbf{x}, \mathbf{x}')/W(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ do “movimento” $\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}$ e o “movimento” inverso $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'$ depende somente da variação de energia $\delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{x}) - \mathcal{H}(\mathbf{x}')$, assim:

$$\frac{W(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}{W(\mathbf{x}', \mathbf{x})} = \exp\left[-\frac{\delta\mathcal{H}}{k_B T}\right] \quad (3.23)$$

A escolha da Eq. 3.23 não especifica $W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')$ unicamente, e alguma arbitrariedade na escolha explícita de W é conservada. Duas escolhas frequentes de probabilidades de transição são usadas, quais sejam:

$$W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = \frac{1}{2\tau_s} \left[1 - \tanh\left(\frac{\delta\mathcal{H}}{2k_B T}\right) \right] \quad (\text{Glauber}) \quad (3.24)$$

$$W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = \begin{cases} \frac{1}{2\tau_s} \exp\left[\frac{-\delta\mathcal{H}}{2k_B T}\right] & \text{se } \delta\mathcal{H} > 0, \\ \frac{1}{\tau_s} & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (\text{Metropolis}) \quad (3.25)$$

τ_s sendo um fator arbitrário que pode ser escolhido como a unidade. Posteriormente quando nós interpretamos o processo de Monte Carlo dinamicamente nós iremos escolher τ_s como uma unidade de “tempo de Monte Carlo” ou “passo de Monte Carlo por sítio (spin)” quando tratamos sistemas magnéticos e chamamos W de “transição de probabilidade por unidade de tempo”.

Com tal prescrição somos capazes de calcular basicamente todas as quantidades de interesse no sistema Físico descrito por um Hamiltoniano H_n , sendo tais quantidades obtidas por uma simples média arimética (Eq. 3.17), já que a ponderação do espaço de fases foi efetuado previamente com a média ponderada através do algoritmo de Metropolis (Eq. 3.25).

As quantidades usuais calculadas para um sistema magnético são, por exemplo, a magnetização por unidade de volume (ou spin) ($m = M/V$) e susceptibilidade magnética (χ), a saber,

$$m = M/V = \langle |\sigma_{av}| \rangle; \quad \sigma_{av} = \sum_i \sigma_i / V, \quad (3.26)$$

$$\chi = \beta V (\langle \sigma_{av}^2 \rangle - \langle |\sigma_{av}| \rangle^2). \quad \beta = 1/k_B T \quad (3.27)$$

a energia média por sítio ($e = E/V$), com $E = -\frac{d \ln Z_n}{d\beta} \equiv \langle H_n \rangle$, calor específico (C/k_B), e a função de correlação spin-spin ($G(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$)

$$C/k_B = \frac{de}{d(k_B T)} = \beta^2 (\langle H_n^2 \rangle - \langle H_n \rangle^2) / V \quad (3.28)$$

$$G(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \langle \sigma_i \cdot \sigma_j \rangle, \quad (3.29)$$

entre outras.

A aplicação do Método Monte Carlo (MC) na elucidação do comportamento de sistemas no equilíbrio e também fora do equilíbrio (por exemplo, em processos de relaxação) tem sido vastamente utilizada em sistemas magnéticos (vide referências [21], [27],[52],[53] e referências internas).

3.5 Conclusão

Neste capítulo apresentamos o conceito de amostragem simples e ponderada e sua conexão com o método Monte Carlo (MC) na estimativa de valores médios de observáveis, em mecânica estatística, e no cálculo de integrais multidimensionais, problemas determinísticos. Apresentamos o conceito de cadeia de Markov e a partir da Equação Mestre, (Eq. 3.20), verificamos - usando a condição de balanço detalhado - que a probabilidade de transição no equilíbrio termodinâmico corresponde a distribuição de Boltzmann em Mecânica estatística. Isto justifica, de forma completa, a utilização da probabilidade de transição de Glauber (Eq. 3.24) ou Metrópolis (Eq. 3.25) na obtenção de quantidades termodinâmicas no processo de relaxação, como a magnetização e energia de nucleação de domínios que será visto no capítulo seguinte.

Capítulo 4

Relaxação da magnetização e formação de domínios magnéticos em filmes finos com anisotropia perpendicular

4.1 Introdução

O estudo de processos de magnetização em filmes finos tem atraído muita atenção [22] devido principalmente a aspectos relacionados a armazenagem de informação. Por exemplo, o tamanho da unidade magnética e sua estabilidade térmica são pontos essenciais a fim de se obter um bom desempenho em gravação magnética e magneto-ótica.

Os processos de magnetização em filmes finos são dominados essencialmente pelo balanço entre dois tipos de anisotropias. (A): Anisotropia de **superfície** e (B): Anisotropia de **forma**. A anisotropia de *superfície* (A) resulta da redução de simetria na direção perpendicular ao plano do filme e é importante em filmes ultrafinos (com espessura da ordem de 20 Å). Esta anisotropia favorece então a magnetização ao longo desta direção e é definida como m_{\perp} . Alguns filmes espessos, por exemplo, TbFe com espessuras $> 1000\text{Å}$

podem apresentar m_{\perp} ; neste caso, a anisotropia magnetocristalina é a anisotropia relevante. A anisotropia de *forma* (B) resulta da interação de longo alcance e favorece a magnetização no plano do filme; é definida como m_{\parallel} .

A forma e a dinâmica (efeitos temporais) dos domínios magnéticos possuem um papel crucial nos processos de magnetização e tornam-se mais interessantes quando a magnetização é perpendicular ao filme; ou seja, quando $m_{\perp} = 1$ e $m_{\parallel} = 0$ (ou $m_{\perp} \gg m_{\parallel}$).

Estudos recentes em efeitos magnéticos foram realizados por Ferré [23] e colaboradores através de medidas magneto-ópticas e da observação de domínios magnéticos a temperatura ambiente ($T \simeq 300K$) em filmes de Au/Co/Au e Pt/Co/Pt para algumas monocamadas de Co. Estes sistemas apresentam uma magnetização fora do plano ($m_{\perp} > 0$) e os autores claramente observaram dois comportamentos de relaxação magnética distintos partindo de uma configuração com todos os spins alinhados. Comportamento (1): dominado pela nucleação de **ALGUNS** domínios seguidos por um crescimento de tamanho do domínio. Comportamento (2): dominado pela nucleação de **MUITOS** domínios em pontos arbitrários da amostra (Vide Fig. 4.1). Estes dois comportamentos resultam em dependências temporais diferentes de relaxação magnética.

A análise da relaxação magnética em pequenas partículas de monodomínios tem sido estudada desde 1950 por Néel, Weil, Bean e Livingston, entre outros [24]. A vantagem da observação da relaxação em pequenas partículas vem da simplicidade da expressão da barreira de energia. Para a reversão da magnetização, onde todos os momentos em um monodomínio se invertem em bloco, a barreira de energia E_B é proporcional ao volume da partícula e apresenta a expressão $E_B = K_a V$, onde K_a é a anisotropia uniaxial. O conhecimento de E_B permiti-nos calcular alguns efeitos de correlação temporal. Por exemplo, o tempo de relaxação médio para transpor a barreira de energia é dado pela lei de Arrhenius de ativação térmica, $\tau(T) = \tau_0 \exp(E_B/k_B T)$, onde $1/\tau_0$ é a frequência de “tentativa de inversão” e T é a temperatura. Agora, considerando um conjunto de pequenas partículas idênticas e isoladas, a relaxação magnética segue um decaimento exponencial [25], $M(t) = M(0) \exp[-t/\tau(T)]$. É possível escrever uma expressão para E_B

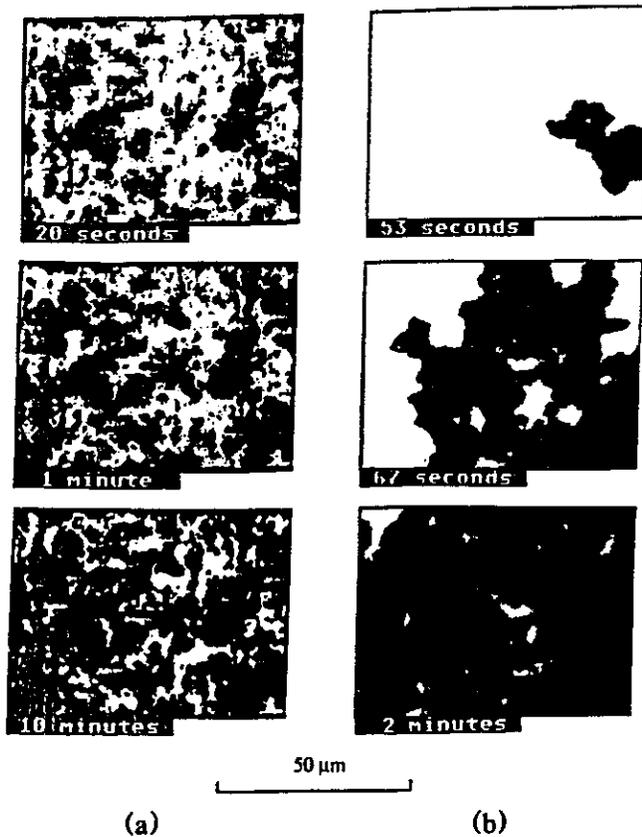
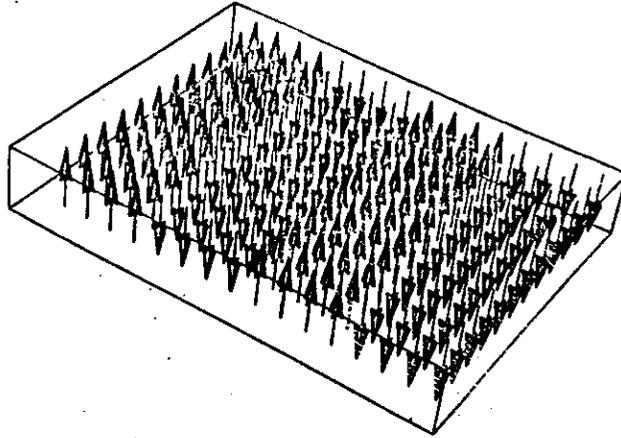


Figura 4.1: Evolução temporal da estrutura de domínio magnético para amostras de (a) 5 monocamadas de Au/Co/Au com campo $H = 470$ Oe e (b) 5.5 monocamadas de Au/Co/Au com campo de $H = 41$ Oe. Momentos magnéticos “para cima” (preto) crescem as custas dos momentos “para baixo” (branco). Os tempos, após a aplicação do campo H , estão indicados na figura (extraído de Pommier *et al.* '90 [23]).

somente no caso de pequenas partículas.

Contrariamente ao que ocorre com pequenas partículas, efeitos temporais em filmes finos são difíceis de resolver analiticamente, isto porque no modelo mais simples temos de levar em conta a interação dipolar de longo alcance na Hamiltoniana o que torna os cálculos analíticos impraticáveis. Portanto, a fim de se obter alguma informação (mesmo qualitativa) sobre os mesmos se torna necessário utilizar a técnica de simulação Monte Carlo (MC). Nós focamos nossa atenção na influência das interações dipolo-dipolo sobre a relaxação magnética e sobre a dinâmica da formação de domínio.

Nós estudamos o processo de relaxação magnética em direção ao estado fundamental



The AF4 phase ($h = 4$).

Figura 4.2: Estado fundamental típico originado da relaxação magnética de um conjunto de momentos magnéticos interagindo com uma hamiltoniana com termos de troca (curto alcance) e dipolo-dipolo (longo alcance). Fase AF4 com largura de listra $h=4$. Extraído da Ref. [27]

partindo com todos os momentos magnéticos alinhados. Para uma magnetização perpendicular ao plano do filme ($m_{\perp} = 1$ e $m_{\parallel} = 0$) a presença da interação dipolo-dipolo pode dar origem a um estado fundamental composto de um padrão de domínio com formas alternadas de spins "para cima" (+1) e "para baixo" (-1) (Vide Fig. 4.2).

Neste Capítulo nós apresentamos uma análise detalhada dos processos de magnetização relacionados a efeitos temporais por um modelo que descreve muito satisfatória o comportamento em filmes finos.

Na Seção 4.2 apresentamos a Hamiltoniana do sistema e outros detalhes relacionados a simulação MC. Na Seção 4.3 apresentamos aspectos gerais da relaxação magnética em filmes finos com anisotropia perpendicular. Será apontado que existem dois aspectos distintos da relaxação; (1) ou pela nucleação de alguns domínios seguido por um rápido crescimento dos domínios magnéticos, (2) ou pela nucleação de muitos domínios em posições aleatórias do filme. Na Seção 4.4 nós discutiremos o papel da interação dipolo-dipolo na relaxação magnética. Como será visto, nós obteremos um decaimento exponencial (ou lei de potência) quando a influência das interações dipolo-dipolo é pe-

quena (ou grande), comparando-a à interação de troca, respectivamente. A intensidade relativa da interação dipolo-dipolo e a interação de troca é medida pelo parâmetro α . Na Seção 4.5 nós discutimos a origem da energia de nucleação de domínio e sua dependência em α . Na Seção 4.6, nós iremos discutir a histerese magnética. Na Seção 4.7 nós discutimos a dinâmica de formação, crescimento e rearranjo dos domínios magnéticos em direção ao padrão do estado fundamental. Na Seção 4.9 comparamos a forma e geometria dos domínios obtidos nas simulações com os resultados experimentais existentes na literatura e veremos que o modelo proposto tem sucesso ao prever os comportamentos observados nos experimentos. Finalmente, na Seção 4.10 apresentamos as conclusões gerais deste capítulo.

4.2 Hamiltoniana

Como discutido acima a Hamiltoniana que será estudada em nosso modelo apresenta a forma,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + \frac{\mu^2}{a^3} \sum_{i,j} \frac{\sigma_i \sigma_j}{r_{ij}^3} - H \mu \sum_i \sigma_i \quad (4.1)$$

onde a variável σ_i assume os valores ± 1 (valores das projeções ao longo do eixo perpendicular ao plano do filme) sobre uma rede quadrada bi-dimensional. A primeira soma representa a interação de troca atuando apenas entre primeiros vizinhos (J é a constante de troca). O segundo termo representa a interação dipolo-dipolo de longo alcance, cuja soma é sobre todos os pares de momentos magnéticos (μ) existentes na rede. As distâncias entre os momentos magnéticos, r_{ij} , é medida em unidades de parâmetro de rede (a). O último termo denota a interação entre os momentos magnéticos e um campo magnético externo (H). Para efeito de simplicidade podemos reescalar a Hamiltoniana acima como:

$$H' = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + \alpha \sum_{i,j} \frac{\sigma_i \sigma_j}{r_{ij}^3} - h \sum_i \sigma_i \quad (4.2)$$

onde o campo magnético (H) na Eq. 4.1 é normalizado por J/μ que resulta em $h = H\mu/J$. O único parâmetro do modelo é a intensidade relativa da interação de dipolo-dipolo e a interação de troca expressa pelo fator $\alpha \equiv \mu^2/Ja^3$.

Um valor grande de α ($\alpha \gg 1$) significa que a interação dipolo-dipolo domina sobre as outras energias do sistema (a energia de troca e a energia do campo magnético aplicado). Devido aos sinais opostos nos primeiros dois termos da Eq. 4.2 surge uma competição entre os mesmos: A interação de troca (J) favorece um alinhamento paralelo entre os momentos magnéticos (μ), enquanto a interação dipolar gera um alinhamento antiparalelo. É bom notar que o termo de Ising (assim como o campo magnético) faz o papel da anisotropia perpendicular ao plano do filme, e em sistemas reais isto corresponde a restringir os momentos magnéticos ao longo desta direção. Ao invés da análise tradicional de equilíbrio usualmente feita com a técnica de simulação Monte Carlo (MC), analisamos as propriedades de não equilíbrio (essencialmente os efeitos de relaxação) deste sistema usando a simulação MC com a dinâmica de Metrópolis de "single-spin-flip" [28].

Partindo com todos os spins alinhados a magnetização e a energia do sistema relaxam, em direção ao equilíbrio, com uma taxa dependendo dos valores de α , do campo magnético aplicado (h) e da temperatura ($T' = k_B T/J$; T' é a temperatura reescalada). Nós consideramos que os momentos magnéticos (μ) são acoplados com o banho térmico a uma dada temperatura T' . A função da temperatura é inverter aleatoriamente os momentos (μ) permitindo a relaxação do sistema. Logo, a escolha aleatória dos momentos magnéticos e o teste de MC corresponde a uma "interação" entre o sistema e o banho térmico. A unidade de tempo é definida como um passo de MC por spin; que corresponde a $L \times L$ escolhas aleatórias de configurações de spins e seus respectivos testes de aceitação ou rejeição em um rede de tamanho $L \times L$. Neste ponto é útil notar que a evolução temporal do sistema não se origina de qualquer equação determinística para a magnetização, como a equação de Landau-Lifshitz [29]; a dinâmica obtida aqui é intrínseca ao método MC [28].

Isto significa que nossa unidade de tempo não é, a princípio, relacionada ao intervalo de tempo real. Contudo, enfatizamos o fato que nós focamos nossa atenção no efeito da interação de dipolo-dipolo no processo de magnetização e NÃO na determinação dos valores de tempo de relaxação. Notamos também que aplicando o método MC ao modelo, diferentes probabilidades de aceitação podem ser usadas como, por exemplo, probabilidade de Glauber [28], ou expressões de probabilidades usadas em simulação de annealing [30].

Nós usamos redes de $L \times L$ momentos magnéticos com $L = 32, 64, 128$ e 256 . Usamos condições de contorno semi-abertas; i.e., condições de contorno periódicas para interação de troca e aberta para interações de dipolo-dipolo.

A consequência principal desta modificação relativa à condição de contorno aberta para todos os termos da Hamiltoniana é que os resultados permanecem qualitativamente os mesmos, até para valores pequenos de L . Para condições de contorno abertas nós estimamos que o tamanho do sistema deve ser maior que 100^2 momentos a fim de eliminar a influência das fronteiras (nós iremos retornar a este ponto adiante). Nós também usamos a técnica de soma de Ewald (método das imagens) [31] para sistemas de tamanho pequeno ($L=32$) e nenhuma diferença significativa foi observada em relação a condições de contorno semi-abertas. Como as análises de domínio são sem significado para sistemas pequenos e, para valores maiores de L o tempo de simulação requerido se torna muito grande com a técnica de soma de Ewald, nós preferimos usar condições de contorno semi-abertas; e com elas, fomos capazes de obter a mesma dependência em α para padrões do estado fundamental (diagrama de fases) como aqueles referidos por Mac Issac [27].

É importante ressaltar que a aplicabilidade da Hamiltoniana de Ising modificada Eq. 4.2 a fim de simular a relaxação magnética em filmes ultrafinos é suportada por medidas recentes do expoente crítico β em monocamadas Fe/Ag epitaxial [32] ($\approx 2-3$ monocamadas). Os valores de β obtidos são característicos de um comportamento tipo

modelo de Ising bi-dimensional, indicando assim que um caráter bi-dimensional parece remanescer para algumas monocamadas. Nós esperamos que nosso modelo seja aplicável para sistemas com algumas monocamadas, 5 ou 6 Ref. [23], com a anisotropia magnética perpendicular ao plano do filme.

As simulações apresentadas neste capítulo foram realizadas num conjunto de 7 estações de trabalho IBM RISC/6000, modelos 250 e 370 com 32 Mb e 256 Mb de memória, respectivamente. Os programas foram realizados em série e rodados independentemente em cada máquina.

Todos os programas foram desenvolvidos em linguagem C e foi criado um procedimento especial para gerar padrões de domínios magnéticos em formato GIF. O programa encapsula as imagens dentro de um arquivo HTML onde nós podemos seguir todas as seqüências de simulação on-line através de um Navegador Web [33].

4.3 Dinâmica da relaxação magnética

Antes de apresentarmos nossos resultados será útil discutir brevemente a dependência temporal da relaxação magnética. Primeiro, consideramos um sistema de momentos magnéticos (μ) independentes e anisotrópicos assumindo valores ± 1 , em contato com um banho térmico a uma temperatura fixa (T) e submetido a um campo magnético de saturação (h_{sat}). Para um dado instante de tempo (t_0) o campo magnético é desligado e os momentos magnéticos (μ) relaxam em direção a uma situação de equilíbrio consistindo de um número igual de momentos (μ) apontando para cima ($\sigma_i = +1$) e para baixo ($\sigma_i = -1$). Como a mudança de configuração para um dado momento é um evento independente dos outros momentos, é fácil concluir que a magnetização decai seguindo uma dependência exponencial [34]. Este comportamento ocorre, obviamente, para qualquer T (após desli-

gado o campo de saturação) pois não há interação entre os momentos magnéticos; eles são independentes. Esta relaxação é descrita por um **único** tempo de relaxação dado por $\tau = \tau_0 \exp(E_B/k_B T)$, onde $1/\tau_0$ é a frequência de tentativa de "flip" e E_B é a energia de barreira associada a anisotropia do momento magnético. A introdução de uma desordem; por exemplo, momentos magnéticos diferentes, origina uma distribuição de energia de barreira e, portanto, uma distribuição de tempos de relaxação (τ_0). Consequentemente, a relaxação magnética aparece como uma soma de funções exponenciais com diferentes tempos de relaxação, resultando em um decaimento logarítmico global [35]. Recentemente, uma abordagem interessante foi feita por Dahlberg e colaboradores [36] e Kirby e colaboradores [37].

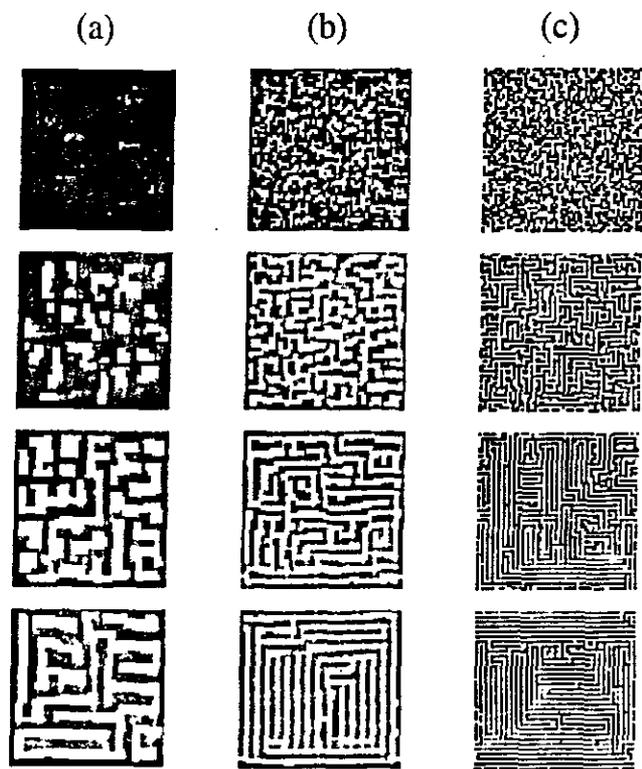


Figura 4.3: Padrão de domínio durante a relaxação magnética para um valor de campo externo $h = 0$ e $T' = 0.35$. As seqüências verticais correspondem a instantes $t=1, 10, 10^2$ e 10^3 passos MC. (a) $\alpha = 0.35$, (b) $\alpha = 0.5$ e (c) $\alpha = 1.0$. $\alpha_{critical} \sim 0.37$ (traído de Sampaio et al. [51]).

Eles consideraram um sistema sem qualquer desordem (ou seja, homogêneo), e portanto distinto do citada acima, com momentos magnéticos interagindo através de uma interação de dipolo-dipolo tratado em **aproximação de campo médio**. Nos trabalhos uma expressão para barreira de energia, contendo informação sobre as interações de dipolo-dipolo, foi usada para calcular ou simular a relaxação magnética. Ao invés do decaimento exponencial (esperado para um sistema sem desordem), eles encontraram uma relaxação magnética dada por um decaimento "quase-logarítmico". Nós temos dois comentários a fazer sobre esta abordagem: (1) Temos que desenvolver uma expressão para a barreira de energia fazendo algumas hipóteses e (2) A aproximação de campo médio leva em conta **igualmente** a influência de momentos magnéticos (μ) próximos e distantes.

ao invés da correta ponderação das interações de dipolo-dipolo. Em nosso método, a dinâmica se origina da hamiltoniana (Eq. 4.2) usando o método MC, **sem qualquer hipótese adicional.**

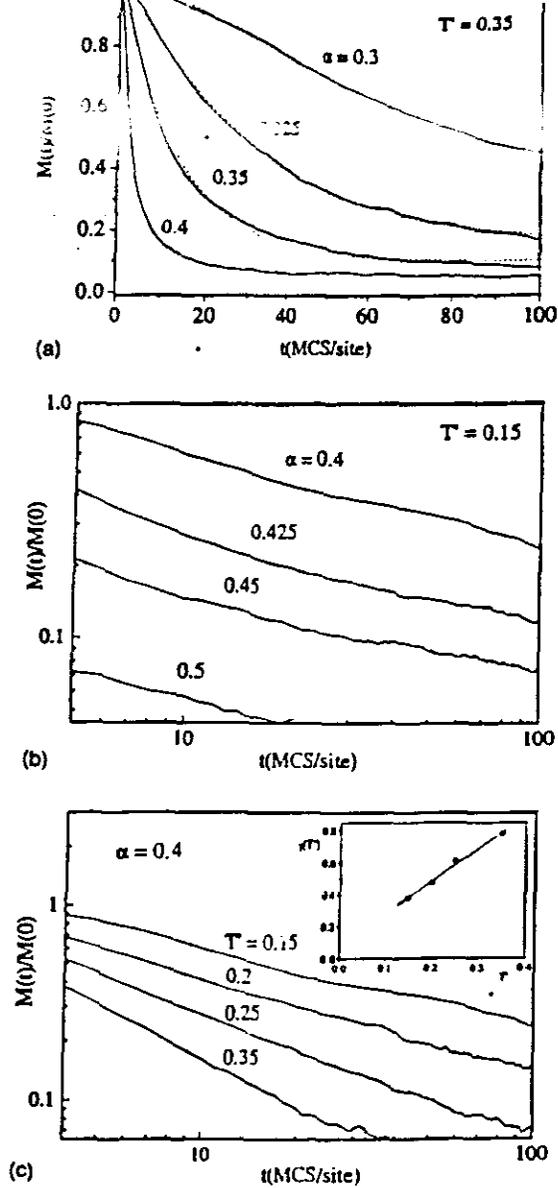


Figura 4.4: Relaxação magnética para um sistema de 64×64 momentos magnéticos: (a) $T' = 0.35$, $h = 0$, e $0.3 < \alpha < 0.4$; (b) $T' = 0.15$, $h = 0$, e $0.4 < \alpha < 0.5$, gráfico em escala log-log; (c) $\alpha = 0.4$, $h = 0$, e $T' = 0.15, 0.2, 0.25$ e 0.35 , gráfico em escala log-log. A variação da temperatura da inclinação $\gamma(T')$ é mostrada no inset. (extraído de Sampaio et al. [51])

O método MC é muito útil para esclarecer alguns aspectos relacionados a dinâmica da relaxação da magnetização. Em casos limites; i.e., para valores muito pequenos (e muito grandes) de α , comportamentos diferentes da relaxação magnética emergem, com um "crossover" em um valor crítico $\alpha = \alpha_c$. Nesta abordagem do Método MC a diferença de comportamento para $\alpha < \alpha_c$ e $\alpha > \alpha_c$ emerge naturalmente (vide Fig. 4.3). O método MC relevante para o nosso problema pode ser descrito como segue: Partindo com todos os momentos (μ) para cima ($\sigma_i = 1$), para $\Delta E \leq 0$ [ΔE é a variação de energia devida a inversão de um spin, $\Delta E = -2H(\sigma_i)$] o teste de MC (ou visita) sempre faz a inversão de um momento magnético; ou seja, $\sigma_i = \pm 1 \Rightarrow \sigma_i = \mp 1$.

Nos casos onde $\Delta E > 0$ a inversão ocorre se a probabilidade p_i [$p_i = \exp(-\Delta E/T')$] é maior que um número aleatório entre 0 e 1. Em outras palavras, $\Delta E \leq 0$ implica em $p_i = 1$ e $\Delta E > 0$ implica em $0 < p_i < 1$. A fim de se obter α_c , nós usamos a condição $\Delta E > 0$ com p_i assumindo um valor pequeno. Se esse valor é muito pequeno, as inversões dos momentos magnéticos tornam-se raras e independentes umas das outras, resultando então em um decaimento exponencial. Para valores grandes de p_i a presença dos vizinhos torna-se importante e a relaxação magnética segue um decaimento temporal do tipo lei de potência. Por exemplo, até mesmo para p_i tão pequeno quanto 0.05, depois de $L \times L$ testes de MC (ou seja, o primeiro passo de MC) cerca de $0.05L^2$ momentos se invertem, produzindo uma redução da magnetização de 1.0 para 0.9. Esse valor de p_i ainda corresponde a uma desmagnetização que segue um decaimento tipo lei de potência. Nós estimamos o valor de p_i , que separa estes dois regimes, variando α e ajustando as curvas por uma exponencial ou um decaimento tipo lei de potência. O valor de p_i estimado é 0.01.

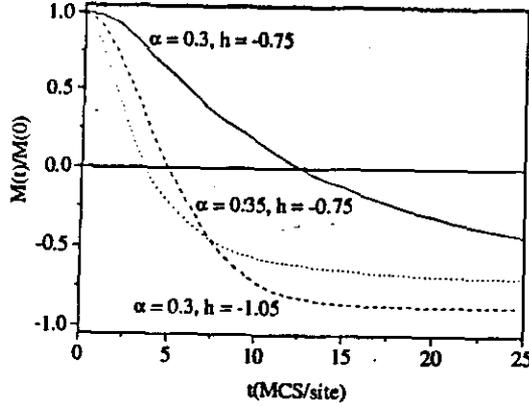


Figura 4.5: Relaxação magnética para valores diferentes de α e h para $T' = 0.15$ e um rede de tamanho 64×64 momentos magnéticos. (extraído de Sampaio et al. [51])

Além disso, a dependência sobre a temperatura de p_i leva a uma pequena dependência da temperatura e campo sobre α_c . Tomando a condição acima nós fazemos explícito ΔE [$\Delta E = -2H'(\sigma_i) = -T' \ln p_i$] e nós encontramos $\alpha_c(T') = [(T'/2) \ln p_i + 4] / \sum(1/r_{ij}^3)$ [$\sigma_i = 1, p_i \cong 0.01, h = 0, \text{ e } \sum(1/r_{ij}^3) \cong 9.03$]. Assim, para valores típicos de temperaturas ($\cong 0.3$) e na ausência de um campo magnético nós obtemos $\alpha_c \cong 0.37$.

Para $\alpha > \alpha_c$ o sistema se desmagnetiza espontaneamente no início do processo de relaxação independente da temperatura já que ΔE é sempre negativo. Isto ocorre pois no início da relaxação todos os momentos estão alinhados e o efeito da interação dipolar (controlada por α) é justamente torná-los antiparalelos; logo para $\alpha > \alpha_c$ temos $\Delta E < 0$ no início da relaxação. Como os momentos magnéticos são escolhidos aleatoriamente, os momentos se invertem em posições aleatórias do filme. Contudo, antes que todos os momentos possam ser visitados uma vez, durante os primeiros passos de MC, o efeito da vizinhança local torna-se importante, permitindo um acréscimo a ΔE e reduzindo assim a probabilidade da inversão. Portanto, nesta faixa, a relaxação ocorre de forma rápida no início do processo e mais lenta depois de alguns passos de MC. O efeito da vizinhança é induzir uma correlação espacial de longo alcance entre as inversões (ou eventos) e permitir

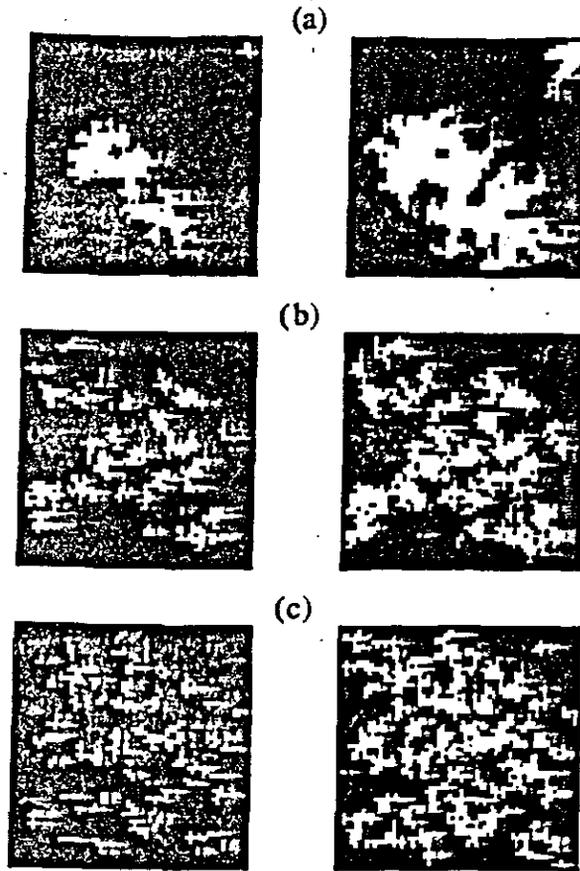


Figura 4.6: Configuração de padrões de domínios durante a relaxação correspondente à Fig. 4.5 para instantes onde a magnetização é 0.8 (coluna esquerda) e 0.45 (coluna direita) e para (a) $\alpha = 0.3, h = -0.75$, (b) $\alpha = 0.35, h = -0.75$, e (c) $\alpha = 0.3, h = -1.05$. (extraído de Sampaio et al. [51])

uma relaxação com uma dependência tipo lei de potência (Vide Fig. 4.4b e Fig. 4.4a para $\alpha = 0.4$). Deve ser enfatizado que as dependências tipo lei de potência são características de sistemas complexos onde as correlações temporal e espacial estão presentes [38]. Assim, o processo de desmagnetização associado com $\alpha > \alpha_c$ é a nucleação de muitos domínios em posições aleatórias do filme. (Vide Figs. 4.3(b) e (c)).

Por outro lado, para $\alpha < \alpha_c$ em baixas temperaturas, ΔE é sempre positivo e a probabilidade de inversão é muito pequena. Isto ocorre pois, nesta faixa, a interação de troca predomina e pela expressão de $\Delta E = -2H'(\sigma_i)$ vemos que, para $h = 0$, $\Delta E > 0$.

Contudo, quando um dado momento (μ_0) se “inverte”, os próximos momentos a se inverterm com “uma maior probabilidade” nos passos seguintes de MC são aqueles que se posicionam como primeiros vizinhos a (μ_0), tendo em vista que ΔE é menor para eles. Isto ocorre porque a interação de curto alcance tem maior influência que a interação de longo alcance dipolar forçando um alinhamento ferromagnético de momentos vizinhos. Portanto, depois da nucleação, somente os momentos na fronteira (ou **domain wall**) se invertem, crescendo o domínio magnético. *Para valores pequenos de α a desmagnetização é caracterizada pela nucleação de alguns domínios seguida por um rápido crescimento do tamanho dos domínios magnéticos.* Para esta faixa de α ($\alpha < \alpha_c$) como a interação de curto alcance sobrepuja as interações de dipolo-dipolo, a inversão de momento (μ) na fronteira do domínio é favorecida, ao invés de ocorrer no interior domínios. Este tipo de inversão resulta em uma relaxação magnética que segue um decaimento exponencial (Vide Fig. 4.4a).

A dependência temporal da relaxação magnética foi simulada numa rede de tamanho $N=64 \times 64$ momentos magnéticos, para $\alpha = 0.3$ e $\alpha = 0.35$, para a temperatura típica ($T' = 0.15$) e na presença de um campo magnético externo (h) numa direção oposta à magnetização inicial ($h = -0.75$ e -1.05) vide Fig. 4.5. Os resultados mostram uma rápida desmagnetização para valores crescentes de α e de um campo externo (h) fixo, como esperado. A relaxação se origina da formação de domínios magnéticos que apresentam dois comportamentos distintos, cada um correspondendo a uma dinâmica diferente de formação de domínios e crescimento. Nós mostramos nas Figs. 4.6A - C, as configurações de momento para o instante quando a magnetização alcança os valores 0.8 e 0.45, aproximadamente. As relaxações para ($\alpha = 0.35, h = -0.75$) e ($\alpha = 0.3, h = -1.05$) [Figs. 4.6(b) e (c)] são caracterizadas pela nucleação de muitos domínios em posições aleatórias do filme, enquanto para ($\alpha = 0.3, h = -0.75$) [Fig. 4.6(a)] a relaxação é caracterizada pela nucleação de poucos domínios com o crescimento rápido do domínio (ou rápida propagação da parede). Deve ser notado que a dependência temporal da relaxação e os padrões de domínios mostrados nas Figs. 4.6(a) - (c) estão em concordância muito boa com as ob-

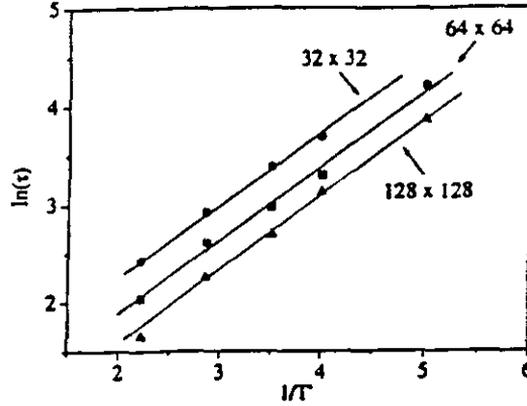


Figura 4.7: Gráfico de $\ln \tau$ vs $1/T'$ para redes de tamanho $L = 32, 64, 128$. $\alpha = 0.35$, e $h = 0$. (extraído de Sampaio et al. [51])

servações magneto-ópticas realizadas em filmes ultrafinos de Co por Ferré e colaboradores (Vide Fig. 4.1).

4.4 Dependência da relaxação magnética com α e a temperatura (T)

A fim de estudar em mais detalhes os efeitos que surgem ao variarmos o parâmetro α sobre a relaxação magnética, nós simulamos o decaimento da magnetização pela mudança de α para uma dada temperatura ($T' = 0.35$) na ausência de um campo magnético ($h = 0$), para uma rede de tamanho $N = 64 \times 64$ momentos. Nós observamos um rápido crescimento na taxa de desmagnetização com o acréscimo de (α) [Vide Figs. 4.4a e b]. Para uma melhor apresentação nós reduzimos o valor da temperatura na Fig. 4.4(b) a fim de seguir continuamente a influência de α ; caso contrário a magnetização iria atingir valores muito pequenos. Nós caracterizamos dois comportamentos da relaxação magnética onde o comportamento principal do primeiro surge para $\alpha < \alpha_c$, e gera um decaimento exponencial da magnetização [Vide linhas pontilhadas Fig. 4.4(a)]. Assim, neste caso a relaxação magnética pode ser escrita como

$$M(t)/M(0) = \exp[-t/\tau(T')] \quad (4.3)$$

onde $\tau(T')$ é o tempo de relaxação. O outro comportamento, para $\alpha > \alpha_c$, a relaxação é caracterizada por um decaimento temporal do tipo lei de potência

$$M(t)/M(0) = a(\alpha, T')t^{-\gamma(T')} \quad (4.4)$$

que está ilustrado na Fig. 4.4(b) através de um gráfico log-log. O conjunto de linhas retas paralelas observadas neste gráfico sugere que o expoente (γ) da lei de potência é independente de α . Além disso, a variação da temperatura para um valor fixo de α [$\alpha = 0.4$; vide também Fig. 4.4(C)] permite-nos observar uma dependência linear de γ com a temperatura [ver a redução da Fig. 4.4(C)]. Portanto, estes gráficos sugerem [Figs. 4.4(B)-(C)] que para $\alpha > \alpha_c$, a relaxação magnética pode ser escrita como a equação acima [Eq. 4.4].

Resumindo, a dependência temporal da magnetização para $\alpha < \alpha_c$ é dada por um decaimento exponencial, e para $\alpha > \alpha_c$ ela é dada por um decaimento tipo lei de potência, a primeira e a segunda faixas correspondem a dominância das interações de troca e dipolo-dipolo, respectivamente. Este resultado está em discordância com trabalhos anteriores [36, 37]. Embora estes autores encontrassem um decaimento similar para valores baixos dos parâmetros adicionados a energia de barreira, que pode corresponder ao efeito do parâmetro α , o mesmo não ocorre para valores grandes, onde o decaimento “quase-logarítmico” foi encontrado. A última região é de fato mais relevante, devido a dominância das interações dipolo-dipolo, e corresponde a uma região onde a aproximação de campo médio falha.

Do lado experimental, ambas dependências de tempo de relaxação foram observadas. O decaimento exponencial foi apenas observado alguns anos atrás em compostos inorgânicos com pequenos e. aglomerados idênticos orientados de Mn_{12} (REF. [25]). No

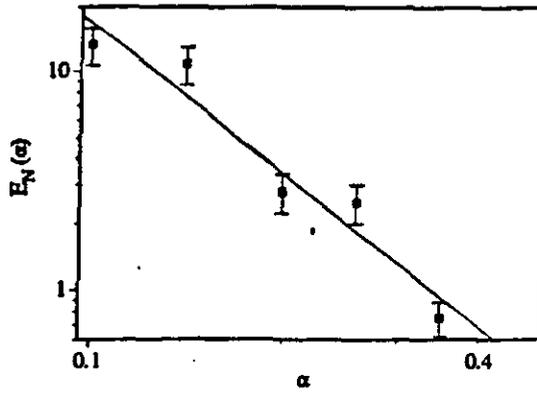


Figura 4.8: Dependência da energia de nucleação de domínio (E_N) com α em escala log-log. (extraído de Sampaio et al. [51])

caso de decaimento como lei de potência, a investigação é mais sutil devido às limitações nas medidas de magnetização para escalas de tempo pequenas. Assim, o decaimento como lei de potência na faixa temporal acessível aos experimentos, que é usualmente maior do que alguns minutos, pode ser facilmente confundido com um decaimento logarítmico [39].

4.5 Energia de nucleação dos domínios

Como discutido acima, a desmagnetização começa com a nucleação dos domínios magnéticos e a quantidade dos centros nucleados é dependente de α e da temperatura (T). A dependência em α se origina da competição das interações de troca e dipolo-dipolo e a temperatura (T) é um fator de “estímulo” da probabilidade de nucleação. Esta imagem pode ser melhor compreendida considerando que o conjunto dos momentos magnéticos vêm apenas uma barreira de energia; essa barreira inibe a nucleação dos domínios magnéticos.

A relaxação magnética segue os mesmos quadros. Para $\alpha < \alpha_c$, a relaxação magnética segue um decaimento exponencial [Eq. 4.3] com $\tau(T')$ seguindo a lei de ativação térmica.

$$\tau(T') = \tau_0 \exp(E_b/T') \quad (4.5)$$

onde E_b é a energia de barreira. Portanto, nós identificamos a energia de barreira (E_b) como a energia de nucleação de domínio E_N . Na Fig. 4.7, nós apresentamos o gráfico de $\ln \tau$ versus $1/T'$ para vários tamanhos de rede ($L = 32, 64, \text{ e } 128$) e, de acordo com a expressão para $\tau(T')$ (Eq. 4.5) a inclinação obtida deste gráfico permiti-nos obter E_N . A linearidade entre $\ln \tau$ e $1/T'$ é observada e todas as linhas retas apresentam aproximadamente a mesma inclinação, independente do tamanho da rede. *Isto significa que a energia de barreira é independente do tamanho do sistema*, o que não é surpreendente devido ao caráter de curto alcance existente para $\alpha < \alpha_c$.

Um outro aspecto a ser investigado é como E_N muda para valores diferentes de α . Repetindo o mesmo procedimento da Fig. 4.7, mas agora para valores decrescentes de α , ainda na faixa $\alpha < \alpha_c$, nós obtivemos a dependência em α da energia de nucleação $E_N(\alpha)$, como é mostrado na Fig. 4.8. Um comportamento lei de potência é observado através de um gráfico log-log de E_N versus α , que é expresso por $E_N(\alpha) = C(\alpha)^{-2.3}$. Como seria esperado, decrescendo α há um acréscimo de E_N devido ao decréscimo da influência das interações dipolo-dipolo. Além disso o limite $\alpha \rightarrow 0$ produz uma divergência em E_N visto que o sistema não tende a se desmagnetizar. Este limite significa que todos os momentos permanecem alinhados como no modelo de Ising bi-dimensional para temperaturas abaixo da temperatura crítica de ordem-desordem. Por outro lado, o aumento de α resulta num rápido decréscimo de E_N . Note que, ao mudarmos α de 0.1 para 0.35 há um decréscimo de E_N por um fator de 10.

Neste ponto é interessante analisar a influência dos efeitos de tamanho finito em nossos resultados. Um efeito de tamanho é claramente observado na Fig. 4.7. Aumentando o tamanho da rede resulta em um decréscimo do tempo de relaxação para qualquer temperatura. Explorando este ponto além, mostramos na Fig. 4.9 o gráfico de $\ln \tau$ versus $L \times L$ (tamanho da rede) para uma temperatura fixa ($T' = 0.35$). A tendência para saturação surge para um tamanho acima de aproximadamente 128×128 momentos magnéticos e a

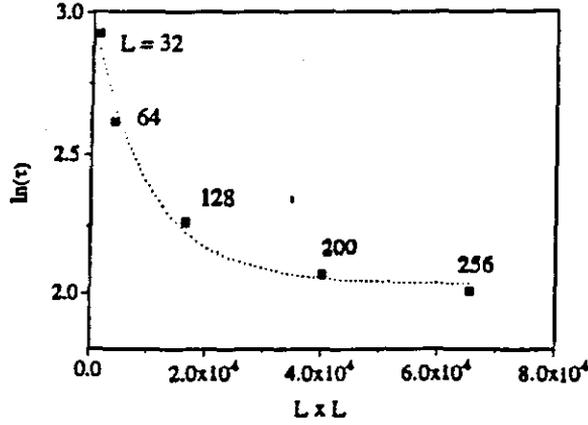


Figura 4.9: Dependência do tempo de relaxação com o tamanho do sistema ($h = 0, T' = 0.35$, e $\alpha = 0.35$).

abordagem da saturação segue uma dependência exponencial,

$$\ln \tau = \exp(-aL^2) + \ln \tau_{(L \rightarrow \infty)}, \quad (4.6)$$

onde $\ln \tau_{(L \rightarrow \infty)}$ é o limite de $\ln \tau$ para um sistema de tamanho infinito. De acordo com a lei de ativação térmica [Eq. 4.5)], escrita como

$$\ln \tau = \ln \tau_0 + E_N(\alpha)/T', \quad (4.7)$$

nós podemos comparar estas duas expressões [Eq. 4.6 e Eq. 4.7] de $\ln \tau$ e, lembrando que τ é dependente de α e T' , nós identificamos os termos como $\ln \tau_0 = \exp(-aL^2)$ e

$$\ln \tau_{(L \rightarrow \infty)} = E_N(\alpha)/T' \quad (4.8)$$

respectivamente. O valor de $\ln \tau_{(L \rightarrow \infty)}$ é obtido então diretamente do valor de E_N . Como E_N é independente do tamanho do sistema (Vide Fig. 4.7), $\ln \tau_{(L \rightarrow \infty)}$ pode ser obtido do gráfico de $\ln \tau$ versus $1/T'$ para um sistema tão pequeno quanto 32×32 , por exemplo. Portanto, nós concluímos que todos os resultados discutidos aqui permanecem qualitativamente os mesmos para sistemas *finitos e infinitos*.

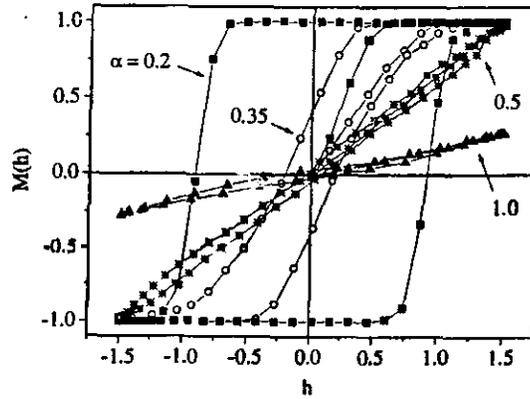


Figura 4.10: Histerese magnética para diferentes valores de α ($\alpha = 0.2, 0.35, 0.5,$ e 1.0) para $T' = 0.35$. A taxa de mudança de campo é 10 passos de MC para cada valor de magnetização. Sampaio et al. [51]

4.6 Histerese Magnética

Histerese é um fenômeno típico de não equilíbrio e a histerese magnética tem sido largamente usada por físicos experimentais a fim de caracterizar o estado magnético. Nós mostramos na Fig. 4.10 curvas de histerese para vários valores de α para uma temperatura fixa ($T' = 0.35$) e para uma taxa de mudança de campo de 10 passos de MC para cada valor de campo magnético. O ponto de partida é o estado desmagnetizado, a campo externo nulo ($h = 0$). Ele produz, para valores de α próximo e acima de α_c , uma dependência quasi-linear entre magnetização e o campo externo (h) até o valor de saturação magnética, com um pequeno efeito de histerese. Como foi mostrado na Seção 4.3, nesta faixa de α ($\alpha > \alpha_c$) a relaxação magnética é mais rápida no início do processo de relaxação e torna-se maior para valores crescentes de α . Assim, o estado desmagnetizado global é rapidamente atingido, e o sistema não está muito longe do equilíbrio nos primeiros passos de MC. O mesmo ocorre com aplicação de um campo magnético; i.e, o valor de magnetização em qualquer campo externo aplicado é próximo ao valor de equilíbrio. Grosseiramente, essa é a razão porque as curvas correspondentes a valores crescente e decrescente de campo externo e a curva “virgem” não são muito diferentes de cada outra; e isto emerge devido a grande mobilidade das parede de domínio. É importante chamar a atenção que pequenos

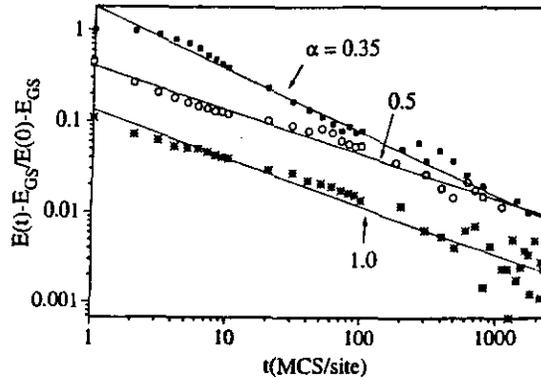


Figura 4.11: Energia do sistema na relaxação relativa ao estado fundamental em escala log-log, para as mesmas condições usadas na Fig. 4.3. Sampaio et al. [51]

efeitos de histerese são obtidos para valores crescentes de α .

Para $\alpha < \alpha_c$, a relaxação magnética é mais lenta no início do processo de relaxação. Como consequência, um dado padrão de domínio sobre uma pequena mudança de campo magnético externo “desloca” o sistema, depois de alguns passos de MC (e.g, 10), a um estado ainda muito longe do equilíbrio. Então, mudanças subsequentes do campo introduzem a irreversibilidade. Seguindo este argumento, é fácil ver que decrescendo os valores de α o tempo de relaxação (τ) torna-se maior, produzindo um grande efeito de histerese. Por outro lado, uma taxa de mudança de campo externo muito baixa permite o sistema aproximar o equilíbrio para qualquer valor do campo, diminuindo assim a histerese magnética.

4.7 Dinâmica da formação e crescimento dos domínios magnéticos

A interação dipolo-dipolo é a chave principal para a formação de domínios magnéticos, e ao invés de investigar os padrões do estado fundamental, nós estamos interessados na formação, crescimento e rearranjo dos domínios magnéticos. O padrão de domínio do

estado fundamental muda do ferromagnético (para $\alpha = 0$), para um estado antiferromagnético (“checkerboard” - tabuleiro de xadrez), para ($\alpha > 2.5$). Para valores intermediários de α o estado fundamental exibe uma estrutura de listras (e.g., ver o diagrama de fases da Fig.6 da Ref. [27], notando que J naquela referência corresponde a $2/\alpha$). A largura das listras depende de α e aumenta exponencialmente com $4/\alpha$ (vide também REF. [27]).

Nós mostramos na Fig. 4.3 padrões de domínio no processo de relaxação magnética para $\alpha = 0.35, 0.5, \text{ e } 1$. A evolução temporal segue ao longo da coluna vertical. Aumentando α o sistema exibe “listras” paralelas com larguras de 4,2, e 1 (em unidades de parâmetro de rede a) como o estado fundamental. A evolução em direção ao estado fundamental é caracterizada por dois passos distintos. **Primeiro**, o sistema atinge um estado desmagnetizado global através da nucleação de alguns domínios com a propagação da parede (para $\alpha < \alpha_c \cong 0.37$ - Fig. 4.3) ou muitos centros de nucleação (para $\alpha > \alpha_c$ - Fig. 4.3), e **segundo**, os domínios organizam-se a fim de minimizar a energia total e, portanto, alcançar o estado fundamental. O rearranjo dos domínios para $\alpha = 1$ é notável, *no primeiro passo de MC o sistema não mostra uma magnetização líquida, exibindo um padrão completamente desordenado; contudo, o padrão de domínio evolue na direção de uma estrutura listrada*.

Embora a relaxação magnética mostre dois comportamentos distintos para $\alpha < \alpha_c$ e $\alpha > \alpha_c$, a energia do sistema durante a relaxação segue dependências idênticas para ambas as faixas de α . Nós mostramos na Fig. 4.11 o decaimento de energia relativo ao estado fundamental para valores diferentes de α , onde um decaimento tipo lei de potência é observado.

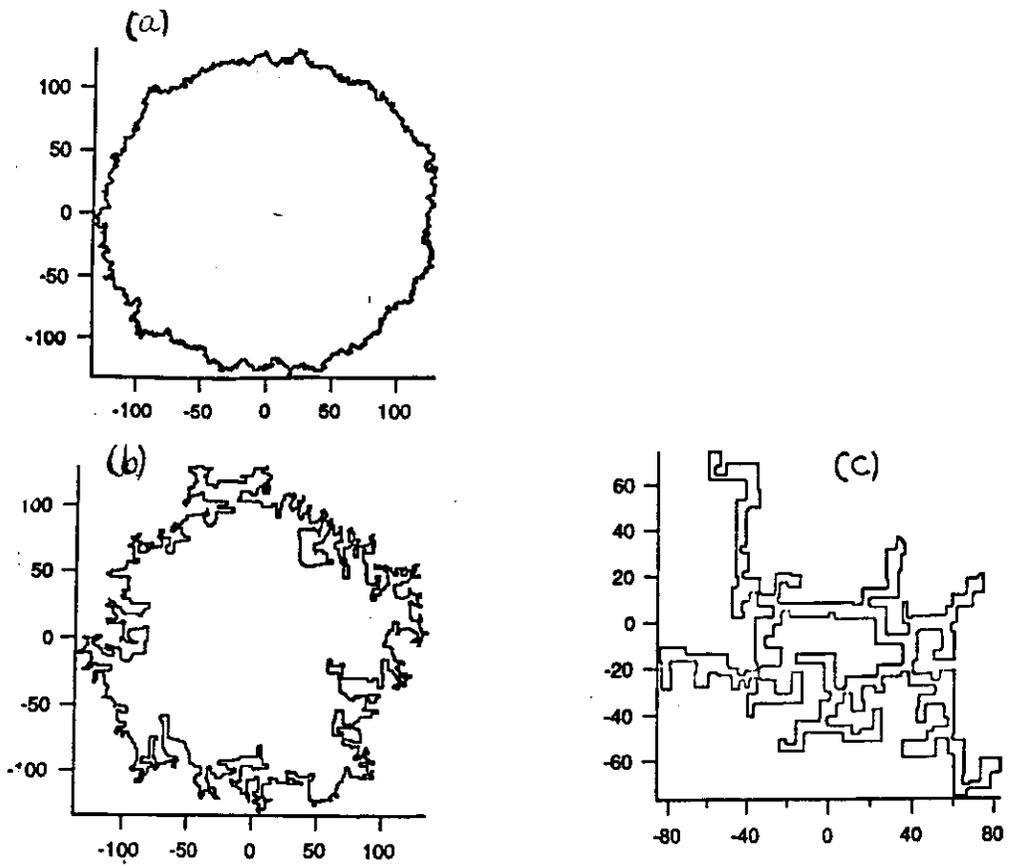


Figura 4.12: Evolução das bordas para valores distintos de campo magnético aplicado (h) e α (a) $h = -3.0$ e $\alpha = 0$, (b) $h = -0.5$ e $\alpha = 0.32$ e (c) $h = 0$ e $\alpha = 0.35$.

4.8 Aspectos geométricos da relaxação: Dependência com relação a α e campo magnético

Na seção anterior observamos a dinâmica dos domínios magnéticos em direção ao estado fundamental a **campo externo nulo** ($h = 0$). Foi visto que a configuração de padrão de domínio é caracterizada por dois comportamentos:

- nucleação de alguns domínios seguida da propagação da parede para $\alpha < \alpha_c \cong 0.37$.
- nucleação de muitos centros em posições aleatórias da rede para $\alpha > \alpha_c$.

Em ambos os casos a configuração final é um estado fundamental em forma de listras cuja largura depende de α (vide Fig. 4.3).

Nesta seção discutiremos a forma dos domínios na relaxação magnética com relação ao efeito conjunto do campo externo (h) e a intensidade da interação dipolar (α). Simulamos

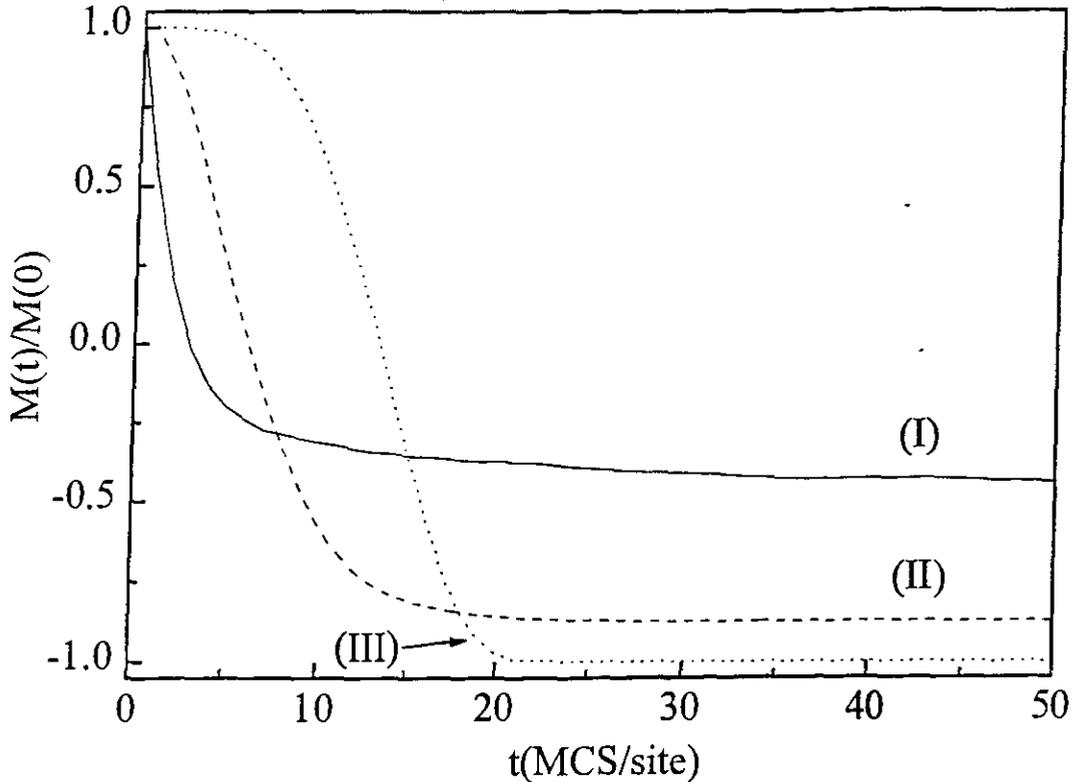


Figura 4.13: Relaxação da magnetização para alguns valores de α e campo aplicado h : (I) $\alpha = 0.4$ e $h = -0.5$, (II) $\alpha = 0.3$ e $h = -1.0$ e (III) $\alpha = 0.1$ e $h = -2.5$.

o desenvolvimento das bordas de um domínio para valores fixos de α e campo aplicado (h). Identificamos, basicamente, três tipos de comportamento (vide Fig. 4.12).

- (a) **campo alto** ($h = -3$) e **α nulo** ($\alpha = 0$): borda evolue aproximadamente circular
- (b) **campo baixo** ($h = -0.5$) e **α alto** $\alpha = 0.32$ (**próximo ao valor crítico α_c**) : borda evolue com alta rugosidade.
- (c) **campo nulo** ($h = 0$) e $\alpha = 0.32$: borda evolue com formato em forma de listras.

Na obtenção das bordas partimos com uma semente de 2×2 spins alinhados ($\sigma = +1$) para uma rede de tamanho 1024×1024 com os valores apropriados de α e h listados acima. Toda a dinâmica foi obtida usando o método de Monte Carlo com a dinâmica de Metrópolis de "single-spin-flip", como nas seções anteriores. A temperatura foi escolhida bem abaixo

da temperatura crítica (a fim de assegurar a relaxação em direção ao estado fundamental) e o campo magnético é aplicado no sentido de inverter a magnetização inicial da sistema. Permitindo o sistema relaxar em direção ao equilíbrio uma nova propriedade, além do tempo de relaxação e estrutura de domínios obtidas previamente, pode ser indentificada - **(a rugosidade da interface)**.

Mudando os valores de α e campo aplicado h , nós ponderamos a interação de dipolo-dipolo ou a interação entre os momentos magnéticos e o campo magnético.

Podemos entender os comportamentos da Fig. 4.12 da seguinte forma:

- comportamento (a): Como o campo magnético tende a alinhar os momentos magnéticos em paralelo, é de se esperar nesta situação **campo magnético alto** ($h = -3.0$) e $\alpha = 0$ que a evolução da parede de domínio tenha muitos momentos magnéticos em paralelo; sendo portanto da forma aproximadamente circular como indicada.
- comportamento (b): Como a interação de dipolo-dipolo tende a alinhar os momentos magnéticos de forma antiparalela, é de se esperar nesta situação **campo magnético baixo** ($h = -0.5$) e α **grande**; $\alpha = 0.32$ que o aumento de α produza uma interface da parede de domínio com um número crescente de momentos antiparalelos, gerando portanto uma parede de domínio de forma rugosa.
- comportamento (c): Nesta situação o campo magnético é reduzido a zero e a interação dipolo-dipolo domina totalmente. Portanto, nos primeiros passos de MC o sistema tende rapidamente ao estado fundamental em forma de listras como indicado na Fig. 4.12(c).

A fim de discutir a influência de α e h na relaxação magnética, $M(t)$, mostramos na Fig. 4.13 as curvas de relaxação magnética para três regimes distintos:

- (I) para $\alpha = 0.4$ e $h = -0.5$.
- (II) para $\alpha = 0.3$ e $h = -1.0$.

- (III) para $\alpha = 0.1$ e $h = -2.5$.

As simulações foram feitas para baixas temperaturas ($T = 0.15$) a fim de evitar nucleações devido a flutuações, permitindo a análise da contribuição para α e h . É importante notar que as curvas (I) e (II) apresentam o valor de α ao redor de $\alpha_c = 0.37$ (na ausência de campo magnético). Destas curvas dois regimes distintos são observados: A curva (I) segue um decaimento lei de potência e a curva (II) segue um decaimento exponencial. Como é bem conhecido, decaimento em forma de lei de potência é característico de interações espaciais de longo alcance ou efeitos de memória de longo alcance, consequentemente, de acordo com o nosso modelo o decaimento em forma de lei de potência (I) deve corresponder a valores altos de α , ou maiores que um valor crítico, α_c . Portanto, os regimes (I) e (II) com a relaxação seguida por uma lei de potência e exponencial, respectivamente, pode ser compreendido inferindo se predomina as interações de longo alcance (dipolo-dipolo) ou curto alcance (interação de troca), respectivamente. Contudo, verificamos que a lei de potência permanece até mesmo na presença de campo magnético. *Em outras palavras, o “crossover” entre estes dois regimes, que ocorre em torno de $\alpha_c \simeq 0.37$ é independente do campo externo aplicado.*

4.9 Forma e geometria dos domínios: comparação com dados experimentais

Neste seção faremos a comparação entre os resultados obtidos com o modelo microscópico exposto na seção 4.2 com aqueles obtidos através de diferentes experimentos em filmes finos com espessuras distintas.

Observações experimentais do reverso da magnetização em metais de transição terrarara amorfos [40]- [42], ligas compostas de Co [43], e sistemas de multicamadas [44] - [47] tem mostrado dois comportamentos distintos do reverso da magnetização: (a) movimento de parede de domínios e (b) nucleação de domínios. A origem destes comportamentos é ainda objeto de discussão e controvérsia. A maioria dos estudos experimentais tem explicado que o comportamento de reverso da magnetização é governado essencialmente por propriedades estruturais tais como variação estrutural local [41], espessura do filme [42] e rugosidade interfacial [45]. Por outro lado, trabalhos teóricos recentes baseados em simulações micromagnéticas bidimensionais [37], [48] - [49] e o modelo de Ising [50] - [?] confirmam que o comportamento do reverso da magnetização pode ser predito com propriedades magnéticas, sem considerar os detalhes da estrutura microscópica.

Mais recentemente, a reversão da magnetização em multicamadas de Co/Pd (Sug-Bong 1998) [52] foi estudado por observação direta da estrutura de domínio usando um microscópio sensível a polarização assim como medidas de viscosidades magnéticas monitorando o ângulo de rotação de Kerr com o tempo. Em ambos os experimentos, a amostra foi primeiro saturada aplicando o campo magnético **normal** ao plano do filme e então, o comportamento do reverso da magnetização foi então investigado aplicando um campo reverso menor que o campo coercivo. Na Fig. 4.14, é mostrado as curvas de histerese medidos por um VSM (magnetômetro de vibração da amostra) para amostras de 2, 3 e 4 Å de espessura de subcamadas de Co. As multicamadas de $(2\text{Å Co}/11\text{Å Pd})_{10}$ (onde o sub-

scripto 10 significa 10 repetições da mesma subcamada de $(2 \text{ A}^\circ \text{ Co}/11 \text{ A}^\circ \text{ Pd})$ exibem uma magnetização de saturação menor e mais quadrada do que os outros loops de histerese Fig. 4.14(b),(c). A inclinação do loop de histerese para a amostra de $(4 \text{ A}^\circ \text{ Co}/11 \text{ A}^\circ \text{ Pd})$ (Fig. 4.14c) pode ser causada pelo campo de desmagnetização mais forte, isto porque o reverso da magnetização é “resistente” para amostras que apresentam um campo de desmagnetização maior durante o processo de reversão [49]. Na Fig. 4.15 é observado os padrões de reverso de magnetização de domínios das multicamadas $(2\text{A}^\circ \text{ Co}/11\text{A}^\circ \text{ Pd})_{10}$, $(3\text{A}^\circ \text{ Co}/11\text{A}^\circ \text{ Pd})_{10}$ e $(4\text{A}^\circ \text{ Co}/11\text{A}^\circ \text{ Pd})_{10}$ multicamadas na ordem de áreas crescentes de reverso de domínio, obtidas para campos aplicados menores que os campos coercivos. Na Fig. 4.16 é mostrado as curvas de relaxação (viscosidade magnética) para amostras $(2\text{A}^\circ \text{ Co}/11\text{A}^\circ \text{ Pd})_{10}$, $(3\text{A}^\circ \text{ Co}/11\text{A}^\circ \text{ Pd})_{10}$ e $(4\text{A}^\circ \text{ Co}/11\text{A}^\circ \text{ Pd})_{10}$ sobre vários campos reversos aplicados (vide figura).

Dos resultados expostos vemos que há um paralelo entre as figuras obtidas com o modelo teórico seção 4.2 e as figuras experimentais mostradas acima. O paralelo da Fig. 4.10 e Fig. 4.14 é obtido ao associarmos valores crescentes de α no modelo **monocamada** descrito na seção 4.2 com espessuras crescentes das subcamadas de Co. Isto é razoável já que quanto *maior* o valor de α maior será a contribuição do termo dipolo-dipolo na Hamiltoniana. Da mesma forma quanto *mais espesso* o filme maior será a contribuição da interação dipolar na amostra. Analogamente, observamos na Fig. 4.15 que o padrão de reverso de magnetização na forma de *movimento de parede* ocorre para uma ou duas camadas de Co. Acima disto observamos uma transição para um comportamento de *nucleação de domínios* acima de 3 camadas de Co. Paralelamente, no modelo teórico de uma camada, obtemos o [movimento de parede (nucleação de domínios)] para valores de α [pequeno ≈ 0.35 (grande ≈ 1.0)] (vide Fig. 4.3). A associação número crescente de camadas com valores crescentes de α é corroborada por este resultado. Outro resultado que confirma este paralelo são as curvas de relaxação (viscosidade magnética) indicadas nas Figs. 4.16. Comparando a Fig. 4.4a com as Figs. 4.16a.b e c obtemos qualitativamente os mesmos resultados para valores pequenos de α ($\alpha \sim 0.3$) com poucas camadas (2 a

3) de Co e valores grandes de α ($\alpha \geq 0.4$) com números maiores de camadas (acima de 4). A convexidade da curva (côncava ou convexa) no início da relaxação está relacionada com a energia da barreira a ser vencida no processo de reversão. A forma global da curva é uma típica relaxação térmica exponencial.

Na Fig. 4.11 observamos que para valores pequenos de α (ou equivalentemente poucas camadas de Co) a energia de barreira é relativamente alta, dificultando o processo de reversão isolado, ocorrendo um rápido avanço da parede de domínio; com o decréscimo desta energia para valores grandes de α a reversão isolada torna-se mais fácil mudando assim a convexidade do início da relaxação e ocorrendo a nucleação de muitos domínios em pontos distintos da rede. Um ponto importante a ser observado é que devido ao valor considerável do campo desmagnetizante (para muitas camadas ou valores grandes de α) o estado de equilíbrio é dependente do campo externo aplicado; apenas para campos externos consideráveis o estado final de equilíbrio é atingido. Dos resultados apresentados vemos que o mecanismo de reversão de domínios é governado por um processo de ativação térmica (lei de Arrhenius - seção 4.5) determinado por propriedades macroscópicas (no caso espessura da amostra) que podem ser modeladas por um parâmetro microscópico (intensidade da interação dipolar α).

Um outro resultado experimental que corrobora a afirmação acima é a medida do tempo de relaxação (τ) versus o inverso da temperatura ($1/T$) para a magnetização remanente perpendicular ao plano do filme para uma amostra de 4 monocamadas de Fe sobre Ag(100) [53] (vide Fig. 4.17b)

4.10 Resumo e conclusão

Neste trabalho nós modelamos a relaxação magnetização e a formação de domínios magnéticos em filmes ultrafinos com **forte** anisotropia perpendicular ao plano do filme usando simulação Monte Carlo. Usamos uma Hamiltoniana clássica de Ising numa rede quadrada, incluindo interação de dipolo-dipolo de longo alcance e um campo magnético externo. Em nosso modelo, o sistema relaxa inicialmente em direção a estrutura do estado fundamental partindo com uma configuração inicial com todos os momentos magnéticos alinhados.

Mostramos a existência de um valor crítico de α ($\alpha \cong 0.37$) que separa a relaxação magnética em dois comportamentos distintos. Para $\alpha < \alpha_c$, a relaxação magnética segue um decaimento temporal exponencial, e para $\alpha > \alpha_c$ o sistema desmagnetiza espontaneamente e segue um decaimento tipo lei de potência. Além disso, os padrões de domínio associados com esses comportamentos no início da relaxação são respectivamente (i) a nucleação de alguns domínios com crescimento do tamanho do domínio e (ii) a nucleação de muitos domínios em pontos arbitrários do filme, respectivamente.

Estas duas faixas de α ilustram o papel da interação de dipolo-dipolo nas propriedades magnéticas do sistema relacionadas a efeitos temporais, e deve ser enfatizado que estes efeitos tem sido observado experimentalmente por medidas magneto-ópticas em filmes ultrafinos de Co[23]. Apesar da simplicidade do modelo nós temos obtido outros efeitos temporais tais como a energia de nucleação de domínio, sua dependência em α , e a histerese magnética. Todos estes resultados derivam da Hamiltoniana usando o Método de MC sem qualquer hipótese adicional. É interessante notar que a abordagem da barreira de energia, usada para pequenas partículas, pode ser aplicada para filmes ultrafinos, pelo menos na faixa $\alpha < \alpha_c$.

Para a faixa $\alpha > \alpha_c$, onde a interação de dipolo-dipolo domina, o decaimento tipo lei de potência parece ser mais geral do que tem sido discutido aqui, e sugere que os momentos magnéticos (ou partículas pequenas) interagindo apenas através da interação dipolar relaxam seguindo uma dependência tipo lei de potência.

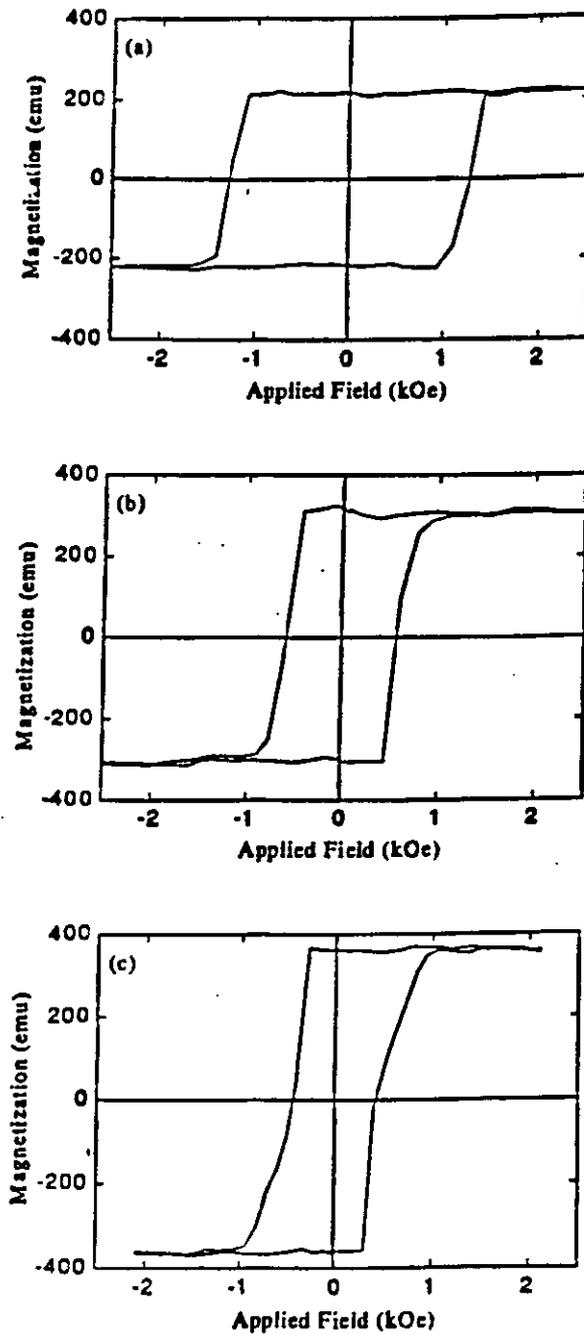


Figura 4.14: Curvas de histerese medidos por VSM para amostras de (a) 2, (b) 3, e (c) 4-angstrom de espessura de subcamadas de Co. Cada amostra apresenta uma magnetização de saturação de 210, 300, e 370 emu/cc e o campo coercivo de 1.2, 0.6, e 0.4 kOe, respectivamente. (extraído de Sug-Bong *et al.* '98 [52])



Figura 4.15: Observação direta de padrões de domínios típicos dependentes do tempo para (a) $(2 - \text{Å} \text{Co}/11 - \text{Å} \text{Pd})_{10}$ com campo $H = 0.88H_c$, (b) $(3 - \text{Å} \text{Co}/11 - \text{Å} \text{Pd})_{10}$ com campo $H = 0.89H_c$, e (c) $(4 - \text{Å} \text{Co}/11 - \text{Å} \text{Pd})_{10}$ com campo $H = 0.83H_c$. O percentual indicado no rodapé de cada figura é a área fracional do reverso de domínio. (extraído de Sug-Bong *et al.* '98 [52])

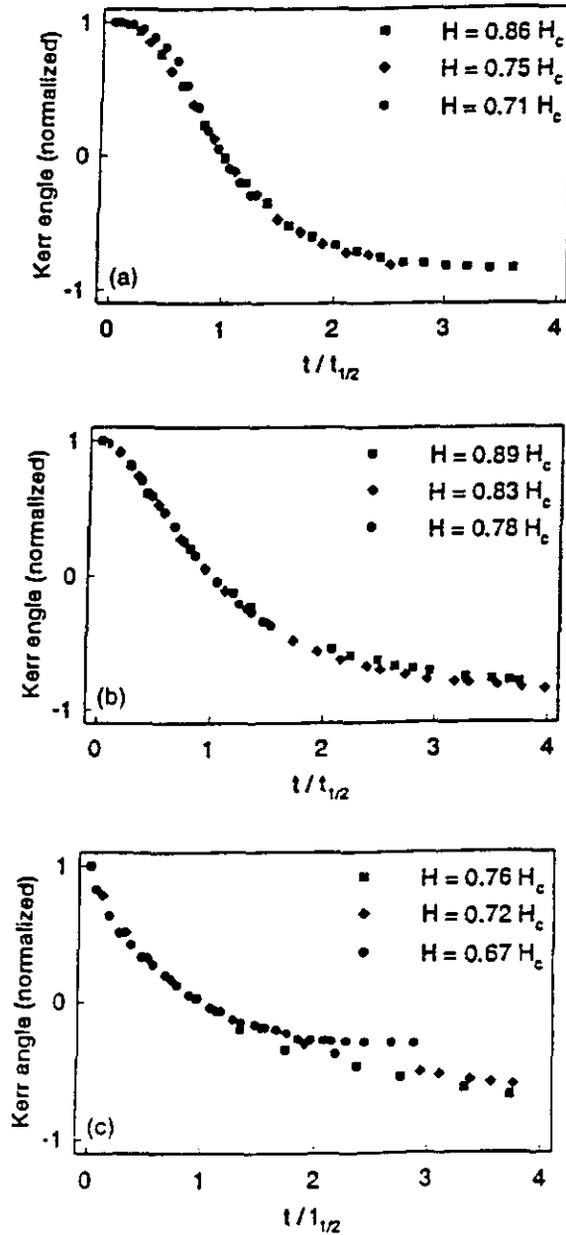


Figura 4.16: Curvas de viscosidade magnética normalizada para diferentes campos (a) $(2 - \text{Å Co}/11 - \text{Å Pd})_{10}$, (b) $(3 - \text{Å Co}/11 - \text{Å Pd})_{10}$, e (c) $(4 - \text{Å Co}/11 - \text{Å Pd})_{10}$. (extraído de Sug-Bong *et al.* '98 [52])

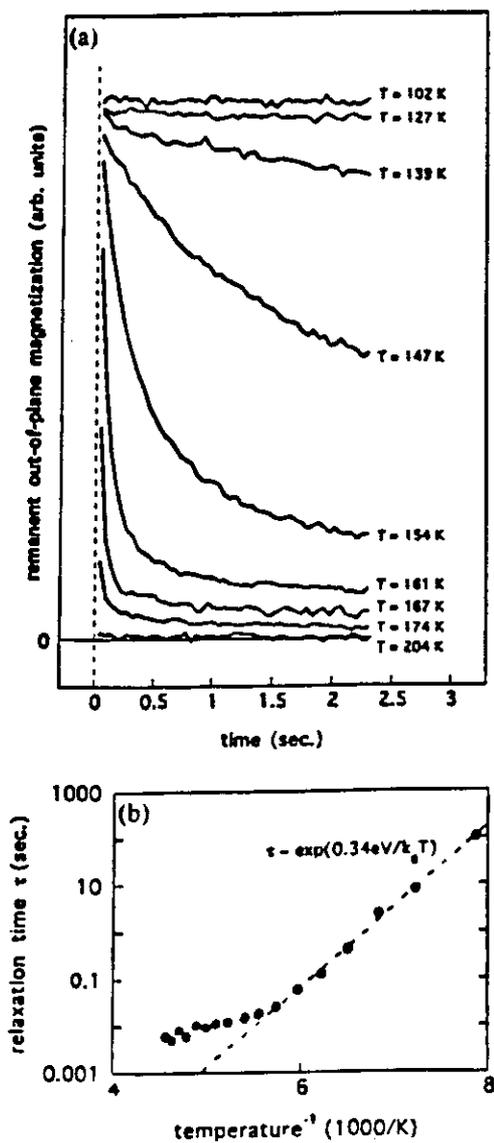


Figura 4.17: (a) magnetização fora do plano remanente vs tempo medida para uma amostra de 4 monocamadas de Fe/Ag(100) para várias temperaturas; (b) tempo de relaxação vs inverso da temperatura determinado através dos dados obtidos na figura (a). (extraído de Berger *et al.* '96 [53])

Capítulo 5

O efeito do alcance das interações em sistemas magnéticos

5.1 Introdução

Neste capítulo discutiremos o efeito que o alcance das interações impõe na descrição termodinâmica de um sistema de dipolos magnéticos, mas que são aplicáveis igualmente em sistemas hamiltonianos, em geral.

É conhecido [55, 56, 57] que sistemas com interações de longo alcance podem exibir comportamento não extensivo; ou seja, suas variáveis termodinâmicas como a energia interna (U) não se comportam de forma aditiva com o tamanho (número de elementos) do sistema, ou seja

$$U(T, N) \neq U(T, N/2) + U(T, N/2) = 2U(T, N/2) \quad (5.1)$$

Em outras palavras, se as interações efetivas entre as partículas constituintes decaem lentamente com a distância, a energia livre $F = -\beta \ln Z = U - TS$ (Z a função de partição do sistema, U energia interna, $T = (1/\beta)$ temperatura e S entropia) irá crescer mais rápido do que o número N de partículas quando $N \rightarrow \infty$; conseqüentemente, a razão

$\frac{F}{N}$ irá divergir, e o limite termodinâmico não estará definido.

Problemas com interações de longo-alcance relacionados a sistemas de spins são aqueles presentes em redes neuronais, onde neurons localizados distantes um do outro interagem através de um potencial de interação que decaie suavemente ao longo do axon; em sistemas de vidros de spin [58] com interações tipo Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida - (RKKY), fenômenos críticos em sistemas altamente iônicos [59], segregação de fase em modelos de ligas [60], entre outros. Muitos destes problemas podem ser estudados usando alguma variação do modelo de Ising (por exemplo, o Modelo de Hopfield em redes neuronais, o modelo de Edward-Anderson de vidros de spin, etc), ou sua versão em gás de rede, como no modelo de ligas [60]. Além disso, até mesmo sistemas não diretamente relacionados com sistemas magnéticos apresentam frequentemente propriedades críticas que caem na classe de universalidade de alguns sistemas magnéticos, o modelo de Ising sendo o mais trivial dentre eles.

A Termodinâmica usual e, consistentemente a Mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs (BG) se sustenta fortemente em duas hipóteses matemáticas importantes, que são, (i) *extensividade (ou aditividade)* das funções termodinâmicas (entropia (S), energia interna(U), energia livre (F), entalpia (H), etc), que consiste no fato que estas quantidades são no, limite termodinâmico (ou seja, quando o número N de elementos microscópicos do sistema tende a infinito), proporcionais a N; por exemplo, no caso da energia interna temos então que $\lim_{N \rightarrow \infty} |U(N)|/N \in (0, \infty)$, e (ii) a estrutura da *transformação de Legendre* que permite uma mudança na descrição do sistema através das variáveis termodinâmicas (por exemplo de temperatura e volume (T,V) para temperatura e pressão (T,P), de número de partículas (T,N) para potencial químico (T, μ), e outras variáveis conjugadas). Enquanto a propriedade (ii) está na estrutura da termodinâmica (assim como as transformações de Lorentz estão na estrutura da relatividade restrita), a propriedade (i) aparenta ser uma caso particular relacionado ao fato de as interações microscópicas

do sistema serem de “curto” alcance. A associação sistemas que apresentam interação de longo-alcance com perda da extensividade das funções termodinâmicas tem sido verificado em inúmeros sistemas; por exemplo, o problema gravitacional de N-corpos e astrofísica [54], difusão anômala e correlações tipo Levy [62], entre outros.

É possível na maioria dos casos reescalar as funções termodinâmicas com um parâmetro apropriado de forma tal que a propriedade (ii) (*transformação de Legendre*) seja recuperada na faixa completa de interações (curto e longo alcance) dos elementos constituintes do sistema; no entanto a propriedade (i) (*extensividade*) é perdida. Ainda assim a descrição microscópica do sistema e a obtenção das funções termodinâmicas é feita através da mecânica estatística usual (BG) (da qual a termodinâmica tradicional se origina). No entanto, em outra classe de problemas é necessário generalizar a mecânica estatística tradicional de forma a preservar a propriedade (ii) e consequentemente obtermos uma descrição termodinâmica satisfatória.

Esta generalização foi proposta por Tsallis em 1987 [61] e desde então novos resultados sugerem a vasta aplicabilidade (em problemas básicos e de otimização) desta estatística em sistemas que apresentam principalmente correlações espaciais e/ou temporais de longo alcance, como é o caso do modelo tratado neste capítulo.

5.2 Breve introdução à estatística de Tsallis

Na natureza, interações espaciais ou efeitos de memória de longo alcance podem dar origem a comportamentos não usuais. Entre eles, um dos comportamentos mais intrigantes surgem em sistemas que, dadas condições apropriadas, as variáveis termodinâmicas (tais como energia interna, magnetização, etc.) são não extensivas (não aditivas). Os melhores exemplos conhecidos de tais sistemas são: o problema gravitacional de N-corpos em astrofísica [54], buraco negro e superstrings [55], a difusão anômala e correlações tipo Levy [62], turbulência bi-dimensional [64], materiais granulares, tais como “pilhas de

areia” [65], e muitos outros. Esses sistemas compartilham uma propriedade muito sutil: Eles violam a estatística de Boltzmann-Gibbs (BG) - a ponte para a termodinâmica do equilíbrio.

Inspirado em conceitos multifractais, Tsallis [66] propôs uma generalização da Mecânica Estatística de Boltzmann-Gibbs. Ele introduziu uma expressão entrópica caracterizada por um índice q que gera uma estatística não extensiva,

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1} \quad (5.2)$$

onde p_i são as probabilidades associadas com as configurações microscópicas, e W é o número total das mesmas. O valor de q é uma medida da não extensividade do sistema; $q = 1$ corresponde à estatística padrão (extensiva) de Boltzmann-Gibbs (BG). Além disso, usando $p_i^{(q-1)} \sim 1 + (q - 1) \ln p_i$ no limite $q \rightarrow 1$, nós imediatamente verificamos que,

$$S_1 = -k \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i. \quad (5.3)$$

De acordo com as conjecturas de Tsallis, dependendo do alcance das interações e do alcance dos efeitos de memória presentes no sistema, o formalismo de BG *pode ou não falhar*. Usualmente, o alcance das interações e os efeitos de memórias são do tipo de “*curto alcance*”; e.g, Modelo de Ising, e suas variações Potts (puro e diluído), Percolação, etc e o formalismo de BG é completamente aplicável. Por exemplo, os modelos usualmente tem interações de primeiros vizinhos e suas probabilidades de transição são do tipo de Markov; i.e., consideram apenas as configurações microscópicas do sistema no instante imediatamente anterior (ou seja, $t' = t - 1$). Antes de discutir o caso não usual, é importante notar que no escopo da estatística de Tsallis a ordem em que os limites em tamanho (N) e em tempo (t) são efetuadas, i.e., no primeiro caso ($\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty}$) e no segundo ($\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty}$), podem levar a resultados diferentes [67]. Isto não é o caso da estatística de BG, onde devido a hipótese ergótica, a ordem em que os limites em tempo (t) e tamanho (N) são considerados comutam.

Para interações de longo-alcance (que será tratado neste capítulo) e efeitos de memória, no estado de equilíbrio (i.e., $\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty}$) o formalismo de BG é *apenas fracamente violado*, no sentido que o valor de $q = 1$ é aplicado, **mas** funções de escala apropriadas devem ser necessariamente introduzidas (adicionadas) na estatística usual de BG a fim de recuperarmos os resultados padrão conhecidos. Além disso, para interações de “longo-alcance” e efeitos de memória, **mas** agora no estado chamado de metaequilíbrio (i.e., $\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty}$), o formalismo de BG é **fortemente violado** e $q \neq 1$ é necessário na expressão da entropia (Eq. 5.2). Este é o caso dos exemplos mencionados no início da seção, **mas** não representa o exemplo a ser tratado neste capítulo, onde como já afirmado será necessário introduzir funções de escala apropriadas a fim de recuperarmos os resultados conhecidos da estatística tradicional de Boltzmann-Gibbs (BG).

Neste trabalho o alcance das interações é controlado por um parâmetro α e o efeito da interação de longo alcance será verificado com o modelo utilizado. Este é um exemplo da **violação fraca**, mencionada acima, da estatística de Boltzmann-Gibbs (BG).

5.3 Não extensividade em sistemas magnéticos

Neste capítulo vamos considerar um sistema magnético de N spins tipo Ising ($\sigma_i = \pm 1$) aplicado a uma rede d -dimensional. Este sistema segue um potencial Hamiltoniano de “longo-alcance” dado por,

$$-\sum_{i,j} \left(\frac{J}{r_{ij}^\alpha} \right) \sigma_i \sigma_j \quad (5.4)$$

onde J é a constante acoplamento de troca ($J > 0$), r_{ij} é a distância entre os spins i e j , σ_i assume os valores ± 1 , e α é o alcance da interação ($0 \leq \alpha < \infty$). A energia interna por spin deste sistema é calculada integrando a Eq. 5.4 sobre o volume [63],

$$\frac{E}{N} \propto \int_1^{N^{1/d}} \frac{r^{d-1}}{r^\alpha} dr = \frac{1}{d} \frac{N^{1-\alpha/d} - 1}{1 - \alpha/d} \quad (5.5)$$

Assim, para sistemas grandes ($N \gg 1$) a energia por spin (E/N) é dada por

$$\frac{E}{N} \propto \left\{ \begin{array}{ll} \text{cte}, & \alpha/d > 1 \\ \ln N, & \alpha/d = 1 \\ (N^{1-\alpha/d} - 1)/(d - \alpha), & \alpha/d < 1 \end{array} \right\} \quad (5.6)$$

Nós podemos facilmente observar que no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) a energia por spin (E/N) **não converge** na faixa $0 < \alpha/d \leq 1$. Contudo, definindo

$$N^* \equiv (N^{(1-\alpha/d)} - 1)/(1 - \alpha/d), \quad (5.7)$$

a convergência pode ser recuperada normalizando a energia por spin também por N^* ; i.e., redefinindo a energia por spin como E/NN^* . Para $\alpha/d = 1$, $N^* \propto \ln N$. Portanto, outras variáveis termodinâmicas do tipo energia (como por exemplo, E,F,G,...) escalam com NN^* .

A fim de estender este raciocínio para outras quantidades termodinâmicas, tomamos a energia livre de Gibbs expressa nas variáveis termodinâmicas com seus conjugados,

$$G = U - TS - HM + pV... \quad (5.8)$$

e normalizamos, como sugerido por Tsallis [69], por NN^* ,

$$\frac{G}{NN^*} = \frac{U}{NN^*} - \frac{T}{N^*} \frac{S}{N} - \frac{H}{N^*} \frac{M}{N} + \frac{p}{N^*} \frac{V}{N}... \quad (5.9)$$

Depois de rearranjar a Eq. 5.9 em uma maneira conveniente, ela sugere que as quantidades **extensivas** tais como S, M, V .. escalam com N, e as quantidades **intensivas** na estatística de BG tais como T, H, p .. escalam, na estatística de Tsallis com N^* . Consequentemente, para $0 < \alpha/d \leq 1$ a equação de estado em sistemas magnéticos será dada por,

$$M/N = m(T^*, H^*), \quad (5.10)$$

com

$$T^* \equiv T/N^* \quad (5.11)$$

$$H^* \equiv H/N^*. \quad (5.12)$$

Além disso, já que $N^* = \text{const.}$ para $\alpha/d > 1$, nós podemos sempre usar a equação de estado nesta *nova* forma, já que a constante será a mesma nos dois lados da Eq. 5.9; i.e., para a faixa completa de α/d .

5.4 Modelo

Vamos considerar um sistema **bi-dimensional** ($d = 2$, **rede quadrada**) escolhendo a seguinte Hamiltoniana de Ising modificada,

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + 0.5 \sum_{i,j} \frac{\sigma_i \sigma_j}{r_{ij}^\alpha} - H \sum_i \sigma_i, \quad (5.13)$$

onde σ_i assume os valores ± 1 no sítio i desta rede. A primeira soma na Eq. 5.13 representa a interação de troca atuando entre os primeiros vizinhos *apenas*, enquanto a interação de longo-alcance (representada pelo segundo termo), é somada sobre *todos* os pares de vizinhos (próximos e distantes). A Hamiltoniana foi normalizada por J e o momento magnético (μ) fixado a $\mu = 1$. Para $\alpha = 3$, a interação de longo-alcance corresponde a interação dipolo-dipolo usual (referida no Capítulo anterior). *O único parâmetro do modelo é o alcance da interação, caracterizado pela constante α .* O último termo denota a interação entre os spins e o campo magnético externo (H). As interações de troca (primeiro termo da Eq. 5.13) e as interações de longo-alcance (segundo termo da Eq. 5.13) favorecem o alinhamento dos spins na forma paralela ($\uparrow\uparrow$) e antiparalela ($\uparrow\downarrow$), respectivamente.

O pre-fator 0.5 na interação de longo-alcance representa **no equilíbrio** um sistema cujo estado fundamental é um ferromagneto com paredes de domínio em forma de listras [51], com listras (faixas) de spins apontando para cima ($\uparrow\uparrow$) e para baixo ($\downarrow\downarrow$). A largura das listras é função da intensidade da interação dipolar [51](Vide Fig. 4.3 desta Tese ou Fig. 8 de Sampaio *et al.* '96 [51]).

5.5 Resultados: Curvas de magnetização vs. campo aplicado $m = m(T, H)$

Nós simulamos as curvas de magnetização para redes de spins de tamanho $N=L \times L$, com $L = 32, 48, \text{ e } 64$ através do Método Monte Carlo (MC). Variamos a faixa de valores da interação de longo-alcance (α) entre 1 e 4 ($1 < \alpha < 4$) e obtivemos diferentes comportamentos, os quais permitiram testar a validade da hipótese de escala referida na Eq. 5.9. Nós usamos condições de contorno semi-periódicas; isto é, condições de contorno periódicas para as interações de troca, e abertas para interações de dipolo-dipolo de longo-alcance. Estas condições de contorno produzem os mesmos resultados que aqueles obtidos pela técnica de soma de Ewald, contudo em um tempo de computação *muito* reduzido (para mais detalhes ver, Ref. [51]).

As curvas de magnetização foram obtidas para uma temperatura fixa, partindo de um campo de magnetização saturado ($H \simeq 2$) e calculando $M(h)$. Na simulação o campo magnético foi reduzido em passos 0.25 até o valor negativo (*e simétrico*) de saturação, passando pelo valor nulo ($H=0$) (vide Fig. 5.1.).

Para cada valor do campo magnético o número de passos Monte Carlo por spin (MC-SPS) é grande o suficiente para assegurar que o sistema atinja o equilíbrio. No modelo, o equilíbrio é afirmado no sentido que os limites nas variáveis pertinentes são considerados na ordem. $\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty}$: i.e. a magnetização atinge um valor de saturação para tempos longos, e logo após nós analisamos a influência do tamanho do sistema.

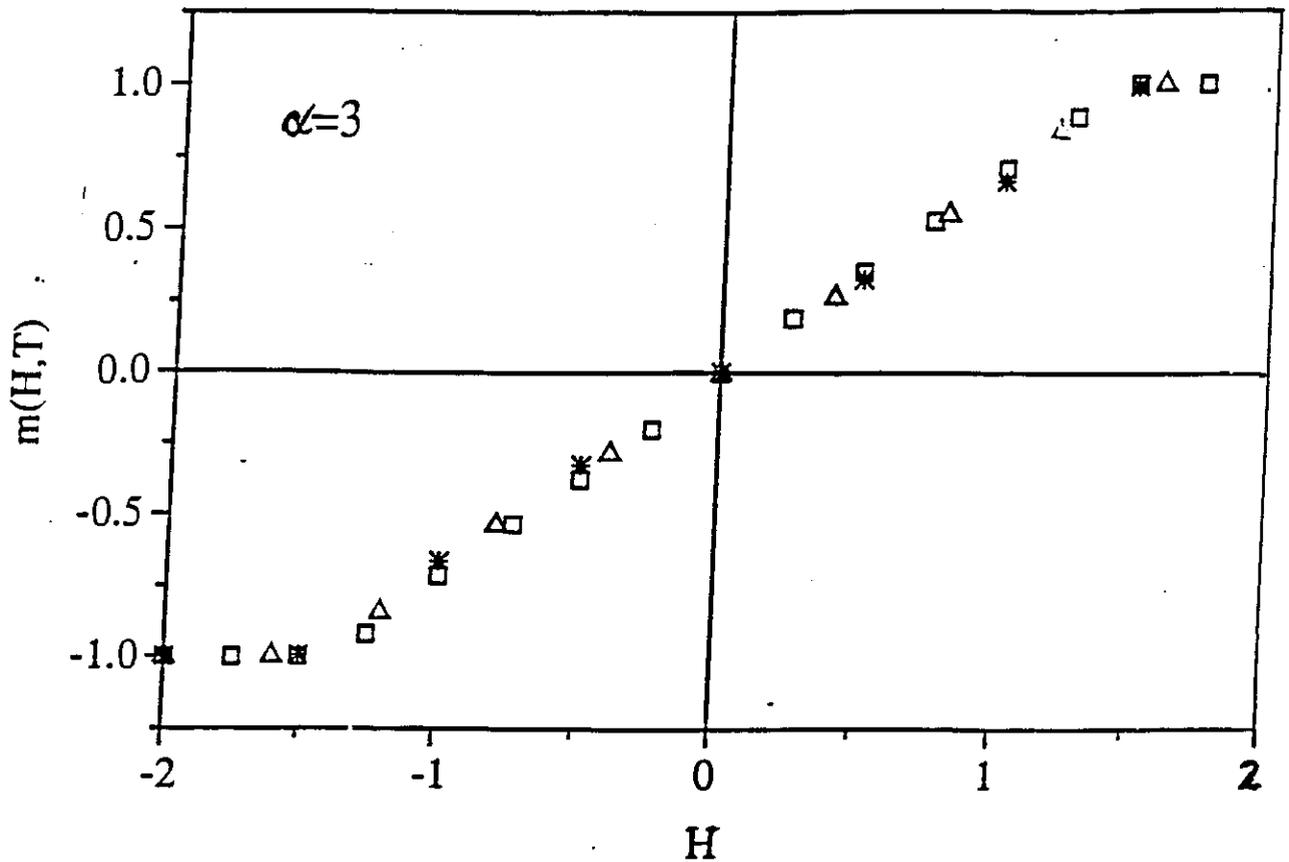


Figura 5.1: Curvas de magnetização em função do campo magnético para redes de tamanhos 32×32 (\square), 48×48 (\triangle), e 64×64 ($*$) spins para a interação dipolo-dipolo usual ($\alpha = 3$) para a temperatura $T=0.3$.

5.5.1 $m = m(T, H)$: regime extensivo ($\alpha/d > 1$: $\alpha = 3$ e $d = 2$)

Nós mostramos na Fig. 5.1 a magnetização por spin $m(H, T) = M/N$ para tamanhos de rede de 32×32 , 48×48 e 64×64 no caso dipolar para ($\alpha = 3$); i.e, $\alpha/d > 1$, para uma temperatura bem abaixo da temperatura crítica ($T_c \simeq 2.269$ - temperatura de ordem-desordem do modelo de Ising 2D). Notamos da Fig. 5.1 que esses tamanhos são grandes o suficiente para prevenir quaisquer efeitos de tamanho finito que possam se originar das simulações. Um ponto importante a ser notado é que: **Nós observamos uma superposição de TODAS as curvas $m(H, T)$ como é esperado da estatística de Boltzmann-Gibbs.**

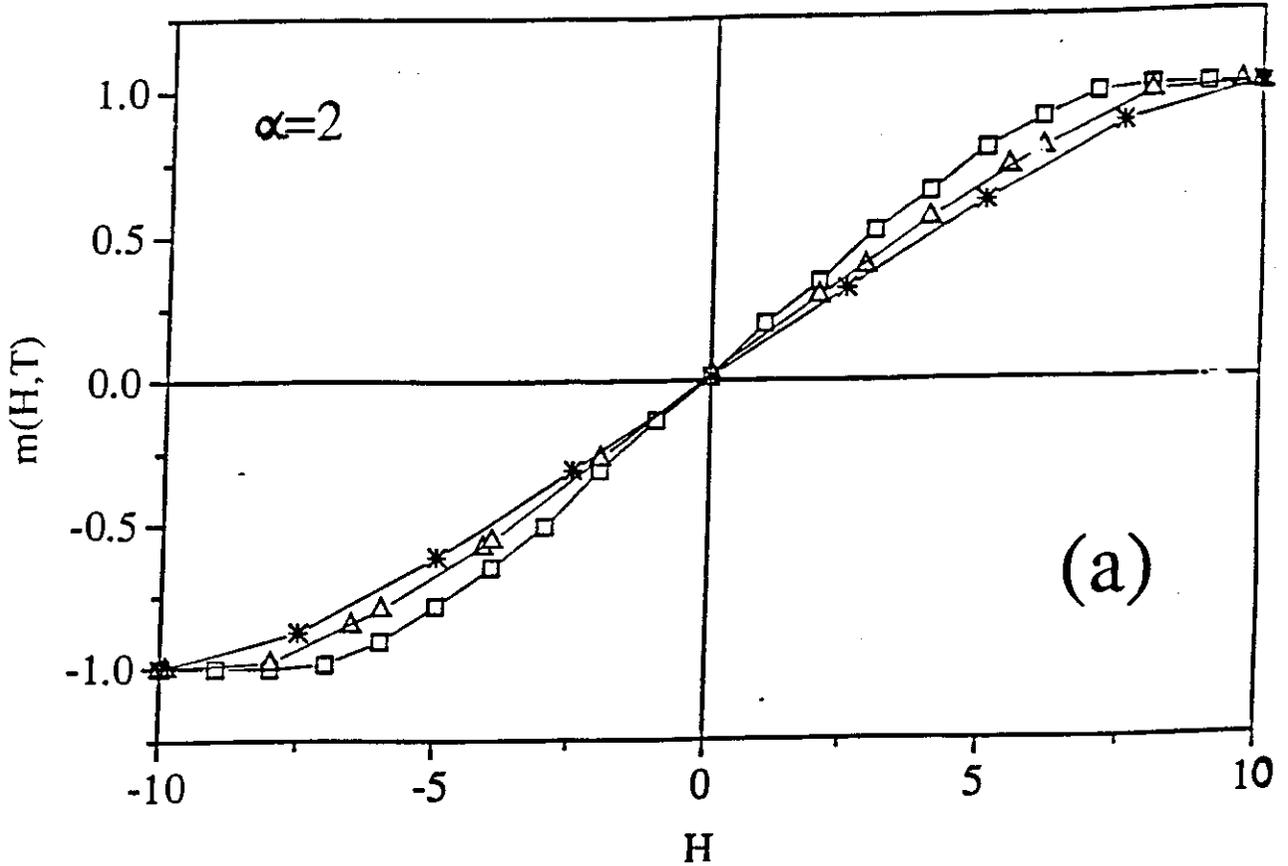


Figura 5.2: Curva de magnetização em função do campo magnético para $\alpha = 2$ na temperatura $T = 0.3$ para redes de tamanho 32×32 (\square), 48×48 (\triangle), e 64×64 (*).

5.5.2 $m = m(T, H)$: limite regime extensivo/não-extensivo ($\alpha/d = 1$: $\alpha = 2$ e $d = 2$)

Agora, mudando o alcance da interação para $\alpha = 2$; i.e., $\alpha/d = 1$ (já que estamos sempre tratando uma rede bi-dimensional e, portanto, $d = 2$), um efeito novo emerge das curvas de magnetização como mostrado na Fig. 5.2. Neste limite $\alpha/d = 1$ observamos que a magnetização para um campo abaixo do que o campo de saturação ($H_{\alpha=2}^{saturacao} \simeq 10$), decresce para redes de tamanhos maiores (Vide Fig. 5.2), desaparecendo a superposição das curvas de $m(H, T)$ como no caso anterior ($\alpha = 3$, Vide Fig. 5.1). Será visto que isto não corresponde a um efeito de tamanho finito e sim a um reescalonamento apropriado da temperatura T por T^* e campo aplicado H por H^* , como indicado nas Eqs. 5.12 e 5.7 Observe da Fig. 5.1 que naquele caso ($\alpha = 3$) o campo de saturação é bem menor ($H_{\alpha=3}^{saturacao} \simeq 2$ - Vide Fig. 5.2).

5.5.3 $m = m(T, H)$: regime não extensivo : ($\alpha/d < 1$: $\alpha = 1$ e $d = 2$)

Mostramos na Fig. 5.3 o mesmo gráfico de $m(H, T)$ versus H , agora para $\alpha = 1$; i.e., $\alpha/d < 1$ (já que $d = 2$). Como discutido acima, isto é uma consequência da não-extensividade que emerge da interação de longo-alcance na faixa $\alpha/d \leq 1$, e H e T não são mais quantidades intensivas como na estatística de Boltzmann-Gibbs (BG). Teremos que reescalar as variáveis T e H como indicado nas Eqs. 5.12 e 5.7 a fim de recuperarmos a superposição das curvas de histerese para todos os tamanhos.

5.5.4 Curvas de magnetização $m = m(T^*, H^*)$ vs. campo aplicado reescalado H^* , com temperatura reescalada T^*

Nós mostramos nas Fig. 5.4 e Fig. 5.5 as curvas de magnetização para $\alpha = 2$ e $\alpha = 1$, respectivamente, agora, como uma função de H^* e T^* . Nós observamos que o escalonamento de ambas as curvas $m(H^*, T^*)$ para sistemas de tamanhos diferentes é recuperado. Isto sugere que a equação de estado seria melhor expressa como,

$$\frac{m}{N} = m(H^*, T^*) \quad (5.14)$$

para a completa faixa de valores de α ($\alpha \leq \alpha/d < \infty$); i.e., para interações de curto-alcance - caracterizadas por valores de ($\alpha/d > 1$) e interações de longo-alcance - caracterizadas por valores ($\alpha/d < 1$). Neste ponto é importante clarificar dois pontos:

- 1) a temperatura do “banho térmico” na qual as simulações de Monte Carlo (MC) são realizadas é a temperatura real T e **NÃO** a temperatura reescalada $T^* = T/N^*$.
- 2) o campo magnético real aplicado ao sistema (e utilizada na simulação MC é o campo H e **NÃO** o campo reescalado $H^* = H/N^*$.

Contudo, as variáveis T^* e H^* são apropriadas para recuperar o mesmo formalismo

usado na estatística de BG, ou seja, o escalonamento de $m(H, T)$ versus H para diferentes tamanhos da rede (Vide Fig. 5.4 e Fig. 5.5).

Uma imagem interessante emerge ao graficarmos as curvas $m(H^*, T^*)$ versus H^* juntas para valores **acima e abaixo** de $\alpha = 2$; ou seja, $(\alpha/d = 1)$, (Vide Fig. 5.6). Observamos que:

- 1) $m(H^*, T^*)$ é **independente** do tamanho para $\alpha/d \leq 1$; i.e., escala independentemente do tamanho do sistema (Vide o colapso das curvas para $\alpha = 1, 1.5$ e 2 na Fig. 5.6 para diferentes tamanhos de rede, 32×32 , 64×64 e 128×128), o mesmo escalonamento ocorre independentemente de α/d (Vide o colapso das curvas para a mesma faixa de valores de α/d). Como uma consequência, todas as curvas $m(H^*, T^*)$, colapsam *independentemente do tamanho e da faixa de valores de α/d* (para $\alpha/d \leq 1$), como é mostrado na Fig. 5.6.
- 2) a inclinação das curvas $m(H^*, T^*)$ para $\alpha > 2$ e para “campos reescalados (H^*)” baixos ($-1 \leq H^* \leq 1$) **crece** para valores **crecentes** de α (Vide Fig. 5.6). A insensibilidade de α no primeiro regime ($\alpha/d \leq 1$), foi observada também em simulações de dinâmica molecular usando potenciais de Lennard-Jones generalizados [71]. Além disso, este comportamento (para $\alpha/d > 1$) é nada menos que um “assinatura” do comportamento não-extensivo que emerge das interações de longo-alcance.

A fim de caracterizar o “crossover” do comportamento não-extensivo para o comportamento extensivo, nós mostramos na Fig. 5.7 a suscetibilidade [$\chi \equiv \partial m(H^*, T^*) / \partial H^* |_{H^*=0}$] para $T^* = 0.3$; i.e., a inclinação das curvas $m(H^*, T^*)$ para o “campo reescalado nulo” ($H^* = 0$), para diferentes valores de α . Nós observamos que o “crossover” ocorre para $\alpha = 2$ ($\alpha/d = 1$), acima do qual a susceptibilidade aumenta continuamente sem descontinuidade em sua primeira derivada relativa a α (Vide Fig. 5.7). O mesmo comportamento tem sido observado em partículas sujeitas a potenciais de longo alcance tipo Lennard-Jones [71].

5.5.5 Comparação do resultado analítico com $\alpha = 1$ e simulação

Mostramos na Fig. 5.8 a comparação do resultado obtido por simulação para $\alpha = 1$ com aquele obtido analiticamente por de Magalhães, Cannas e Tamarit [68] para o modelo desta seção no caso de $\alpha = 1$. Verifica-se que o ajuste para diferentes tamanhos de rede com o resultado analítico é perfeito. A função da magnetização em termos de N^* e $C_d(\alpha)$ é dada por

$$m = \frac{m}{N} = \tanh \left[\beta' \left(h' - \left(1 - \frac{8}{2^\alpha N^* C_d(\alpha)} \right) m \right) \right] \quad (5.15)$$

onde $C_d(\alpha)$ é uma função de escala que está relacionada ao efeito global da interação dipolar [68] e β' é dado por,

$$\beta' = \beta^* (2^\alpha C_d(\alpha)) \quad (5.16)$$

com $\beta^* = 1/T^* = 1/0.3$

5.6 Conclusões

Resumindo, nós apresentamos um modelo simples que mostra uma violação fraca da estatística de Boltzmann-Gibbs; i.e., o comportamento não extensivo das variáveis termodinâmicas (como por exemplo, E,F,G,S, etc.) na abordagem da estatística de BG ($q = 1$). Estes resultados suportam as conjecturas da estatística de Tsallis. Além disso, nós observamos que o “crossover” da susceptibilidade para $\alpha/d = 1$ do regime não-extensivo para o comportamento extensivo ocorre suavemente, sugerindo ser um comportamento geral dos sistemas que violam fracamente a estatística de BG.

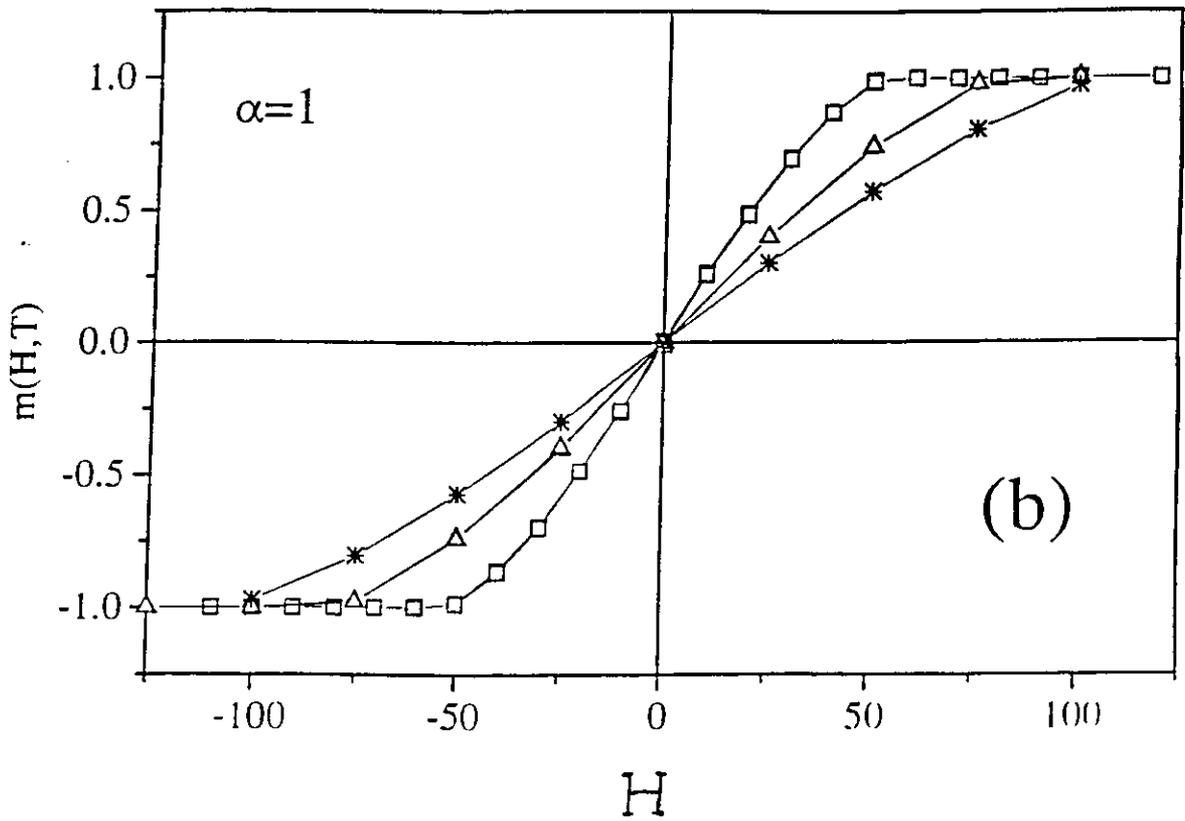


Figura 5.3: Curva de magnetização em função do campo magnético para $\alpha = 1$ na temperatura $T = 0.3$ para redes de tamanho 32×32 (\square), 48×48 (\triangle), e 64×64 (*).

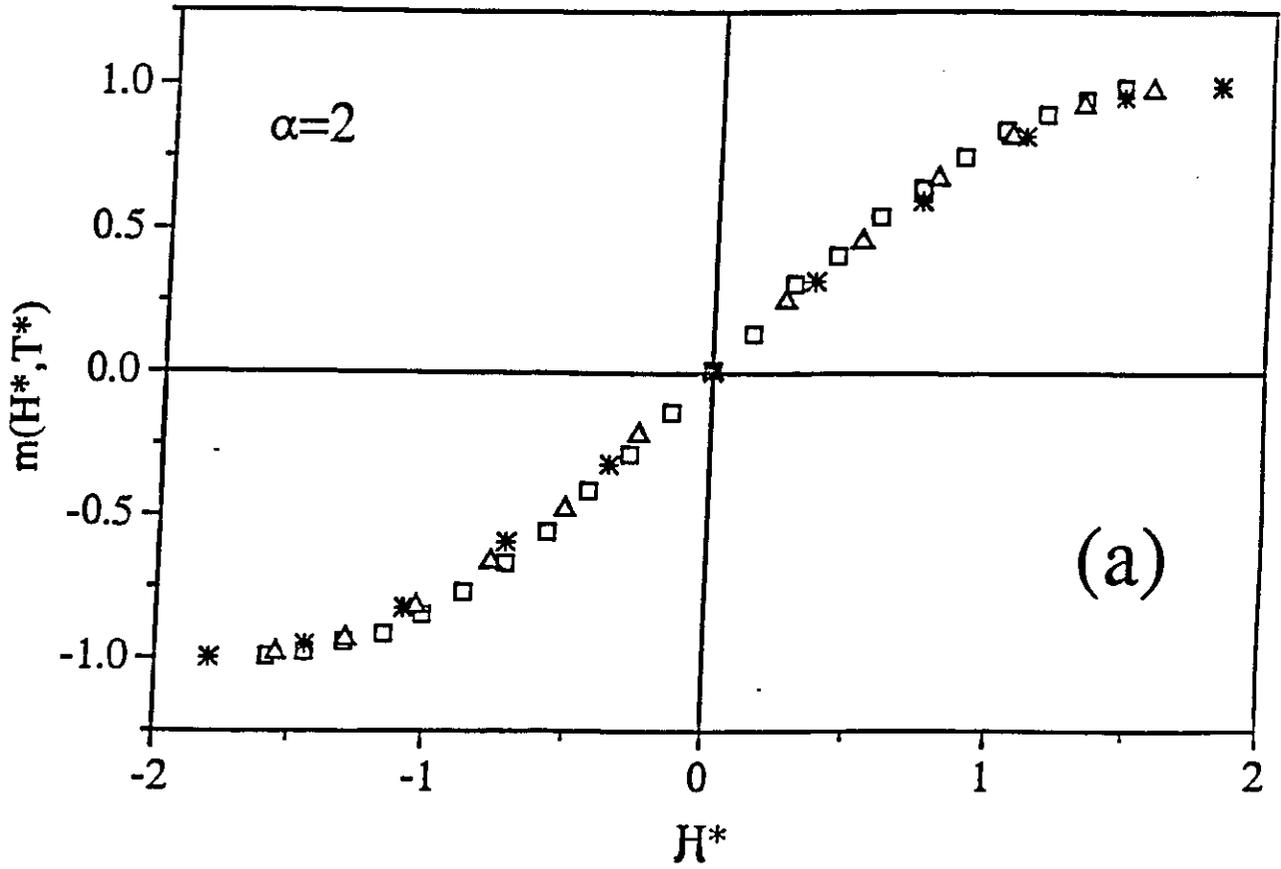


Figura 5.4: Curva de magnetização em função do campo magnético para $\alpha = 2$ na temperatura $T^* = 0.3$ para redes de tamanho 32x32(\square), 48x48(\triangle), e 64x64 ($*$) ($T_{\square} = 2.08$, $T_{\triangle} = 2.32$, e $T_* = 2.49$).

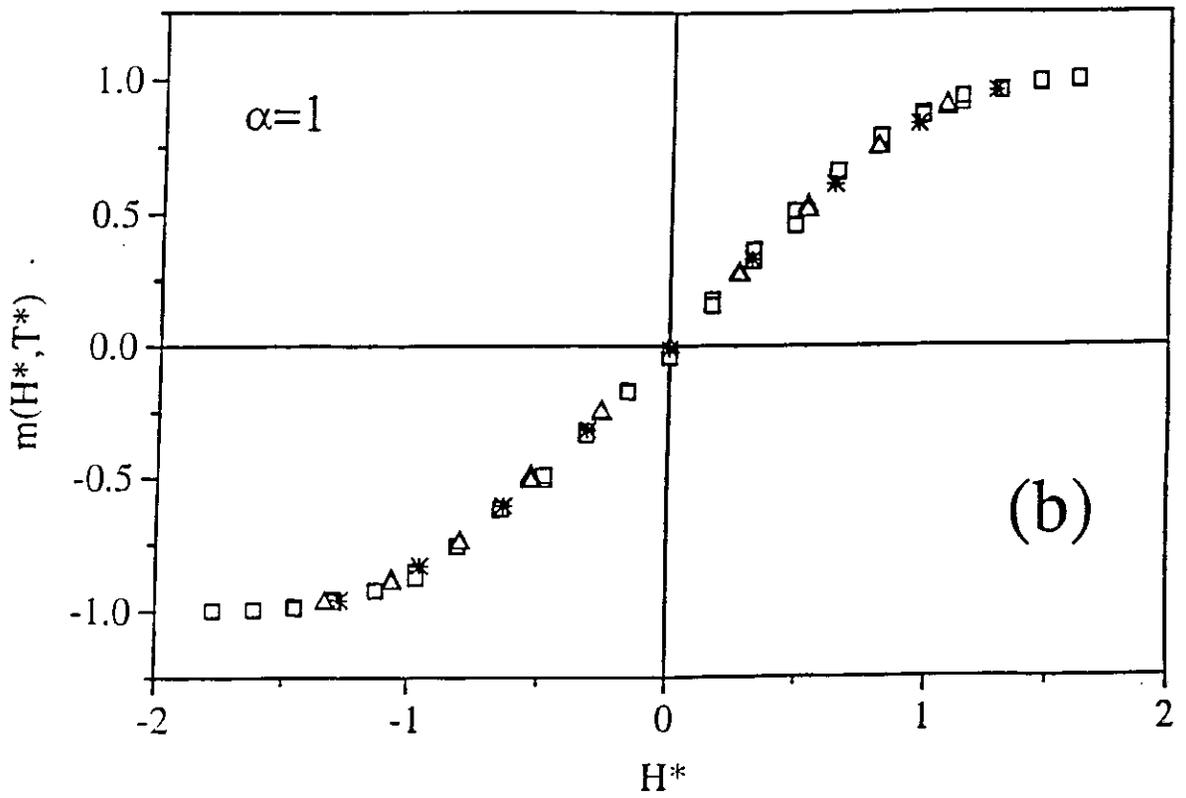


Figura 5.5: Curva de magnetização em função do campo magnético para $\alpha = 1$ na temperatura $T^* = 0.3$ para redes de tamanho 32x32(\square), 48x48(\triangle), e 64x64 ($*$) ($T_{\square} = 18.6$, $T_{\triangle} = 28.2$, e $T_* = 37.8$).

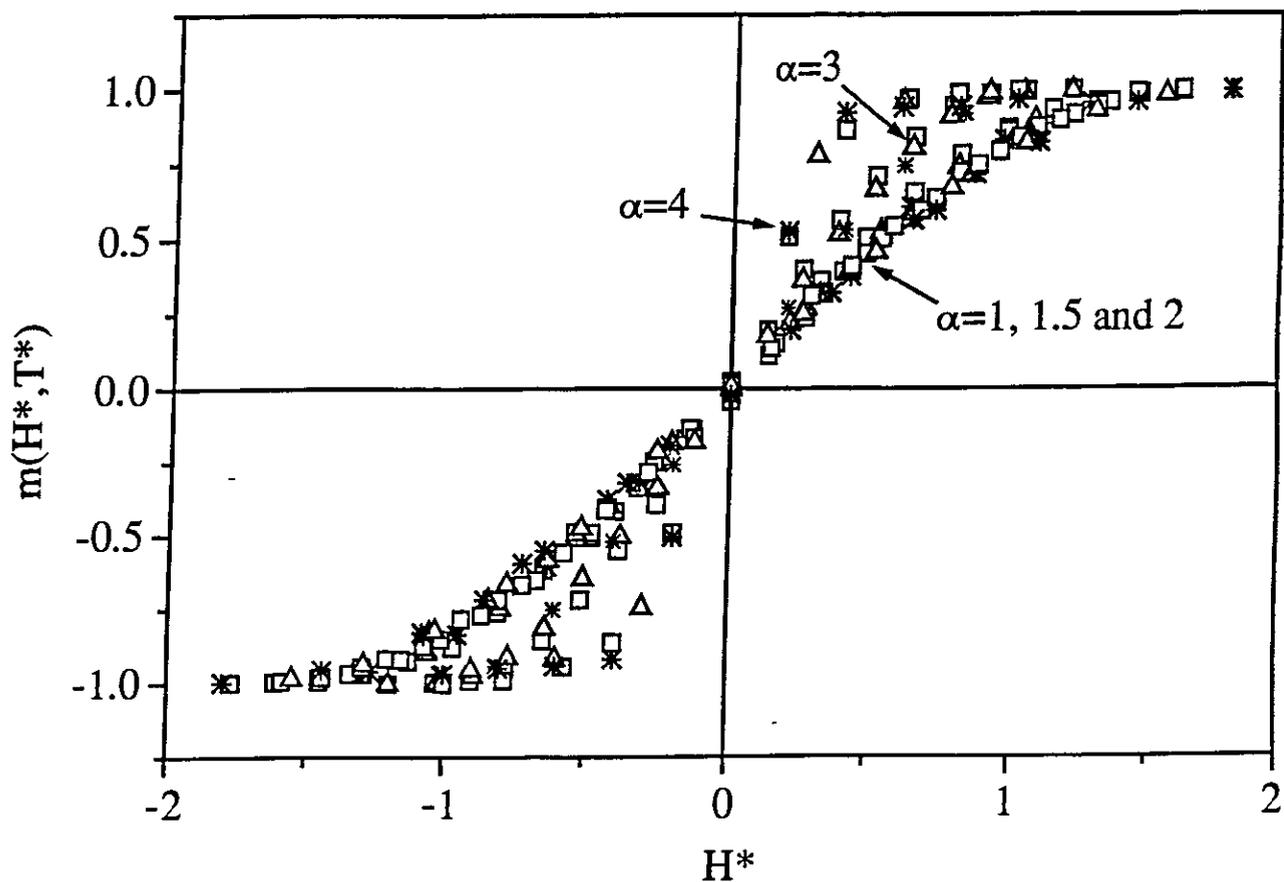


Figura 5.6: Curvas de magnetização em função das variáveis H^* para $T^* = 0.3$ para valores **abaixo e acima de $\alpha/d = 1$** ($\alpha = 1, 1.5, 2, 3$ e 4), $T_{\square}(\alpha = 1)$, $T_{\Delta}(\alpha = 1)$, $T_*(\alpha = 1)$ são os mesmos como na Fig. 5.5; ($T_{\square}(\alpha = 1.5) = 5.58$, $T_{\Delta}(\alpha = 1.5) = 7.11$, e $T_*(\alpha = 1.5) = 8.4$); ($T_{\square}(\alpha = 2)$, $T_{\Delta}(\alpha = 2)$, e $T_*(\alpha = 2)$ são os mesmos que indicados na Fig. 5.4); $T_{\square}(\alpha = 3) = 0.49$, $T_{\Delta}(\alpha = 3) = 0.51$, e $T_*(\alpha = 3) = 0.52$; $T_{\square}(\alpha = 4) = T_{\Delta}(\alpha = 4) = T_*(\alpha = 1.5) = 0.29$, (símbolos como na Fig. 5.1).

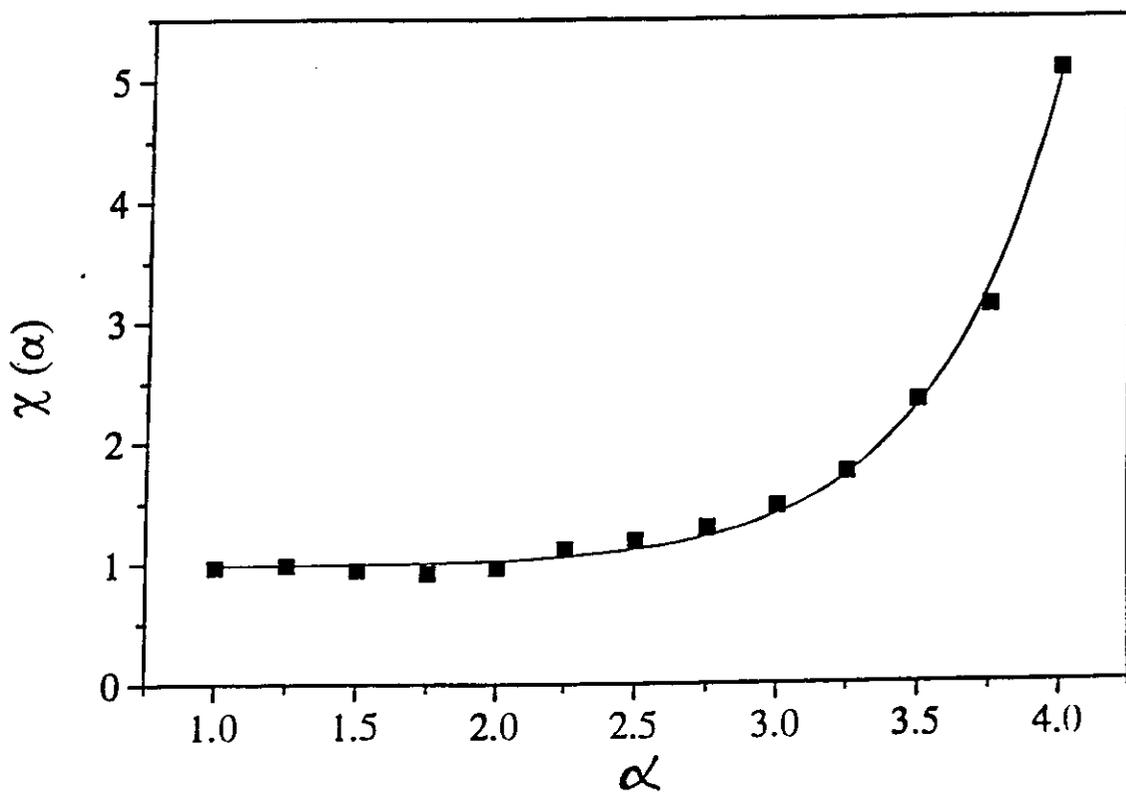


Figura 5.7: Curva de susceptibilidade $\chi(\alpha)$ obtida para campos baixos para $T^* = 0.3$ para $1 \leq \alpha \leq 4$. Os valores de $T_{\square}(\alpha)$, $T_{\Delta}(\alpha)$, e $T_*(\alpha)$ são os mesmos como na Fig. 5.6. A linha cheia é uma guia para os olhos.

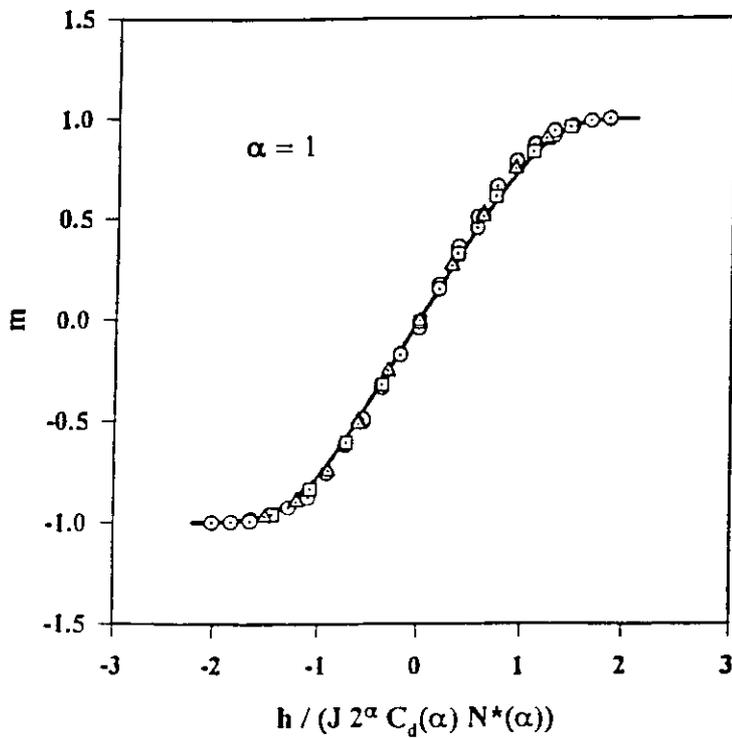


Figura 5.8: Curva de magnetização em função do campo magnético reescalado $(H/(J 2^\alpha C_d(\alpha) N^*))$ para $\alpha = 1$ na temperatura $T^* = 0.3$ para redes de tamanho 32×32 (\square), 48×48 (\triangle), e 64×64 (\odot) ($T_\square = 18.6$, $T_\triangle = 28.2$, e $T_\odot = 37.8$).

Conclusões

Nesta tese usamos a técnica de simulação Monte Carlo para estudar processos de relaxação da magnetização e formação de domínios em filmes finos. Utilizamos o modelo de Ising com a interação dipolo-dipolo de longo alcance, que leva em conta de forma realista a interação de longo alcance entre os momentos magnéticos no filme, e com anisotropia perpendicular ao plano do filme. Utilizamos também uma variação deste modelo para estudar o efeito de não extensividade nas funções termodinâmicas que surge em sistemas magnéticos gerado pelo alcance das interações. Nos capítulos 2 e 3, foi feita uma revisão da literatura sobre os conceitos básicos necessários a apresentação do trabalho. Nos capítulos 4 e 5 são apresentados os resultados da tese.

- No capítulo 2, apresentamos o conceito de filmes finos, domínios magnéticos, os tipos de energia relevantes ao estudo da formação de domínios magnéticos e uma discussão da não existência de domínios em sistemas que não apresentem anisotropia perpendicular ao plano do filme.
- No capítulo 3, apresentamos o método de simulação Monte Carlo; o conceito de amostragens, a importância da mesma no tipo de simulação utilizada, e os tipos de dinâmica mais utilizadas.
- No capítulo 4, apresentamos o modelo usado. Utilizamos o modelo de Ising com interação dipolo-dipolo e a dinâmica de Monte Carlo com inversão única de spin. Verificamos dois comportamentos distintos da relaxação: (1) nucleação de muitos domínios em pontos distintos da rede para α (intensidade da interação dipolo-dipolo)

maior que um valor crítico $\alpha > \alpha_c$ ($\alpha_c \sim 0.37$), caracterizado por um decaimento temporal tipo **lei de potência da magnetização** e (2) nucleação de **poucos** domínios, cujas paredes se expandem rapidamente no processo de relaxação para $\alpha < \alpha_c$, caracterizado por um **decaimento exponencial com o tempo da magnetização**. Em ambos os casos o sistema relaxa em direção ao estado fundamental que corresponde a um padrão de domínio em forma de listras, cuja largura depende da intensidade da interação dipolar. Os comportamentos distintos de relaxação observados em experimentos com filmes finos são reproduzidos em bom acordo pelos resultados da simulação. Obtivemos a dependência da relaxação magnética com relação a α e à temperatura (T). Da mesma forma, obtivemos a dependência da energia de nucleação (E_N) dos domínios em função de α através de simulações obtidas a partir das curvas do tempo de relaxação em função do inverso da temperatura. Obtivemos a dependência das curvas de magnetização versus campo aplicado (histerese magnética) com relação a α ; a concordância dos resultados obtidos em função da intensidade da interação dipolar (α) com os resultados experimentais é muito boa.

- No capítulo 5, modificamos o modelo de Ising com uma interação tipo dipolo-dipolo de alcance variável; ou seja, alteramos o alcance da interação de longo alcance. Simulando este modelo, verificamos através das curvas de magnetização versus campo aplicado para diferentes valores de α , uma previsão da estatística de Tsallis com relação à não-extensividade das funções termodinâmicas quando a razão do alcance da interação de longo alcance (valores decrescentes da potência da interação dipolo-dipolo) e a dimensão (d) do sistema é menor 1; ou seja, $\alpha/d < 1$.

Entre as possíveis extensões para este trabalho, será introduzir momentos magnéticos no eixo X e Y, e portanto utilizar o modelo de Heisenberg, com o intuito de estudarmos a transição de reorientação da magnetização do plano (\parallel) para fora do plano (\perp) do filme [53].

Referências

- [1] G. Bochi, H. J. Hug, D. I. Paul, B. Stiefel, A. Moser, I. Parashikov, H. J. Guntherodt, and R. C. O'Handley, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1839 (1995).
- [2] V. Gehanno, A. Marty, B. Gilles e Y. Samson, *Phys. Rev.* **B55** (1997) 12552.
- [3] L. Bruck, *Ann. Phys.* **26**, (1990) 233.
- [4] B. M. Lairson and B. M. Clemens, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 1438 (1993). A. Cebollada *et al.*, *Phys. Rev.* **B50**, 3419 (1994)
- [5] P. Weiss, *J. de Physique* **6** (1907) 661.
- [6] A. P. Guimarães Introduction to Magnetism and Magnetic Resonance in Solids (1996) Version 2.0 - livro a ser publicado.
- [7] C. Kittel, *Phys. Rev.* **70** (1946) 965.
- [8] R. Allenspach Magnetism and the Structure in Systems of Reduced Dimensions, edited by R. Farrow, R. F. Mooles, G. R. Harp, D. Weller. J. A. Rabedeau, M. F. Toney and S. S. P. Parloni (New York: Plenum) 1993.
- [9] A. Barthelemy, A. Fert, P. Etienne, R. Cabanel and S. Lequier *L. Magn. magn. Matter*, **104-107** (1992) 1916.
- [10] H. .P. Oepen, *J. Magn. magn. Mater.* **6** (1990) L137.
- [11] C. Daboo, J. A. C. Roland. P. J. Hicken. A. J.R. Ives, H. J. Baerd and P. G. Walker *J. Appl. Phys.* **73** (1993) 6368. *Phys. Rev.* **B47** (1993) 11852.

- [12] A. Barthelemy, A. Fert, P. Etienne, R. Cabanel and S. Lequier J. Magn. magn. Mater. **104-107** (1992) 1816.
- [13] L. Néel, J. Phys. (Paris) **15** (1954) 225.
- [14] B. N. Engel, D. England, R. A. Vanleeneu, M. H. Wiedmaun and C. M. Falco, Phys. Rev. Lett. **67** (1991) 1910.
- [15] Y. Yafet and E. M. Gyorgy, Phys. Rev. **B38** (1988) 9145.
- [16] R. Czech and J. Villain J. Phys. Condens. Matter **1** (1989) 619.
- [17] J.M. Hammersley, D.C. Handscomb: *Monte Carlo Methods*(Chapman & Hall, New York 1964); F. James: Rep. Prog. Phys. **43**, (1980) 73.
- [18] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery *Numerical Recipes in C 2nd edition. The Art of Scientific Computing.* (Cambridge University Press 1993).
- [19] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller J. Chem. Phys. **21** (1953) 1087.
- [20] H. Muller-Krumbhaar, K. Binder J. Stat. Phys. **8** (1973) 1. K. Binder Adv. Phys. **23** (1974) 917. K. Binder Phase Transitions and Critical Phenomena ed. by C. Domb, M. S. Green (Academic, New York 1976).
- [21] U. Nowak, J. HeimeI, T. Kleinefeld and D. Weller Phys. Rev. **B56** (1997) 8143.
- [22] L. Néel, J. Phys. Radiat. **15**, 376 (1954); J. G. Richter, Phys. Rev. Lett. **56**, 2728 (1986).
- [23] J. Pommier , P. Meyer, G. Pénissard , J. Férre, P. Bruno, D. Renard, Phys. Rev. Lett. **65** (16), 2054 (1990); J. Thiele, J. Férre, P. Meyer, C. Guillot, R. Belkhou, N. T. Barret, J. Magn. and Magn. Mater. **148**, 17 (1995).

- [24] L. Néel, *J. Phys. Radiat.* **11**, 49 (1950); L. Weil, *J. Chim. Phys.*, 725 (1954); C. P. Bean and Livingston, *J. Appl. Phys.* **30**, 1205 (1959).
- [25] A. Caneschi, D. Gatteschi, R. Sessoli and M. A. Novak, *Nature* **365**, 141 (1993), C. Paulsen, J. G. Park, B. Barbara, R. Sessoli and A. Caneschi, *J. Magn. Magn. Mater.* **140**, 1891 (1995).
- [26] L. C. Sampaio and B. Barbara, *J. Magn. Magn. Mater.* **140**, 391 (1995); B. Barbara, L. C. Sampaio, A. Marchand, O. Kubo and H. Takeuchi, *J. Magn. Magn. Mater.* **136**, 183 (1994).
- [27] A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, M. C. Robison and K. de'Bell, *Phys. Rev. B* **51** (22), 16033 (1995).
- [28] *Monte Carlo Method in Statistical Physics*, ed. by K. Binder (Springer-Verlag, 1979); K. Binder and D. W. Hermann, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Springer Series in Solid-State Science (80), 2nd edition, chapter 2.
- [29] W. F. Brown, *Micromagnetics, Interscience Tracts on Physics and Astronomy*, number 18 (1963); M. E. Schabes, *J. Magn. Magn. Mater.* **95**, 249 (1991).
- [30] D. A. Stariolo and C. Tsallis, in *Annual Review of Computational Physics II*, ed. by D. Stauffer (World Scientific, Singapore, 1994); T. J. P. Penna, *Phys. Rev. E*,
- [31] R. Kretschmer and K. Binder, *Z. Physik* **34**, 375 (1979).
- [32] S. D. Bader and D. J. Mills, *Phys. Rev. B* **38**, 12015 (1988); Z. Q. Qui, J. Pearson and S. D. Bader, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1646 (1991) and *Phys. Rev. B* **49**, 8797 (1994); F. Huang, M. T. Kief, G. J. Mankey and R. F. Willis, *Phys. Rev. B* **49** (6), 3962 (1994).
- [33] <http://www.cbpf.br/~sampaio/prb.Mars.96.html>
- [34] H. Gould J. Tobochnik *An Introduction to computer simulation methods* 2nd. Edition Addison-Wesley Pag. 189.

- [35] R. Street and J. C. Wolley, Proc. Phys. Soc. London A **62** (1949) 562; B. Barbara *et al.*, Phys. Scr. **T49** (1993), 268 (ver também referências internas).
- [36] E. D. Dahlberg, D. K. Lottis, R. M. White, M. Matson and E. Engle, J. Appl. Phys. **76** (10), 15 (1994); D. K. Lottis, R. M. White, E. D. Dahlberg, Phys. Rev. Lett. **67** (3), 362 (1991).
- [37] R. D. Kirby, J. X. Shen, R. J. Hardy and D. J. Sellmeyer, Phys. Rev. **B 49** (15), 10180 (1994).
- [38] G. Grinstein, *Scale Invariance, Interfaces and Non-equilibrium Dynamics*, ed. by A. Mckane *et al.*, Plenum Press, New York, 1995.
- [39] Y. Park, S. Adenwall, G. P. Felcher and S. D. Balder, Phys. Rev. B **52** (~~17~~), 12779 (1995).
- [40] C. J. Lin, J. C. Suit, and R. H. Geiss, J. Appl. Phys. **63** (1988) 3835.
- [41] H. P. D. Shieh and M. H. Kryder, IEEE Trans. Magn. **MAG-24** (1988) ~~2464~~.
- [42] T. G. Pokhil and N. Nikolaev, IEEE Trans. Magn. **MAG-29**, (1993) ~~2535~~.
- [43] T. Kleinefeld, J. Valentin, and D. Weller, J. Magn. Magn. Mater. **148** (~~1995~~) 249.
- [44] R. D. Kirby, J. X. Shen, Z. S. Shan, and D. J. Sellmyer, J. Appl. Phys. **70** (1991) 6200.
- [45] J. X. Shen, R. D. Kirby, Z. S. Shan, D. J. Sellmyer, and T. Suzuki, J. Appl. Phys. **73** (1993) 6418.
- [46] Z. S. Shan, J. X. Shen, R. D. Kirby, D. J. Sellmyer, and Y. J. Wang, J. Appl. Phys. **75** (1994) 6418.
- [47] S. B. Choe and S. C. Shin. J. Appl. Phys. **81** (1997) 5743.
- [48] U. Nowak, IEEE Trans. Magn. **MAG-31** (1995) 4169.

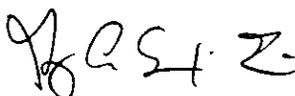
- [49] A. Lyberatos, J. Earl, and R. W. Chantrell, *Phys. Rev.* **B 53** (1996) 5493.
- [50] H. L. Richards, M. A. Novotny, and P. A. Rikvold, *Phys. Rev.* **B 54** (1996) 4113.
- [51] L. C. Sampaio, M. P. de Albuquerque, and F. S. de Menezes, *Phys. Rev.* **B54** (1996) 6465.
- [52] Sug-Bong Choe and Sung-Chul Shin, *Phys. Rev.* **B 57** (1998) 1085.
- [53] A. Berger and H. Hopster *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 519.
- [54] A. M. Salzberg, *J. Math. Phys.* **6**, (1965) 158; H. E. Kandrup, *Phys. Rev.* **A40**, (1989) 7265; L. G. Taff, *Celestial Mechanics* (Wiley, New York, 1985), p. 437; W. C. Saslaw, *Gravitational Physics of Stellar and Gallactic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1985), p. 217; J. Binney and S. Tremaine, *Galactic Dynamics* (Princeton University Press, Princeton, 1987), p. 267.
- [55] P. T. Landsberg, *J. Stat. Phys.* **35**(1984)159; D. Pavon, *Gen. Relat. Gravit.* **19** (1987) 375.
- [56] B. J. Hiley e G. S. Joyce, *Proc. Phys. Soc.* **85**, (1965)493; S. A. Cannas, *Phys. Rev.* **B52**, (1995) 3034.
- [57] J. O. Indekeu, *Physica* **A183** (1992) 439; J. O. Indekeu e A. Robledo, *Phys. Rev.* **E47** (1995), 4607
- [58] P. J. Ford. *Contemp. Phys.* **23** (1982) 141
- [59] K. S. Pitzer, M. C. P. de Lima, e D. R. Schreider, *J. Phys. Chem.* **89** (1985) 1854
- [60] G. Giacomini and J. L. Lebowitz, *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 1094
- [61] C. Tsallis, *J. Stat. Phys.* **52** (1978) 479.
- [62] C. Tsallis. S. V. F. Levy, A. M. C. Souza. and R. Maynard. *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995) 3589. e referências internas; C. Tsallis e D. K. Bukmann. *Phys. Rev.* **E54** (1996) R2197.

- [63] S. A. Cannas and F. A. Tamarit, Phys. Rev. **B54** (1996) R12661.
- [64] B. M. Boghosian, Phys. Rev. **E53** (1996) 4754; R. H. Kraichnan and D. Montgomery, Rep. Prog. Phys. **43** (1980) 547.
- [65] A. Mehta and S. F. Edwards, Physica A **157** (1989) 1091; S. F. Edwards and C. C. Mounfield, *ibid.* **210** (1994) 279, e referências internas; **210** (1994) 290; **210** (1994) 301.
- [66] C. Tsallis, J. Stat. Phys. **52** (1988) 479; E. M. F. Curado and C. Tsallis, J. Phys. **A24** (1991) L69; **24** (1991) 3187; **25** (1992) 1019.
- [67] C. Tsallis, Physica **A221** (1995) 277.
- [68] A. C. N. Magalhães, S. Cannas e F. Tamarit, comunicação particular Cálculo analítico para o modelo dipolo-dipolo com $\alpha = 1$. S. A. Cannas and F. A. Tamarit, Phys. Rev. **B54** (1996) R12661.
- [69] C. Tsallis, Fractals **3** (1995) 541.
- [70] L. C. Sampaio, M. P. de Albuquerque, e F. S. de Menezes, Phys. Rev. **B 55** (1997) 5611.
- [71] J. R. Grigera, Phys. Lett. A **217** (1996) 47.

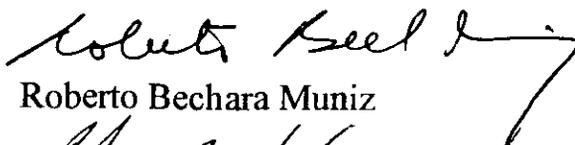
“RELAXAÇÃO DA MAGNETIZAÇÃO E FORMAÇÃO DE DOMÍNIOS MAGNÉTICOS EM FILMES FINOS”

Fortunato Silva de Menezes

Tese de Doutorado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:



Luiz Carlos Sampaio Lima - Presidente



Roberto Bechara Muniz



Bismarck Vaz da Costa



Walter Baltenzperger



Alberto Passos Guimarães Filho

Rio de Janeiro, 08 de janeiro de 1999