



Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Departamento de Física de Baixas Energias

Configurações Magnéticas de Nanopontos Circulares e Elípticos

Érico Raimundo Pereira de Novais

Orientador: Prof. Dr. Alberto Passos Guimarães

Rio de Janeiro

2009

Érico Raimundo Pereira de Novais

Configurações Magnéticas de Nanopontos Circulares e Elípticos

Dissertação apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), como pré-requisito para a obtenção do título de **Mestre em Ciências** sob a orientação do Prof. Dr. Alberto Passos Guimarães.

Rio de Janeiro
2009

Érico Raimundo Pereira de Novais
Energia Total das Configurações Magnéticas de Elipse Nanopontos

Banca Examinadora

Prof. Dr. Alberto Passos Guimarães
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas- CBPF

Prof. Dr. Luiz Carlos Sampaio Lima
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas- CBPF

Prof. Dr. Monica Pereira Bahiana
Membro externo

Dedicado à
Minha Mãe Hermelina Novais (Milú),
Minha noiva Andréa Ferreira (Déa)

Agradecimentos

Agradeço:

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro e ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF) pela oportunidade de realizar meu mestrado nesta instituição.

Aos meus queridos mestres, especialmente ao meu orientador Professor Dr. Alberto Passos Guimarães, muito obrigado por caminhar comigo na realização deste trabalho.

A República do O’Pai’ó (ROPÓ) minha primeira moradia no estado do Rio de Janeiro, Miriam Aragão, Joyce Martim, Gilda Carvalho, Nilton Araújo e meu irmão Orahcio Felício, os momentos que convivi com vocês foram inesquecíveis.

Aos meus amigos fraternos conquistados no Rio de Janeiro em especial a Leonardo Cirto, Marcos José, Tiago Siman e Julian recebam meus sinceros agradecimentos. Aos meus camaradas da República do Caos. Aos meus amigos de toda a vida Jules, Adelmo, Jores, Delfino, Ronaldo.

Aos meus tios e tias recebam os meus sinceros agradecimentos em especial a Jolival, Ivanildes e Maria Helena que acreditaram em meu potencial desde o início.

À minha noiva Andréa de Lima Ferreira e a sua família pelo acolhimento carinhoso.

À minha família por estar em todos os momentos ao meu lado, em especial a minha Mãe Hermelina Pereira de Novais e meus irmãos que estão sempre torcendo e vibrando com as minhas conquistas.

A todos que participaram da construção deste trabalho.

A beleza do Sertão está ligada ao grandioso.
É grandioso e terrível o que dá a beleza dele
uma conotação muito diferente, muito es-
tranha e muito forte.

Ariano Suassuna.

Resumo

O estudo de nanomagnetismo tem atraído a atenção de pesquisadores por seu potencial para aplicação tecnológica e também devido ao conhecimento de novos fenômenos, surgidos com essa investigação. O estudo das nanopartículas magnéticas tem seguido dois caminhos: estudo das configurações das nanopartículas individualmente e a interação entre elas. Dentre as configurações magnéticas possíveis destaca-se o vórtice. Este estado magnético é uma das apostas para as novas memórias magnéticas (VRAM), e ainda como gerador de microondas. O objetivo do trabalho consiste em determinar as configurações magnéticas que correspondem aos mínimos de energia de discos e elipses nanoscópicos. Os mínimos de energia foram obtidos utilizando a simulação micromagnética para nanopontos circulares e elípticos de Permalloy; estas simulações foram realizadas utilizando o código OOMMF. Construímos diagramas de fase para esses nanopontos. Os diagramas estão normalizados em termos do comprimento de troca ($l_{tr}=5,2$ nm) do Permalloy. O diagrama dos discos magnético foi construído com a altura reduzida versus o raio reduzido ($h/l_{tr} \times r/l_{tr}$); os discos magnéticos com dimensões de sub-mícron podem ter como configuração magnética de menor energia, a estrutura de monodomínio, com magnetização paralela ou perpendicular ao plano, ou podem formar vórtices magnéticos. Para os nanopontos elípticos o diagrama foi construído com espessura e comprimento do eixo maior variável ($h/l_{tr} \times 2a/l_{tr}$), mantendo uma razão fixa de 2:1 entre os comprimentos dos eixos. O diagrama de fases obtido para os nanopontos elípticos tem uma região semelhante ao diagrama do disco, contudo existem outras duas possibilidades que não são encontradas nos discos: o vórtice lateral e o duplo vórtice, tornando o diagrama de fase da elipse mais complexo. Esses diagramas são úteis como guias para a escolha das dimensões ideais dos nanopontos circulares e elípticos para aplicações.

Palavras-chave: micromagnetismo, nanomagnetismo, simulação, nanopontos, diagrama de fase.

Abstract

The study of nanomagnetism has attracted the attention of researchers for their potential for technological application and also for the new phenomena that arise from this study. The investigation of magnetic nanoparticles has followed two paths: the study of the configuration of the individual nanoparticles and the interaction between them. From the configurations that correspond to energy minima the vortex stands out. This magnetic state is one of the promises for new magnetic memories (the VRAMs) and as generators of microwaves. The goal of this work consists in the determination of the magnetic configurations that correspond to minima in energy, therefore we have studied the magnetic configuration of the individual particles. The energy minima were obtained using a micromagnetic simulation for circular and elliptical nanodots of Permalloy; these simulations were made with the OOMMF code. We have built phase diagrams for the circular and elliptical nanodots: these diagrams are normalized in terms of the exchange length for Permalloy ($l_{ex}=5.2$ nm). The diagram of the magnetic disks was built with the reduced height versus reduced radius ($h/l_{ex} \times r/l_{ex}$). The magnetic disks with submicron dimensions may have as the smallest energy configuration a single domain structure, with the magnetization parallel or perpendicular to the plane, or else may form magnetic vortices. For the elliptical nanodots the diagram was made in terms of thickness versus large axis ($h/l_{ex} \times 2a/l_{ex}$), keeping a ratio of 2:1. The phase diagram obtained for elliptical nanodots has a region similar to the diagram for the disks, but there are two other possibilities that are not found in the disks: the lateral vortex and the double vortex, making the phase diagram of the ellipses more complex. These diagrams are useful as guides for choosing the ideal dimensions of the circular and elliptical nanodots for applications.

Keywords: micromagnetism, nanomagnetism, simulation, nanodots, phase diagram.

Sumário

	iii
Agradecimentos	v
	vii
Resumo	ix
Abstract	xi
Lista de Figuras	xv
Lista de Tabelas	xvii
1 Introdução	1
1.1 Organização do Trabalho	4
2 Aproximação do Micromagnetismo	5
2.1 Energias	6
2.1.1 Energia de Troca	6
2.1.2 Energia Dipolar ou Magnetoestática	10
2.1.3 Energia de Zeeman	12
2.1.4 Energia de Anisotropia	14
2.1.5 Anisotropia Magnetoelástica e Magnetostricção	15
2.2 Equação do Micromagnetismo	17
2.2.1 Equação do Movimento	19
3 Magnetismo de Pequenas Partículas	23
3.1 Superparamagnetismo	24
3.2 Monodomínio	27
3.3 Vórtices	32
4 Método Computacional	37
4.1 Método de diferença finita (MDF)	37

4.1.1	Método de diferença finita aplicado ao micromagnetismo	38
4.2	Simulação de nanopontos magnéticos	41
5	Resultados e Discussão	43
5.1	Nanopontos Circulares	45
5.2	Nanopontos Elípticos	48
6	Conclusões	51
A	Cálculo da Integral de Troca	55
	Referências Bibliográficas	59

Lista de Figuras

2.1	(a) Dipolos magnéticos elementares em um ímã; (b) na superfície do objeto, “polos livres” que surgem dos polos descompensados desses dipolos. . . .	10
2.2	Esquema de como os campos comportam-se dentro de um corpo magnético, $\vec{H}_d = -N_d\vec{M}$ e $\vec{B}_M = \mu_0(1 - N_d)\vec{M}$. Fora do corpo, $\vec{M} = 0$ e $\vec{B}_M = \mu_0\vec{H}$.	11
2.3	Esquema para cálculo do fator de desmagnetização paralelo N_{\parallel}	12
2.4	Comportamento dos domínios magnéticos (a) sem aplicar campo, (b) aplicando campo magnético	16
2.5	Os torques \vec{T} e \vec{T}_a atuando sobre a precessão de M . O torque T causa a precessão de \vec{m} , enquanto \vec{T}_a leva a magnetização para a direção de \vec{H} . O conjunto dos torques é descrito pela equação Landau-Lifshitz-Gilbert (2.46)	20
3.1	Elipse de permalloy com magnetização uniforme, ou seja, monodomínio obtido via simulação numérica, em duas configurações diferentes: a) no plano, b) perpendicular ao plano	24
3.2	Curva esquemática da coercividade versus diâmetro de uma partícula de material magnético macio, a qual mostra quatro regimes, superparamagnético, monodomínio, vórtice, e multidomínio.	25
3.3	Uma nanopartícula possui dois mínimos de energia com magnetizações opostas separadas por uma barreira de energia ΔE . A mudança entre os dois mínimos ocorre se a excitação térmica for maior ou comparável à altura da barreira de energia, ou seja, se $k_B T \gtrsim \Delta E$ [1].	26
3.4	Magnetização \vec{M} de uma partícula de monodomínio que exhibe uma anisotropia uniaxial em um campo magnético externo \vec{H}	28
3.5	Curvas de histerese no modelo de Stoner-Wohlfarth para diferentes ângulos γ entre o campo magnético reduzido e o eixo de fácil magnetização. . . .	32
3.6	Vórtice magnético obtido via simulação, mostrando em destaque, seu núcleo. Em a) as cores representam diferentes sentidos do momento magnético no plano do disco, enquanto que em b) a amplitude fora do plano indica a componente do momento magnético perpendicular ao disco.	33
3.7	Imagem obtida por microscópio de força magnética (MFM) de um arranjo de discos de permalloy, extraído da referência [2].	34

3.8	Os quatro estados degenerados de uma estrutura que apresenta um único vórtice. As setas brancas ilustram o sentido de rotação da magnetização no plano. Imagem extraída da referência [3].	35
3.9	Nanoponto magnético de material macio e forma elipsoidal exibindo dois vórtices de polaridades e circulações opostas, obtida por simulação micromagnética.	35
4.1	Esquema da discretização em duas dimensões de uma superfície quadrada.	38
4.2	Célula quadrada de uma rede $r_{k,l}$ com magnetização homogênea. As cargas na superfície causam o campo de desmagnetização $\vec{H}_s(\vec{r}_{i,j}, \vec{r}_{k,l})$	39
4.3	Configuração magnética de nanopontos circulares e elípticos, mostrando (i) configuração inicial e (ii) configuração final nas simulações micromagnéticas	42
5.1	Configuração de momentos magnéticos de um disco magnético. As cores das setas indicam a componente perpendicular da magnetização.	44
5.2	Comparação das diversas configurações magnéticas para o círculo com a espessura fixa em 20 nm, normalizado em termos do comprimento de troca l_{tr}	45
5.3	Comparação das diversas configurações magnéticas para a elipse e o círculo, considerando o círculos de diâmetro de 70 nm e elipses de eixo maior de (2a) também de 70 nm.	47
5.4	Diagrama de fase para nanopontos circulares de permalloy em função da altura normalizada h/l_{tr} e do raio normalizado r/l_{tr} (l_{tr} é o comprimento de troca), construído a partir do mínimo de energia obtido via simulação numérica.	48
5.5	Diagrama de fase para nanopontos elípticos de permalloy, em função da altura normalizada h/l_{tr} e comprimento normalizado do eixo maior da elipse $2a/l_{tr}$, traçado a partir do mínimo de energia obtido via simulação micromagnética. As elipses em cada caso têm eixos na relação 2:1. Note-se que há uma quebra no eixo horizontal, para revelar as estruturas de dois vórtices obtidas para elipses maiores.	49
5.6	Energia por volume E/V versus espessura h de nanopontos elípticos, com eixo $2a=2560$ nm, mostrando que acima de aproximadamente $h=50$ nm, a configuração com dois vórtices tem uma menor densidade energética do que a configuração com um só vórtice, a partir da simulação micromagnética.	50

Lista de Tabelas

3.1	As combinações da polaridade com a circulação em estruturas que apresentam um único vórtice.	36
5.1	Diferença relativa de energia (em %) entre cálculos realizados com as células de 5 nm e 2,5 nm de aresta.	44

Capítulo 1

Introdução

O magnetismo é uma parte da Física que, através de suas aplicações, fascina a todas as pessoas. Qual a criança que não fica maravilhada brincando com ímãs que se atraem ou se repelem dependendo de suas posições relativas, por meio de forças misteriosas que atravessam materiais? Einstein relatava ter ficado maravilhado quando brincava com ímãs, limalha de ferro e bússolas.

O primeiro tratado sobre magnetismo, *De Magnete*, datado de 1600 foi escrito por Gilbert que é considerado o “Pai do Magnetismo”. O final do século XIX foi marcado por dois grandes físicos: Faraday utilizou o termo campo magnético pela primeira vez, descobriu a lei da indução e caracterizou vários materiais segundo seu comportamento magnético; Maxwell formulou matematicamente a base da eletrodinâmica com suas equações. Em seguida, veio a descoberta do elétron (atribuída a Thompson) e o efeito Zeeman. Com a termodinâmica já estabelecida, P. Curie iniciou o estudo das propriedades termodinâmicas dos materiais segundo a dependência da susceptibilidade com a temperatura. A lei de Curie pôde ser explicada teoricamente por Langevin com modelos clássicos e a estatística de Maxwell-Boltzmann.

O século XX foi marcado pelo surgimento da mecânica quântica possibilitando o entendimento moderno do magnetismo. Contudo, do ponto de vista clássico, duas importantes contribuições surgiram:

- i) A primeira teoria moderna do magnetismo com o conceito de campo molecular descoberta por Weiss e a lei de Curie-Weiss. Porém, o campo molecular não tem

explicação clássica

- ii) Segundo o teorema de Van Leeuwen, utilizando um tratamento clássico em um sistema de partículas para uma temperatura finita com qualquer campo aplicado a magnetização é nula. Logo, o magnetismo não pode ser explicado pela física clássica.

Assim, a antiga mecânica quântica explicou a origem dos momentos magnéticos atômicos com o modelo de Bohr que estabeleceu a unidade fundamental do momento magnético, o magneton de Bohr $\mu_B = e\hbar/m_e$. A moderna mecânica quântica permitiu descrever o spin do elétron com $g = 2$; logo o ferromagnetismo e a origem do campo de Weiss foram explicados com a interação de troca $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$.

Na década de 1940 W. F. Brown publicou dois trabalhos pioneiros sobre a teoria do micromagnetismo de materiais ferromagnéticos. Nos anos 1950 é estabelecida a teoria do micromagnetismo como uma ferramenta para compreender as propriedades e características do processo de magnetização e a curva de histerese [4]. A teoria do micromagnetismo de Brown é baseada em outras duas propostas que são consideradas os pré-requisitos para a sua formulação:

- A descrição da energia de troca para um contínuo, descrito por Landau e Lifshitz [5].
- A derivação da energia de acoplamento magnetoelástica, permitindo a descrição da interação magneto-mecânica [4,6]

As equações do micromagnetismo são não-lineares e não-locais, portanto a resolução analítica é complexa, exceto nos casos em que uma linearização é possível. No entanto, uma série de problemas têm a necessidade de tratamento adequado dessas complexas equações [7]. Motivo pelo qual, utilizamos a simulação micromagnética para resolver as situações mais complexas.

O nanomagnetismo é a área de pesquisa em Física que trata das propriedades magnéticas dos objetos da escala nanoscópica à mesoscópica. O nanomagnetismo engloba o estudo das propriedades e aplicações do magnetismo de nanopartículas isoladas, nanofios, filmes finos, multicamadas, e amostras magnéticas volumosas que incorporam partículas

nanoscópicas. Materiais que contêm partículas, filmes e outras estruturas em escala nanoscópica são frequentemente classificados como materiais nanoestruturados.

A investigação e obtenção de sistemas nanoestruturados é uma área de grande interesse científico e tecnológico na atualidade. Esse interesse tem estimulado importantes progressos no desenvolvimento de técnicas e ferramentas para análise e manipulação da matéria em escala atômica, permitindo planejar e fabricar nanoestruturas de maneira controlada.

A aplicação mais bem sucedida do nanomagnetismo tem sido a gravação magnética, que levou esta tecnologia a uma evolução vertiginosa nas últimas cinco décadas. A densidade de gravação magnética nos discos rígidos disponíveis no mercado duplica a cada dois meses. A fim de se atingir densidade de gravação cada vez maior, foi realizado um grande esforço para estudar as propriedades magnéticas das pequenas partículas e também das estruturas de filmes finos que são partes constituintes dos discos rígidos e cabeças de leitura magnética.

A aplicação aos dispositivos, especialmente dispositivos de spintrônica, representa outra fronteira em rápida expansão.

Estruturas nanoscópicas e mesoscópicas na forma de disco ou elipses têm atraído muito o interesse dos pesquisadores nos últimos anos, por suas interessantes propriedades físicas e por suas potenciais aplicações. As nanoestruturas na forma de disco e elipse apresentam uma configuração magnética chamada vórtice, na qual os momentos magnético se arrajam em círculos concêntricos, na sua maior parte confinados no palno.

O vórtice magnético nestas estruturas representa o nível de energia mais baixo e tem sido observado de diversas formas, tais como: microscópio de força atômica (MFM) [2], microscopia de raio-X [8], inferência da curva de histerese [9]. A manipulação das propriedades do vórtice através da transferência de torque pelo spin é uma das propostas para a nova memória magnética de ultra alta densidade, conhecida como VRAM (das iniciais em inglês, Memória de Acesso Aleatório de Vórtice) [3,10]. Outra possível aplicação dos vórtices é na geração de microondas provocadas pelas nano-oscilações devido à transferência de torque pelo spin [11,12].

O objetivo dessa dissertação foi mapear as configurações magnéticas de amostras nas formas circulares e elípticas. Estas amostras estão compreendidas em uma região de tamanho que vai da escala nanométrica à micrométrica, ou seja, 10^{-9} m à 10^{-6} m. Este estudo está baseado na formulação micromagnética, onde as equações estabelecidas no micromagnetismo foram resolvidas numericamente. As soluções das equações do micromagnetismo foram obtidas utilizando o programa (OOMMF), distribuído gratuitamente pelo NIST [13].

1.1 Organização do Trabalho

No capítulo (2) apresentamos as energias relevantes nos materiais magnéticos e os conceitos básicos para a aproximação micromagnética.

No capítulo (3) discutimos o magnetismo de pequenas partículas e apresentamos as configurações magnéticas possíveis para os nanopontos circulares e elípticos.

No capítulo (4) mostramos como o programa de simulação micromagnética (OOMMF [13]) realiza os cálculos e obtém as soluções. E mais as estratégias para a minimização do tempo computacional para a obtenção das configurações magnéticas com a energia mais baixa.

No capítulo (5) apresentamos os principais resultados obtidos nesta dissertação.

Por fim, no capítulo (6) apresentamos as conclusões obtidas e as perspectivas futuras.

Capítulo 2

Aproximação do Micromagnetismo

A descrição microscópica de materiais magnéticos envolve o spin como a entidade física relevante, com interações que dão origem às suas propriedades macroscópicas mensuráveis. Contudo, outra abordagem, conhecida como Micromagnetismo, descreve o meio magnético, como um contínuo e está centrada sobre a evolução de $\vec{M}(\vec{r})$ (ou a polarização magnética $J(\vec{r}) = \mu_0 \vec{M}(\vec{r})$). Nesta abordagem toma-se a magnetização constante em um elemento de volume maior do que a dimensão atômica, porém, muito menor que a amostra. Deste modo, pressupõe-se que cada elemento de volume atinja o equilíbrio termodinâmico em um curto espaço de tempo, muito mais rápido do que a amostra [14].

Esta abordagem foi desenvolvida por Brown, Landau e Lifshitz, e Kittel e é a base de muitos programas de simulação numérica [4]. A magnetização $\vec{M}(\vec{r})$ na amostra é obtida a partir da minimização da energia total, que inclui a energia de troca, a energia de anisotropia e energia dipolar (ou magnetostática). A competição entre os três tipos de energia dará a configuração magnética da amostra [15].

As equações que expressam a condição de mínimo para uma dada configuração magnética são chamadas de *equações de Brown* e serão discutidas na seção (2.2). As equações de Brown dão as propriedades matemáticas e os fundamentos físicos para a descrição dos materiais magnéticos.

2.1 Energias

Como ponto de partida para descrever as energias de um sistema ferromagnético vamos considerar a energia livre de Gibbs dada por

$$\phi = \int_V (U - TS - \sigma\epsilon - \mu\vec{M} \cdot \vec{H}_{ext}) dV \quad (2.1)$$

onde U é a energia interna, T é a temperatura, S é a entropia e σ e ϵ são tensores de tensão e de deformação. O ultimo termo descreve a interação da magnetização com o campo externo \vec{H}_{ext} aplicado. Na energia interna U são incluídos os termos relacionado com a interação de troca, o anisotrópico, o dipolar, ou interação magnetoestática, e o termo magneto-elástico [4].

A interação que contribui para a energia interna pode ser local ou não local [16]; a energia em um ponto da amostra pode depender da magnetização local, ou também pode depender da magnetização de cada ponto da amostra. A energia de troca, a energia anisotrópica e a energia magnetoelástica são todas locais. As contribuições não locais são a energia dipolar, e o termo magnetoestritivo devido a diferentes direções da magnetização nas diferentes regiões da amostra.

2.1.1 Energia de Troca

O momento magnético de um átomo isolado é determinado pela regra de Hund. A existência desse momento magnético se deve à interação intra-atômica. Em uma rede cristalina pode-se ter uma forte interação entre seus átomos com momentos magnéticos de spin ou momento orbital. Isso ocorre porque os elétrons nos átomos são indistinguíveis, o que pode ser importante quando os átomos compartilham uma mesma região, levando ao acoplamento entre os spins dos átomos da rede.

A interação de troca é a interação responsável pelo estabelecimento da ordem magnética nos materiais magnéticos. A integral de troca está demonstrada no apêndice (A), logo

$$\mathcal{J} = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0} \left[\langle \varphi_a \varphi_b | \frac{1}{r_{12}} | \varphi_a \varphi_b \rangle \right] = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0} \int \varphi_a^* \varphi_b^* \frac{1}{r_{12}} \varphi_a \varphi_b dr_1 dr_2 \quad (2.2)$$

A interação entre dois de spins \hat{S}_1 e \hat{S}_2 é descrita pelo hamiltoniano,

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J}\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \quad (2.3)$$

onde \mathcal{J} é a constante de troca, ou seja, é uma medida da intensidade de interação e é determinado indiretamente através de experimentos e

$$\langle \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle \hat{S}^2 \rangle - \langle \hat{S}_1^2 \rangle - \langle \hat{S}_2^2 \rangle \right) = \frac{1}{2} \left[s(s+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1) \right]. \quad (2.4)$$

Este hamiltoniano é conhecido com hamiltoniano de Heisenberg.

- O estado tem $S = 1$ para acoplamento ferromagnético
- O estado tem $S = 0$ para acoplamento antiferromagnético

Uma conclusão que podemos tirar da equação (2.2) é que a interação de troca é de curto alcance, ou seja, ela só tem magnitude considerável quando há superposição de funções de onda dos elétrons em questão. Para elétrons de átomos distintos, essa superposição só acontece entre átomos próximos (em geral, além dos primeiros vizinhos a interação já é pequena) [17]. A essa interação também é dado o nome de interação de troca “direta”. Vamos generalizar a equação (2.3) para uma rede cristalina na forma

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \mathcal{J}_{ij} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j \quad (2.5)$$

onde \mathcal{H} é o hamiltoniano de troca para todo o sistema considerado. O fator 1/2 compensa a dupla contagem de um mesmo par de spins. Logo, ao valor esperado desse Hamiltoniano vamos chamar de energia de troca E_{tr} , e assim passaremos para uma abordagem semi-clássica, em que o operador de spin \hat{S}_i será substituído por um vetor clássico \vec{S}_i igual ao seu valor esperado $\langle S_i \rangle$. A equação (2.5) pode ser simplificada se levarmos em conta o curto alcance da interação de troca, considerando $\mathcal{J}_{ij} \neq 0$ apenas para átomos vizinhos, e supusermos que \mathcal{J}_{ij} tem o mesmo valor para todos os pares de vizinhos $\mathcal{J}_{ij} = J$ se

$J = i \pm 1$. O produto escalar torna-se,

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = S^2 \cos \theta_{ij}$$

onde θ é o ângulo entre os spins \vec{S}_i e \vec{S}_j , S é o mesmo para todo sítio i . Então, a expressão para a energia de troca (E_{tr}) é,

$$E_{tr} = -JS^2 \sum_{\text{vizinhos}} \cos \theta_{ij} \quad (2.6)$$

onde a somatória é feita sobre todos os pares vizinhos. A condição de menor energia acontece quando $\theta = 0$. Na situação em que θ for grande a energia com relação ao estado de $\theta = 0$ é muito maior. Portanto, para $\theta \simeq 0$ podemos usar a aproximação de segunda ordem

$$\cos \theta = 1 - \frac{\theta^2}{2}$$

Logo, em torno de $\theta = 0$ a energia de troca fica:

$$E_{tr} = -SJN_{\text{vizinho}} + \frac{JS^2}{2} \sum_{\text{vizinho}} \theta_{ij}^2 \quad (2.7)$$

onde o primeiro termo é constante e corresponde à situação em que todos os spins estão na mesma direção. Podemos absorver esse termo constante em outros termos de energia e redefinir a energia de troca apenas como o segundo termo.

Outra forma bastante útil de expressar a interação de troca é fazer uma aproximação contínua, a chamada aproximação micromagnética. Nessa aproximação ignoramos o caráter discreto em que os momentos magnéticos estão distribuídos nos sítios da rede cristalina e supomos que o material tem uma magnetização contínua $\vec{M}(\vec{r})$, que tem módulo constante $\vec{M}(\vec{r}) = M_s$, e que só varia na direção; assim vamos, representar por:

$$\vec{m} = \frac{\vec{M}(\vec{r})}{M_s} \quad (2.8)$$

Para pequenos θ_{ij} , $|\theta_{ij}| = |\vec{m}_i - \vec{m}_j|$, supomos que podemos introduzir uma função

contínua \vec{m} , tal que \vec{m} é expandida em torno de \vec{r}_j o vetor posição no sítio j , como

$$\vec{m}_j - \vec{m}_i = (\vec{r}_{ji} \cdot \nabla) \vec{m} \quad (2.9)$$

Partindo dos desenvolvimentos que fizemos para o caso discreto, é possível chegar a uma expressão para a energia de troca na aproximação contínua na forma:

$$\begin{aligned} E_{tr} &= JS((\vec{r}_j \cdot \vec{\nabla}) \vec{m}) \\ &= A \int [(\vec{\nabla} m_x)^2 + (\vec{\nabla} m_y)^2 + (\vec{\nabla} m_z)^2] dV \end{aligned} \quad (2.10)$$

com $A = 2JS^2z/a$ chamada rigidez de troca, ou simplesmente constante de troca, onde a é a distância entre primeiros vizinhos. A rigidez de troca indica a intensidade da interação de troca. A energia de troca por unidade de volume é encontrada dividindo por $V = a^3$, no caso de estrutura cúbica simples. Neste caso, $\sum_j r_j^2 = 6a^2$, então temos

$$\frac{E_{tr}}{V} = \frac{JS^2}{a} [(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2] \quad (2.11)$$

o coeficiente da E_{tr} é a constante de rigidez de troca A ,

$$A = \frac{nJS^2}{a} \quad (2.12)$$

O número n é igual a 1 para rede cúbica simples, 2 para rede ccc (cúbica de corpo centrada) e 4 para rede cfc (cúbica de face centrado). No caso mais geral, para os materiais que não são cúbicos e isotrópicos, A é um tensor e a energia de troca é

$$E_{tr} = \int \sum_{i,k,l} A_{kl} \frac{\partial m_i}{\partial x_k} \frac{\partial m_i}{\partial x_l} dV \quad (2.13)$$

De forma geral a principal idéia que deve ficar dessa seção é que nos materiais ferromagnéticos existe uma forte interação entre spins vizinhos que mantêm esses spins alinhados. A atuação da interação de troca é de curto alcance e se opõe às mudanças bruscas na orientação de momentos magnéticos vizinhos (2.7), ou na imagem contínua,

se opõe a gradientes de magnetização (2.10).

2.1.2 Energia Dipolar ou Magnetoestática

A energia dipolar ou magnetoestática é originada pelo campo de desmagnetização H_d , campo este gerado pela própria amostra [16], devido aos polos magnéticos não compensados na superfície do objeto, como mostra a figura (2.1) ou à inhomogeneidade em \vec{M} .

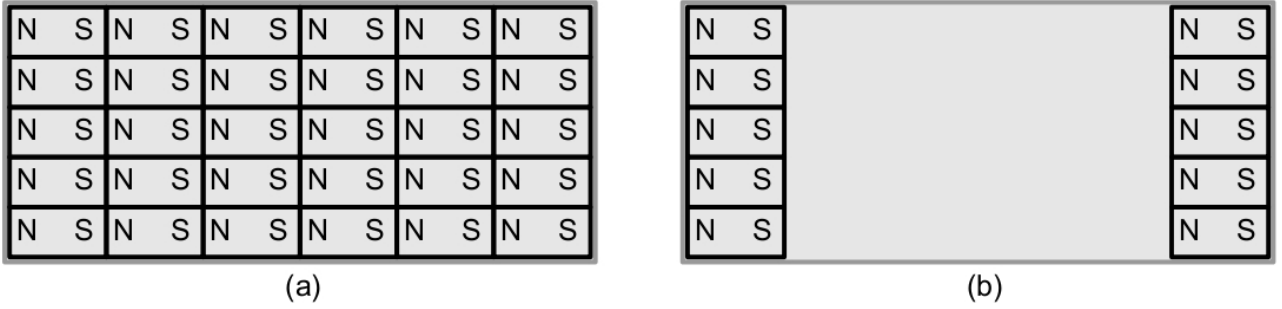


Figura 2.1: (a) Dipolos magnéticos elementares em um ímã; (b) na superfície do objeto, “polos livres” que surgem dos polos descompensados desses dipolos.

Das equações de Maxwell, temos

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) \quad (2.14)$$

onde \vec{B} é o campo aplicado, \vec{H} é o campo induzido e \vec{M} é a magnetização do sistema.

Tomando a divergência da equação (2.14), sabemos que $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$, logo

$$\vec{\nabla} \cdot [\mu_0(\vec{H} + \vec{M})] = 0 \quad (2.15)$$

Sabemos que $\vec{H} = \vec{H}_0 - \vec{H}_d$, daí a equação (2.15) fica na forma

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H}_d = \vec{\nabla} \cdot \vec{M}. \quad (2.16)$$

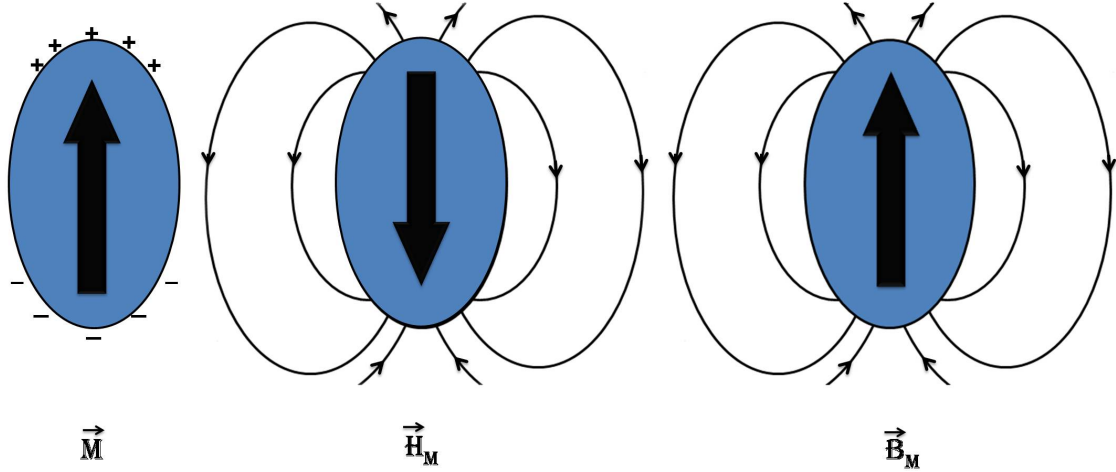


Figura 2.2: Esquema de como os campos comportam-se dentro de um corpo magnético, $\vec{H}_d = -N_d\vec{M}$ e $\vec{B}_M = \mu_0(1 - N_d)\vec{M}$. Fora do corpo, $\vec{M} = 0$ e $\vec{B}_M = \mu_0\vec{H}$.

A energia dipolar E_{ms} é dada pela magnetização e pelo campo desmagnetizante [14]

$$E_{ms} = -\frac{1}{2}\mu_0 \int_V \vec{H}_d \cdot \vec{M} dV \quad (2.17)$$

A integral é feita no volume da amostra. O fator 1/2 é incluído para não somarmos duas vezes o termo da auto energia. Usando,

$$\int_{\text{todo espaço}} \vec{H}_d \cdot \vec{B} dV \equiv 0 \quad (2.18)$$

para regiões onde não existem correntes e utilizando a definição de \vec{B} dada pela equação (2.14) e a equação (2.16), temos

$$E_{ms} = \frac{1}{2}\mu_0 \int_{\text{todo espaço}} \vec{H}_d^2 dV \quad (2.19)$$

as equações (2.17) e (2.20) são equivalentes. Deste modo, pode-se calcular a energia dipolar das amostras utilizando-se as duas formas, logo

$$E_{ms} = -\frac{1}{2}\mu_0 \int_V \vec{H}_d \cdot \vec{M} dV = \frac{1}{2}\mu_0 \int_{\text{todo espaço}} \vec{H}_d^2 dV. \quad (2.20)$$

O campo de desmagnetização H_d é dado por

$$\vec{H}_d = -N_d \vec{M} \quad (2.21)$$

onde o N_d é o fator de desmagnetização, que depende tanto da forma com também da direção de magnetização.

Tomemos o exemplo de um elipsóide uniformemente magnetizado, como na figura (2.3). A intensidade do campo desmagnetizante \vec{H}_d é maior quando o elipsóide está magnetizado ao longo do eixo menor da figura (2.3), pois há uma maior quantidade de polos magnéticos não compensados na superfície. Com a magnetização na direção do eixo maior da figura (2.3) \vec{H}_d é minimizado, sendo essa a condição de menor energia.

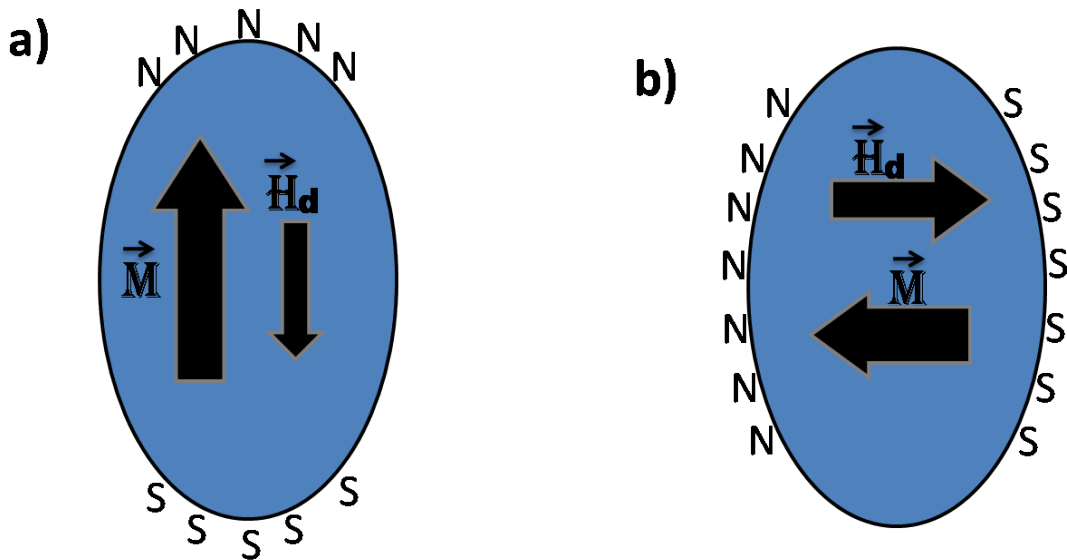


Figura 2.3: Esquema para cálculo do fator de desmagnetização paralelo N_{\parallel} .

2.1.3 Energia de Zeeman

A energia associada a um corpo magnético na presença de um campo externo \vec{H} é chamada de energia de Zeeman. Esta energia será a causa do alinhamento paralelo da magnetização com o campo externo para minimizar a energia [18]. Para um campo uniforme externo essa energia depende apenas da média da magnetização e não da estrutura dos domínios ou forma da amostra [4].

O que Zeeman basicamente observou foi a interação do momento magnético (dipolar

ou spin) do material com o campo magnético aplicado. Onde o momento magnético pode ser angular ou spin, ou seja, pode ser clássico ou quântico. A expressão para essa interação pode ser obtida com a expansão em série de Taylor do campo magnético,

$$\vec{H}(\vec{r}) = \vec{H}(0) + \vec{r} \cdot \nabla \vec{H}(0) \quad (2.22)$$

e substituindo na equação de força temos,

$$\vec{F} = \vec{H}(0) \times \int \vec{J}(\vec{r}') d^3 r' + \int \vec{J}(\vec{r}') \times [(\vec{r}' \cdot \nabla) \vec{H}(0)] d^3 r' + \dots \quad (2.23)$$

onde \vec{J} é a densidade de corrente, e o momento magnético é

$$\vec{m} = \frac{1}{2c} \int \vec{r} \times \vec{J}(\vec{r}) dv \quad (2.24)$$

onde c é a velocidade da luz e por manipulação algébrica chegamos a

$$\vec{F} = \mu_0 \nabla (\vec{m} \cdot \vec{H}) \quad (2.25)$$

Como a força é o negativo do gradiente da energia potencial, temos que,

$$E_Z = -\mu_0 \vec{m} \cdot \vec{H} \quad (2.26)$$

onde a configuração de mínimo de energia ocorre quando o momento \vec{m} e o campo \vec{B} estão paralelos e o máximo de energia quando estão anti-paralelos. A energia Zeeman para um sistema composto de N momentos é a soma de todos os termos,

$$E_Z = \mu_0 \sum_{i=1}^N -\vec{m}_i \cdot \vec{H}_i \quad (2.27)$$

onde \vec{H}_i é o campo magnético ao qual cada momento magnético \vec{m}_i está exposto.

2.1.4 Energia de Anisotropia

O hamiltoniano de Heisenberg é completamente isotrópico e o nível de energia não depende da direção do espaço na qual o cristal está magnetizado [19]. Contudo, a energia de um ferromagneto depende da direção da magnetização relativa às estruturas dos eixos do material [7]. Esta dependência resulta basicamente da interação spin-órbita, sendo descrita pela *energia de anisotropia*.

Quando a energia de um amostra ordenada magneticamente depende da direção relativa da magnetização e das estruturas dos eixos, em um caso simples, a amostra tem um eixo no qual a energia é mínima [14]. A anisotropia magnética pode ser proveniente de várias causas: de origem cristalina, ou devido à forma da amostra, ou à tensão no material, ou segregação atômica, etc.

A energia de anisotropia E_A é escrita em termos dos co-senos diretores α_1 , α_2 e α_3 definidos em relação ao eixos do cristal [14].

Anisotropia Uniaxial

O campo cristalino influencia o momento orbital dos elétrons. A contribuição para o magnetismo do momento orbital dos elétrons é, em geral, muito pequena (exceto no caso das terras raras), e esse efeito não seria importante. Todavia, o momento de spin e o momento orbital dos elétrons estão acoplados através da interação spin-órbita e um alinhamento do momento orbital se traduz em um alinhamento do momento de spin.

Em algumas amostras podemos fazer uma aproximação na qual a anisotropia depende apenas do ângulo θ entre a magnetização e um dado eixo. Isso normalmente se aplica aos sistemas tetragonal e hexagonal. A energia de anisotropia por unidade de volume assume a forma

$$E_A = V (K_1 \text{sen}^2 \theta + K_2 \text{sen}^4 \theta) \quad (2.28)$$

onde θ é o ângulo entre o eixo de anisotropia e a direção da magnetização, K_1 e K_2 são constantes de anisotropia [7]. A depender da magnitude das constantes de anisotropia K_1 e K_2 a amostra tem um eixo fácil. Logo, K_1 possuindo um grande valor positivo ($K_1 \gg 0$)

a amostra tem um eixo fácil, porém, K_1 possuindo um grande valor negativo ($K_1 \ll 0$) tem um plano fácil perpendicular ao eixo de anisotropia [14]. A constante de anisotropia tem dimensão de energia por volume E/V . Para valores intermediários, temos

$$0 > \frac{K_1}{K_2} > 2,$$

e a direção fácil assume a forma de um cone relativo ao ângulo Θ dado por

$$\text{sen}^2\Theta = \frac{1}{2} \frac{K_1}{K_2}, \quad (2.29)$$

sendo denominada de caso canônico [7].

2.1.5 Anisotropia Magnetoelástica e Magnetostricção

Tensões na rede cristalina de um material ferromagnético provocam mudanças em sua anisotropia magnetocristalina. As deformações da estrutura cristalina têm consequências no acoplamento das órbitas eletrônicas com o campo cristalino da rede. Dependendo da direção da tensão aplicada esse termo pode contribuir tanto para anisotropia planar quanto perpendicular. Outro fenômeno que dá origem à anisotropia magnetoelástica é a chamada magnetostricção [4].

A magnetostricção é a propriedade dos materiais ferromagnéticos de se deformarem pela presença de um campo magnético externo, ou seja, quando um ferromagnético é magnetizado, ele encolhe (ou expande) na direção da magnetização [19]. Esse fenômeno pode provocar tensões na interface entre dois domínios magnetizados em direções diferentes, o que implica uma anisotropia magnetoelástica. Sua expressão em um cristal cúbico é dada por [14]

$$\frac{E_{me}}{V} = B_1 (\alpha_1^2 \epsilon_{xx} + \alpha_2^2 \epsilon_{yy} + \alpha_3^2 \epsilon_{zz}) + B_2 (\alpha_1 \alpha_2 \epsilon_{xy} + \alpha_2 \alpha_3 \epsilon_{yz} + \alpha_1 \alpha_3 \epsilon_{zx}) \quad (2.30)$$

Os fatores “B” são as constantes de acoplamento magnetoelástico e os α_i são os co-senos diretores [14].

A magnetostricção é um efeito provocado pela mudança da dimensão do corpo, o

que ocasiona uma mudança no estado da magnetização. Contudo, o volume não varia porque na direção perpendicular à deformação se produz uma deformação proporcional de sinal contrário. Alguns efeitos magnetostrictivos implicam acoplamentos nas três direções do espaço e a natureza anisotrópica da magnetostricção. Assim, quando uma amostra desmagnetizada tem sua magnetização alinhada por um campo magnético, a deformação da amostra é anisotrópica. A magnetostricção é medida pela deformação linear relativa λ

$$\lambda = \frac{\delta l}{l_0} \quad (2.31)$$

onde $\delta l = l - l_0$ é a variação linear do corpo.

Manifestações de magnetostricção podem ser evidenciadas com a aplicação de campos magnéticos constantes, aumentando sua intensidade ou variando sua direção. A figura (2.4) ilustra a aplicação de um campo magnético ao longo do maior eixo do material ferromagnético e a sua deformação correspondente medida em termos da variação do comprimento relativo ao comprimento original.

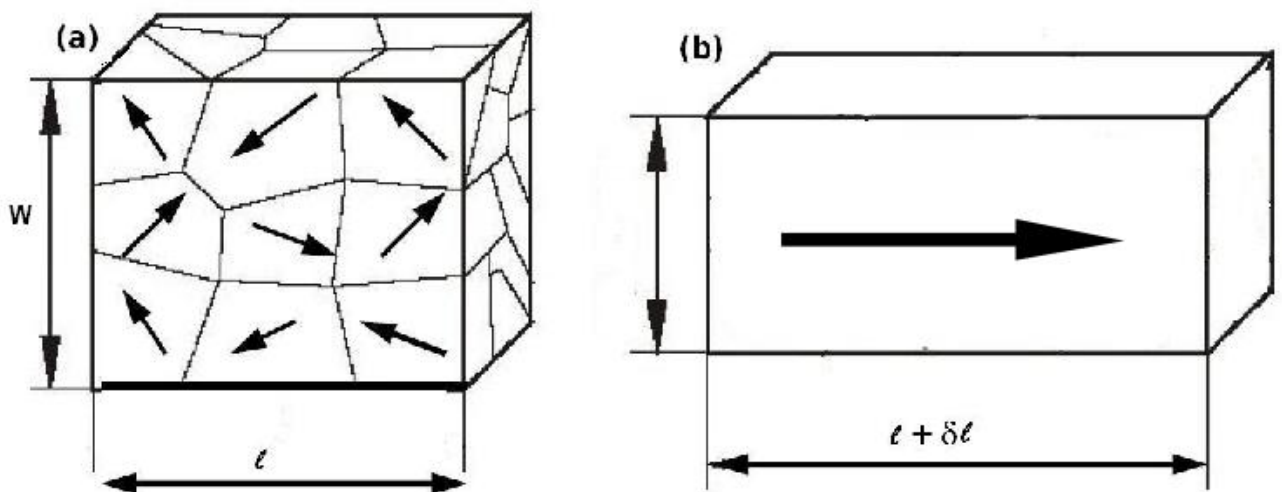


Figura 2.4: Comportamento dos domínios magnéticos (a) sem aplicar campo, (b) aplicando campo magnético

Assim, diferentes interações nos materiais magnéticos podem contribuir para a anisotropia total. Porém, a densidade total de energia de anisotropia em casos simples pode ser es-

crita em termos de uma constante de anisotropia efetiva K_{efe} , logo a densidade total fica:

$$\frac{E_A}{V} = K_{efe} \sin^2 \theta \quad (2.32)$$

onde o termo K_{efe} , tem influência da forma, da superfície, da rede cristalina, etc.

2.2 Equação do Micromagnetismo

As equações do micromagnetismo são derivadas da minimização das energias do sistema. Então, a energia total E_T do sistema levando em conta os termos de energia discutidos na seção (2.1) é dada por

$$E_T = E_{tr} + E_A + E_{ms} + E_Z \quad (2.33)$$

Logo, a energia total no volume é

$$E_T = \int_V \left\{ A \left[\vec{\nabla} \frac{\vec{M}}{M_s} \right]^2 + K_1 e_A(\theta) - \frac{\mu_0}{2} \vec{M} \cdot \vec{H}_d(M) - \mu_0 \vec{M} \cdot \vec{H} \right\} dV \quad (2.34)$$

Em termos da magnetização reduzida \vec{m} , podemos escrever a equação (2.34) na forma

$$E_T = \int_V \left\{ A \left(\vec{\nabla} \vec{m} \right)^2 + K_1 e_A(\theta) - \frac{\mu_0}{2} M_s \vec{m} \cdot \vec{H}_d(M) - \mu_0 M_s \vec{m} \cdot \vec{H} \right\} dV \quad (2.35)$$

A minimização da energia leva à condição de que $\vec{M}(\vec{r})$ deve ser paralelo ao campo magnético efetivo atuando no ponto \vec{r} , um campo cuja interação com $\vec{M}(\vec{r})$ é equivalente à energia de troca, anisotrópica e magnetoestática, e ao efeito do campo magnético externo. Isso equivale à condição de que o torque exercido por este campo efetivo agindo sobre a magnetização em cada ponto é zero [14, 19], logo

$$\mu_0 \vec{m} \times \vec{H}_{efe} = 0 \quad (2.36)$$

O campo efetivo \vec{H}_{efe} atuando sobre $\vec{M}(\vec{r})$ é obtido realizando a derivada da equação

(2.35) com respeito ao vetor magnetização \vec{m}

$$\vec{H}_{efe} = \frac{2}{\mu_0 M_s} \vec{\nabla} \left(A(\vec{\nabla} \vec{m}) \right) - \frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\partial E_A}{\partial \vec{m}} + \vec{H}_{ms} + \vec{H}_{ext} \quad (2.37)$$

onde E_A é a anisotropia de forma. Analisando a equação (2.36), obtemos

$$\vec{H}_{efe}^\perp = 0, \quad (2.38)$$

pois \vec{H}_{efe}^\parallel não contribui na equação (2.36). Supõe-se nesta abordagem que a magnetização de saturação M_s não é afetada pela componente paralela do campo efetivo \vec{H}_{efe} .

Portanto, a condição para minimizar a energia é dada pela condição de contorno

$$\vec{m} \times \frac{\partial \vec{m}}{\partial \hat{n}} = 0 \quad (2.39)$$

onde

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial \hat{n}}$$

é a derivada da direção normal da superfície da amostra. Uma vez que o módulo de \vec{m} é fixo, a equação acima é equivalente a

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial \hat{n}} = 0 \quad (2.40)$$

uma condição que não pode ser cumprida se houver anisotropia na superfície. As equações (2.36) e (2.39) são conhecidas como equações de Brown.

A condição de equilíbrio pode ser obtida a partir do cálculo variacional de $\delta E_T = 0$ onde E_T é dada na equação (2.34)

$$\vec{H}_c = \frac{2K_1}{\mu_0 M_s} - N_{efe} M_s \quad (2.41)$$

com $N_{efe} = N_\parallel - N_\perp$. Nesta equação, N_{efe} é o fator desmagnetizante efetivo, supondo que $K_1 > 0$, caso contrário deveria expressar estas quantidades em termos de $|K|$.

2.2.1 Equação do Movimento

A equação do movimento da magnetização \vec{M} em um campo magnético aplicado é determinada pelo fato de que os elétrons, responsáveis pelo magnetismo dos átomos e moléculas, também têm momento angular, colineares com os seus momentos magnéticos. Portanto, o torque exercido por este campo é

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \vec{T} = \gamma_e \vec{M} \times \mu_0 \vec{H} = \gamma_G \vec{M} \times \vec{H} \quad (2.42)$$

onde γ_e é a razão giromagnética do elétron e μ_0 é a permeabilidade do vácuo ou constante magnética. A constante γ_G é a razão giromagnética de Gilbert, que é o número positivo e proporcional a razão giromagnética do elétron γ_e :

$$\gamma_G = \mu_0 \gamma_e. \quad (2.43)$$

A equação (2.42) é a equação de movimento para o momento magnético na ausência de um fator de amortecimento. A equação (2.42) descreve um movimento de precessão de \vec{M} em torno da direção do campo \vec{H} ; este campo não pode variar a componente da magnetização paralela a ele. Esta descrição é aplicável aos momentos magnéticos isolados, ou seja, momentos magnéticos que não interagem, ou trocam energia com outro sub-sistema, que funcionaria como um reservatório térmico. Este conjunto de momentos magnéticos só vai mudar a sua magnetização, chegando a outra configuração de equilíbrio, se houver um mecanismo para este intercâmbio.

A experiência nos diz que o momento magnético, no fim de contas, se move para a direção do campo. Como o torque da equação (2.42) não pode realizar esta mudança, vamos introduzir um torque (\vec{T}_a) adicional perpendicular ao $\vec{T} = \gamma_G \vec{M} \times \vec{H}$ dado por

$$\vec{T}_a = C \left[\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \right] \quad (2.44)$$

onde a constante de proporcionalidade C é puramente fenomenológica. Deste modo, o torque \vec{T}_a faz com que o movimento de \vec{M} passa a ser irreversível [20]. Neste caso, a

descrição matemática correspondente incluiria amortecimento, ou relaxação magnética. A descrição fenomenológica que contém tal amortecimento é a equação de Gilbert:

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = -\gamma_G \vec{m} \times \vec{H} + \alpha_G \vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \quad (2.45)$$

onde α_G é a constante de amortecimento de Gilbert, o parâmetro γ_G é a razão giro-magnética de Gilbert.

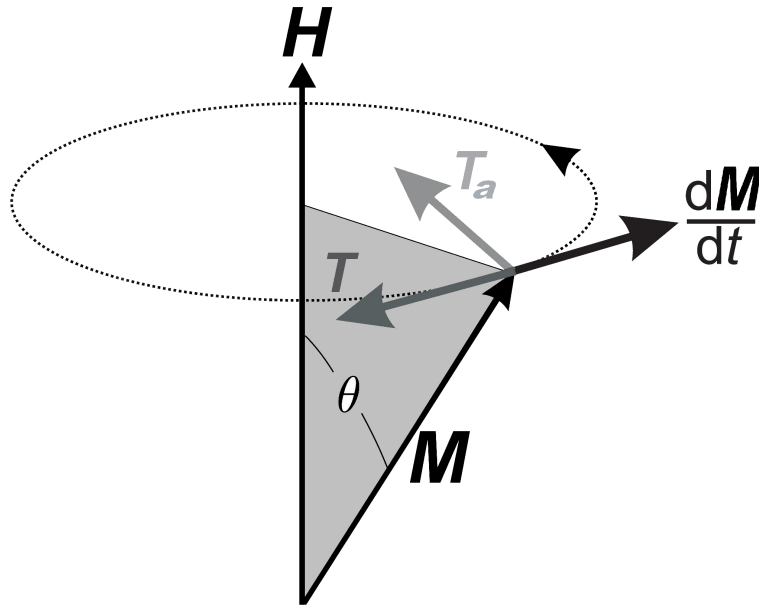


Figura 2.5: Os torques \vec{T} e \vec{T}_a atuando sobre a precessão de M . O torque T causa a precessão de \vec{m} , enquanto \vec{T}_a leva a magnetização para a direção de \vec{H} . O conjunto dos torques é descrito pela equação Landau-Lifshitz-Gilbert (2.46)

O primeiro termo descreve a precessão de \vec{M} em um ângulo θ fixo em relação ao campo magnético de direção \vec{H} , como mostra a figura (2.5) devido ao torque dado pela equação (2.42). O segundo termo descreve a mudança de \vec{M} devido ao torque \vec{T}_a mostrado na equação (2.44) [7].

Outra descrição para a dinâmica da magnetização \vec{M} que não tem o termo $d\vec{M}/dt$ em ambos os lados da equação é a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, que é matematicamente equivalente, contudo esta tem um termo de relaxação com uma forma diferente. Esta equação pode ser derivada da equação (2.45) e é escrita na forma

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = -\gamma \vec{m} \times \vec{H}_{efe} + \alpha \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}_{efe}). \quad (2.46)$$

As constantes de amortecimento fenomenológicas (os termos α) e as razões giro-magnéticas utilizadas nas duas equações estão relacionadas através de:

$$\gamma = \frac{\gamma_G}{1 + \alpha_G^2} \quad (2.47)$$

$$\alpha = \frac{\alpha_G \gamma_G}{1 + \alpha_G^2} \quad (2.48)$$

A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) permite descrever a magnetização evoluindo com o tempo. A evolução temporal da magnetização na amostra é dada pela solução do conjunto completo das soluções da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, cada uma correspondendo a um elemento de volume em que a amostra é dividida. A solução da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert neste caso só é possível numericamente. No presente trabalho, a solução da equação (2.46), foi obtida para cada elemento de volume da amostra empregando o programa OOMMF [13], como será explicado no capítulo (4).

Capítulo 3

Magnetismo de Pequenas Partículas

O estudo das propriedades dos sistemas magnéticos nanoestruturados foi intensificado de maneira notável nos últimos anos. O aprimoramento no controle dos processos de produção e caracterização destes sistemas tornou possível uma excursão a um conjunto de informações físicas de um mundo até então desconhecido. Isto tem levado a inúmeros benefícios, tanto no campo tecnológico quanto no desenvolvimento da compreensão de fenômenos envolvidos nesta escala, que aumenta com o grau de controle da estrutura fina da matéria. Nanopartículas magnéticas formam sistemas físicos que são relevantes para muitas aplicações, tais como meios de gravação magnética e magneto-óptica, materiais biomédicos e ímãs permanentes. Em muitos casos são o ponto de partida de desenvolvimentos fundamentais em Nanomagnetismo.

De modo geral, para a compreensão dos novos fenômenos referentes à baixa dimensionalidade de sistemas magnéticos, devemos considerar os efeitos devidos à quantidade reduzida de átomos que compõem cada amostra magnética (efeitos de tamanho finito) assim como a contribuição de efeitos de superfície, pois à medida que se reduz o tamanho de uma amostra aumenta de forma considerável a quantidade relativa de átomos que compõe a superfície.

Efeitos de tamanho finito surgem nas amostras nanométricas, nos casos em que alguma de suas dimensões é menor ou comparáveis a comprimentos característicos fundamentais, tais como: tamanho de domínio magnético, largura de parede de domínio magnético, comprimento de troca, comprimento de difusão de spin eletrônico, livre caminho médio

eletrônico, etc. Já efeitos de superfície originam-se da quebra de simetria translacional na fronteira da amostra magnética, do elevado número relativo de átomos que compõe a superfície da amostra, da redução do número de coordenação dos átomos da superfície, etc. Detalhes sobre os efeitos de tamanho finito, e efeitos de superfície são encontrados nas referências ([14], [7], [21])

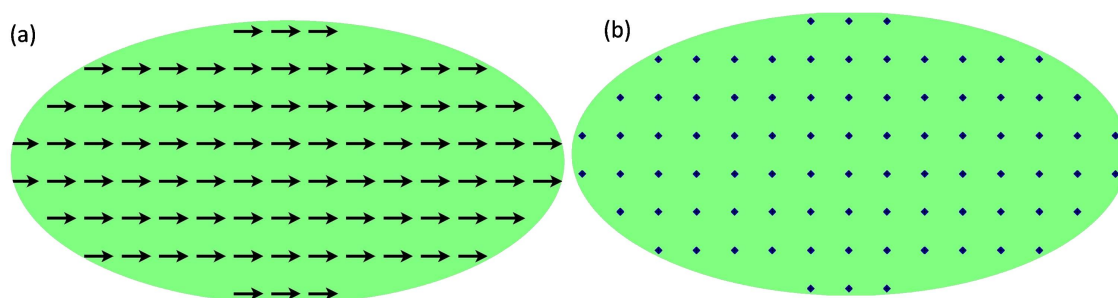


Figura 3.1: Elipse de permalloy com magnetização uniforme, ou seja, monodomínio obtido via simulação numérica, em duas configurações diferentes: a) no plano, b) perpendicular ao plano

Assim, neste capítulo, centraremos atenção nas configurações magnéticas das partículas com dimensões que vão da escala nanométrica à micrométrica. Nanopartículas magnéticas podem apresentar várias configurações magnéticas, dentre as quais se destacam: um único domínio (monodomínio) em duas possíveis configurações; a magnetização no plano (ver figura (3.1a)) e fora do plano (ver figura (3.1b)); o estado de vórtice, e vários domínios (multidomínio). A figura (3.2) mostra de forma esquemática como se comportam as nanopartículas magnéticas em termos da coercividade com a variação do diâmetro das nanoestruturas.

3.1 Superparamagnetismo

Em partículas que apresentam o estado monodomínio a direção da magnetização espontânea é determinada pela competição entre os efeitos térmicos e as anisotropias. Como resultado, para uma partícula de volume V existe uma barreira de energia $E_B = KV$ imposta pela anisotropia do material (K é a constante de anisotropia) que decresce à medida que as partículas diminuem seus tamanhos [22]. Portanto, existe um valor crítico do volume das partículas para o qual os efeitos térmicos se impõem aos de anisotropia, e o ordenamento magnético deixa de ser estável. Sendo assim, a histerese magnética de-

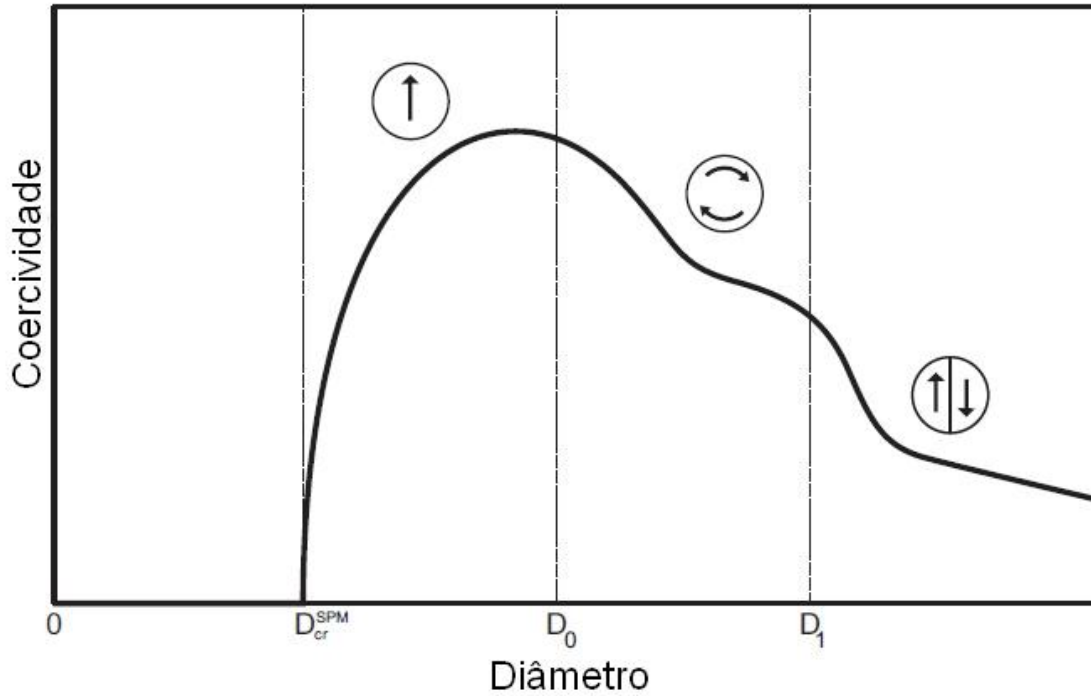


Figura 3.2: Curva esquemática da coercividade versus diâmetro de uma partícula de material magnético macio, a qual mostra quatro regimes, superparamagnético, monodomínio, vórtice, e multidomínio.

saparece e o material mostra um comportamento semelhante ao paramagnético clássico, com a diferença que o momento magnético da partícula pode ser da ordem de centenas ou milhares de magnetons de Bohr.

Consideremos a situação na qual as nanopartículas são ativadas pela energia térmica, ou seja, $k_B T \simeq E_B$. Então, a magnetização irá evoluir com o tempo, uma vez que serão termicamente ativadas transições entre os dois mínimos (ver figura (3.3)) [14]. A magnetização irá variar com o tempo, com uma dependência de forma exponencial

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\frac{\vec{M}}{\tau_0} e^{-\frac{KV}{k_B T}} = -\frac{\vec{M}}{\tau} \quad (3.1)$$

onde \vec{M} é a magnetização da nanopartícula, τ é o tempo de relaxação, que é o inverso da frequência, sendo escrito na forma

$$\tau = \tau_0 e^{\frac{E_B}{k_B T}}, \quad (3.2)$$

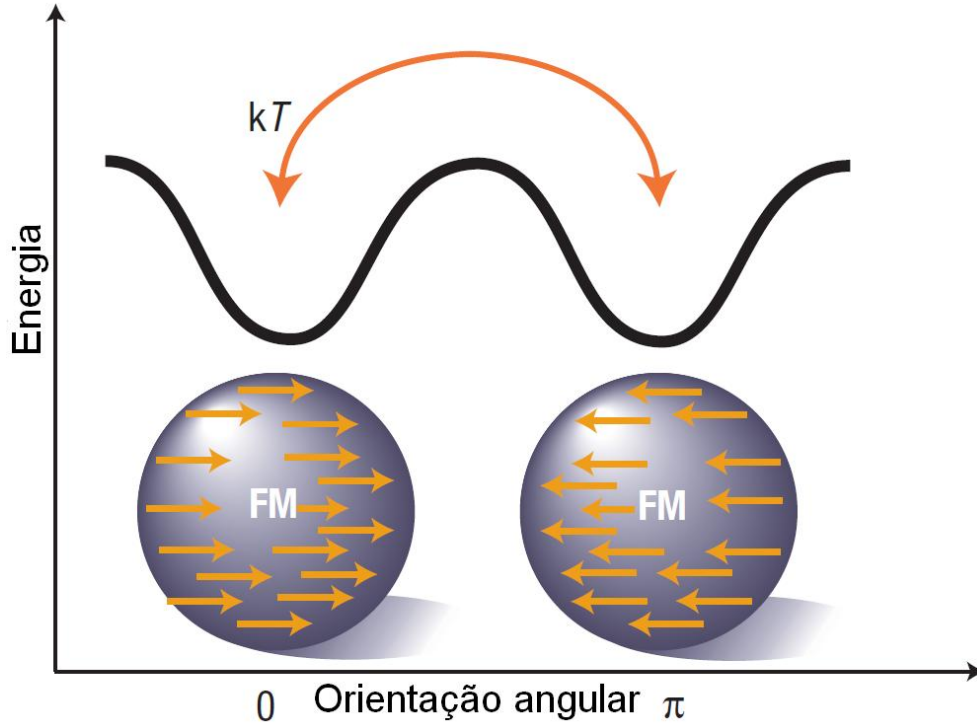


Figura 3.3: Uma nanopartícula possui dois mínimos de energia com magnetizações opostas separadas por uma barreira de energia ΔE . A mudança entre os dois mínimos ocorre se a excitação térmica for maior ou comparável à altura da barreira de energia, ou seja, se $k_B T \gtrsim \Delta E$ [1].

conhecida como a lei de Néel-Arrhenius. Com $\tau = \nu^{-1}$, temos

$$\nu = \tau_0^{-1} e^{-\frac{E_B}{k_B T}} \quad (3.3)$$

O comportamento magnético de uma partícula depende do tempo de medida. A medida da magnetização \vec{M} tem um tempo característico da ordem de $t_m = 100$ s. Com base neste tempo afirmamos:

- Para $t < t_m$ a partícula apresenta-se no regime superparamagnético
- Para $t > t_m$ a partícula apresenta-se no regime bloqueado (ferromagnético)

Da equação (3.2) podemos calcular o volume crítico para o qual a partícula entra no estado superparamagnético. Obtemos

$$\ln \tau = \ln \tau_0 + \frac{KV}{k_B T} \quad (3.4)$$

Assim, o volume crítico fica:

$$V_{cr} \approx \frac{25k_B T}{K} \quad (3.5)$$

Logo, da equação (3.4) calculamos o diâmetro crítico para nanopartícula de forma esférica,

$$D_{cr} = \left(\frac{6 k_B T}{\pi K} \right)^{1/3} \quad (3.6)$$

Analogamente, fazendo o raciocínio inverso, podemos calcular a temperatura para que uma nanopartícula de volume V tenha comportamento ferromagnético. Chamamos esta temperatura de temperatura de bloqueio T_B , que é dada por

$$T_B = \frac{KV}{25k_B} \quad (3.7)$$

3.2 Monodomínio

A energia magnetostática escala com o volume do sistema. A energia de uma parede de domínio, por sua vez, é reduzida proporcionalmente à sua área, quando reduzimos as dimensões do sistema. Ao considerar sistemas com tamanhos muito reduzidos estamos diminuindo a influência da energia magnetostática e aumentando a importância das paredes de domínio no balanço de energia. Abaixo de certo tamanho, o qual vamos chamar d_{cr} (dimensão do monodomínio) é mais favorável energeticamente ao sistema se magnetizar uniformemente, do que se dividir em domínios, pois o custo energético da parede supera o ganho em energia magnetostática. O valor exato de d_{cr} depende de fatores como magnetização de saturação, energia de anisotropia, energia de troca, e pode ser expresso por

$$d_{cr} = 72 \frac{\sqrt{AK}}{\mu_0 M_s^2} \quad (3.8)$$

onde A é a rigidez de troca e é relacionada à integral de troca, K é a constante de anisotropia e M_s é a magnetização de saturação. Abaixo desse tamanho, se o sistema for

magnetizado na direção de um eixo de fácil magnetização, ele mantém sua magnetização na ausência de campo externo aplicado e não se divide em domínios.

Partículas que exibem apenas um único domínio e forma elipsoidal são descritas pelo modelo de Stoner-Wohlfarth e possuem uma magnetização de saturação uniforme M_s [21]. A variação da magnetização devido a um campo magnético externo depende da anisotropia do elemento caracterizado por uma anisotropia efetiva K_{efe} , tendo como causa a forma, a estrutura cristalina, etc. Em um sistema que não possui anisotropia a magnetização de saturação M_s é sempre paralela ao campo magnético externo \vec{H} . Ao considerar uma anisotropia uniaxial temos que a soma da energia de anisotropia e a energia do campo (Energia Zeeman) é

$$E_A = K \sen^2\theta - \mu_0\vec{H} \cdot \vec{M} = K \sen^2\theta - \mu_0HM_s \cos(\gamma - \theta) \quad (3.9)$$

onde θ é o ângulo entre \vec{M} e o eixo de anisotropia, o qual será orientado ao longo no eixo x, como mostra a figura (3.4). O plano em que a magnetização pode girar é definido em relação ao eixo fácil e o \vec{H} exibimos com o ângulo γ com respeito ao eixo x.

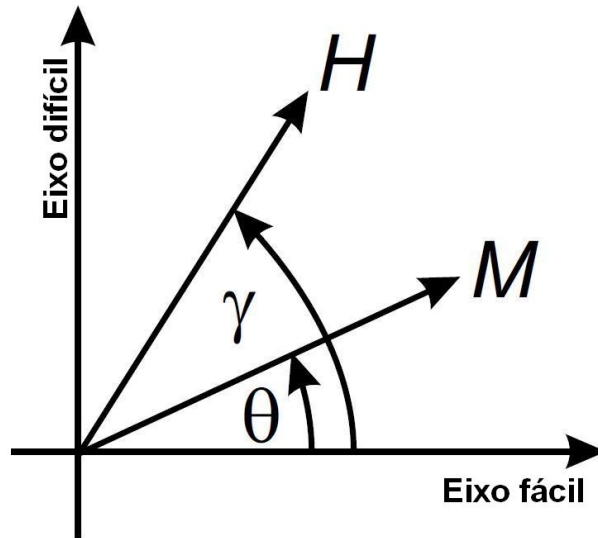


Figura 3.4: Magnetização \vec{M} de uma partícula de monodomínio que exibe uma anisotropia uniaxial em um campo magnético externo \vec{H} .

Com o campo \vec{H} decomposto em coordenadas cartesianas a energia de anisotropia

fica

$$E_A = K \sen^2 \theta - \mu_0 H_x M_s \cos(\theta) - \mu_0 H_y M_s \sen(\theta) \quad (3.10)$$

A energia se torna a mínima para um θ bem definido o qual pode ser determinado na forma

$$\frac{dE_A}{d\theta} = 2K \sen\theta \cos\theta + \mu_0 H_x M_s \sen(\theta) - \mu_0 H_y M_s \cos(\theta) \quad (3.11)$$

logo, obtemos

$$\frac{H_y}{\sen\theta} - \frac{H_x}{\cos\theta} = \alpha \quad (3.12)$$

com

$$\alpha = \frac{2K}{\mu_0 M_s}.$$

Esta equação é uma expressão quártica em $\cos\theta$. Entretanto, duas ou quatro soluções reais que existem dependem da magnitude de \vec{H} . Duas soluções resultam em um mínimo, ou seja, a magnetização \vec{M}_s exibe uma condição de equilíbrio. Quatro soluções levam a dois mínimos e a duas orientações de equilíbrio de \vec{M}_s [21].

Vamos primeiro discutir a situação em que o campo magnético externo é paralelo ao eixo fácil, logo

$$H_x = H \quad e \quad H_y = 0.$$

Com isto, a equação (3.11) fica

$$\alpha \cos\theta + H = 0 \quad (3.13)$$

Obtemos duas soluções reais para todos os valores de $-1 \leq H/\alpha \leq 1$ e apenas uma para $H/\alpha \geq 1$. Assim, se o campo aplicado e a magnetização da partícula de monodomínio são orientados para o valor positivo ao longo do eixo fácil, ou seja, se $\gamma = 0$ e $\theta = 0$ a primeira derivada possui um valor positivo em uma posição estável. Logo,

reduzindo o campo externo a zero e, posteriormente, aumentando-o para valores negativos ($\gamma = 180^\circ$) até $-1 \leq H/\alpha$ a magnetização tem sua saturação e está alinhada ao longo do sentido positivo do eixo fácil. Com o aumento do campo externo a primeira derivada da energia diminui e a energia do domínio se aproxima do extremo local. Logo que o campo externo atinge o valor de α a primeira derivada muda seu sinal e a magnetização torna-se instável. Então, a magnetização tem uma mudança abrupta na direção do campo externo. Assim, a magnetização inverte seu valor de positiva para negativa. O campo α é o campo de anisotropia.

Vamos discutir agora a situação na qual o campo magnético externo é perpendicular ao eixo fácil, deste modo,

$$\gamma = 90^\circ \quad H_x = H \quad e \quad H_y = 0.$$

Nesta situação a equação (3.11) toma a seguinte forma

$$\alpha \sin \theta + H = 0 \tag{3.14}$$

Portanto, a componente da magnetização paralela ao campo aplicado é uma função linear do campo externo, logo não observamos qualquer histerese no sistema e a magnetização é completamente reversível [15]. A saturação é alcançada se a magnitude do campo externo é maior que α . A primeira derivada da energia muda de sinal, enquanto que a magnetização gira para a direção do campo aplicado.

Para o caso de um campo externo aplicado em uma direção arbitrária em relação ao eixo fácil da magnetização, a magnetização é parcialmente reversível e parcialmente irreversível. O ângulo crítico para o qual a magnetização muda a partir de uma posição estável para a outra é determinado pela equação (3.11).

A condição de contorno entre as duas regiões onde a posição de equilíbrio torna-se instável com o campo externo variando continuamente é dada por:

$$\frac{\partial^2 E_A}{\partial \theta^2} = 0 \tag{3.15}$$

Logo, a segunda derivada é

$$\frac{\partial^2 E_A}{\partial \theta^2} = H_x \cos \theta + H_y \operatorname{sen} \theta + \alpha (\cos^2 \theta - \operatorname{sen}^2 \theta) \quad (3.16)$$

Como α é dado pela equação (3.12) então, a equação (3.17) fica

$$\frac{\partial^2 E_A}{\partial \theta^2} = \frac{H_x}{\cos^3 \theta} + \frac{H_y}{\operatorname{sen}^3 \theta} \quad (3.17)$$

Assim, temos duas condições dadas pelas equações (3.12) e (3.17) que têm que ser respeitadas, daí podemos escrever

$$\frac{H_y}{\operatorname{sen} \theta} - \frac{H_x}{\cos \theta} = \alpha \quad (3.18)$$

$$\frac{H_x}{\cos^3 \theta} + \frac{H_y}{\operatorname{sen}^3 \theta} = 0 \quad (3.19)$$

A solução para o sistema de equações é dada por

$$H_x = -\alpha \cos^3 \theta \quad (3.20)$$

$$H_y = \alpha \operatorname{sen}^3 \theta \quad (3.21)$$

Vamos escrever os campos H_x e H_y em termos dos campos reduzidos h_x e h_y , para isto, vamos dividir as equações (3.20) e (3.21) por α , logo

$$h_x = \frac{H_x}{\alpha} = -\cos^3 \theta \quad (3.22)$$

$$h_y = \frac{H_y}{\alpha} = \operatorname{sen}^3 \theta \quad (3.23)$$

Das equações (3.22 e 3.23)

$$h_x^{2/3} = \cos^2 \theta \quad (3.24)$$

$$h_y^{2/3} = \operatorname{sen}^2 \theta \quad (3.25)$$

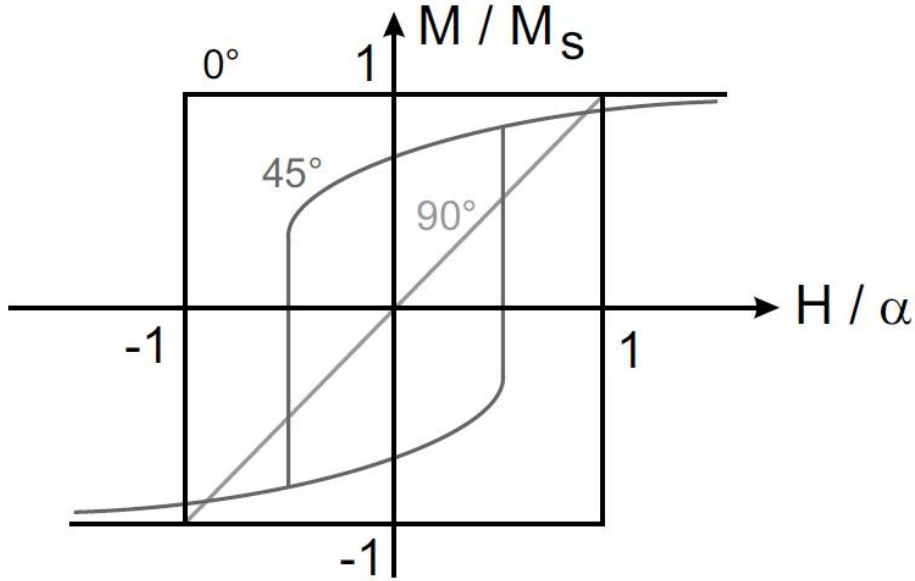


Figura 3.5: Curvas de histerese no modelo de Stoner-Wohlfarth para diferentes ângulos γ entre o campo magnético reduzido e o eixo de fácil magnetização.

somando as equações (3.27 e 3.26)

$$h_x^{2/3} + h_y^{2/3} = \cos^2 \theta + \sin^2 \theta. \quad (3.26)$$

Por fim, obtemos

$$h_x^{2/3} + h_y^{2/3} = 1 \quad (3.27)$$

A figura (3.5) mostra curvas de histerese seguindo o modelo de Stoner-Wohlfarth para valores distintos de γ .

3.3 Vórtices

O estudo de vórtices magnéticos tem sido objeto de um grande interesse na comunidade científica nos últimos anos. As alterações do comportamento usual de domínios observados em sistemas nanoestruturados, tais como, nanopilares e microdiscos, têm impulsionado a pesquisa em magnetismo.

Uma situação peculiar ocorre em amostra de material ferromagnético macio de dimensões nanométricas, tendendo à largura típica de uma parede de domínio, ou seja, de tamanho próximo ao limiar entre o regime de formação de estrutura de domínios e o de

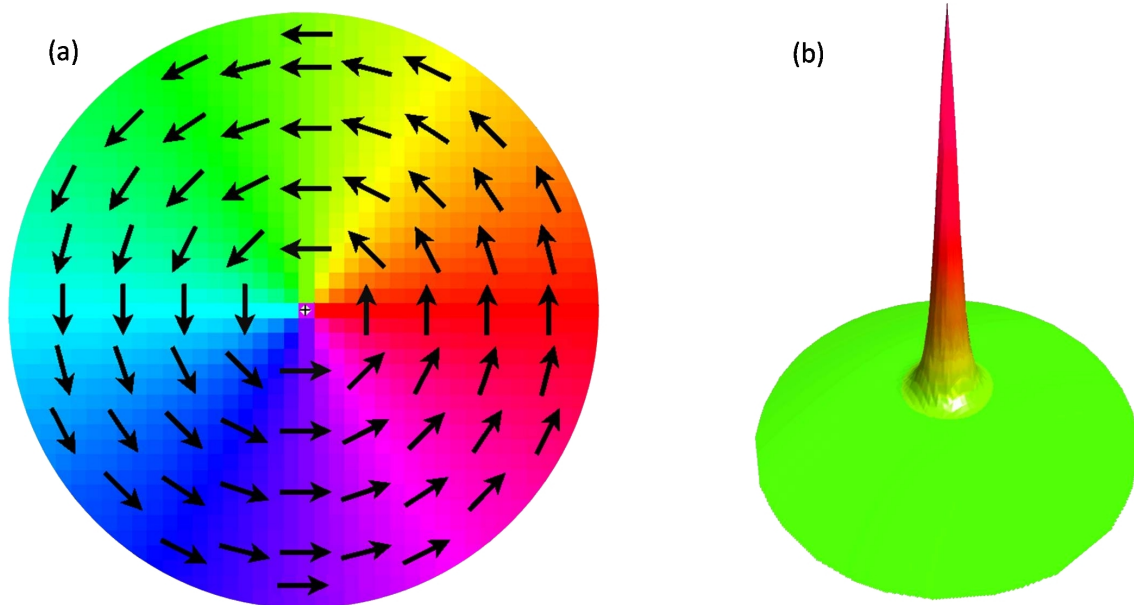


Figura 3.6: Vórtice magnético obtido via simulação, mostrando em destaque, seu núcleo. Em **a)** as cores representam diferentes sentidos do momento magnético no plano do disco, enquanto que em **b)** a amplitude fora do plano indica a componente do momento magnético perpendicular ao disco.

monodômios. Neste caso, a minimização da energia magnetostática pode favorecer a formação de vórtices. O estado de vórtice caracteriza-se por apresentar uma configuração de spin girante, isto é, a magnetização forma círculos concêntricos como mostra a figura (3.6a) [2].

A interação de troca é um fator determinante na microestrutura magnética do centro do vórtice. Nas proximidades do centro do disco, o ângulo entre spins adjacentes tornar-se-ia cada vez maior se as direções de spins permanecessem confinadas no plano; isso acarretaria um alto custo na energia de troca. Para reduzir o termo de troca, no entanto, no centro da estrutura do vórtice, a magnetização dentro de uma pequena área fica fora do plano, a qual vamos denominar de núcleo do vórtice (ver figura (3.6b)). A formação do núcleo permite que a magnetização varie suavemente em todo o vórtice, e assim a energia de troca também é minimizada.

A estrutura em vórtice é bem sucedida em minimizar a energia magnetostática, pois não gera polos de superfície, exceto no núcleo do vórtice. Pressupondo que os materiais são macios, a energia de anisotropia não desempenha papel importante. A interação de troca, porém, é um fator determinante na microestrutura magnética do centro do vórtice.

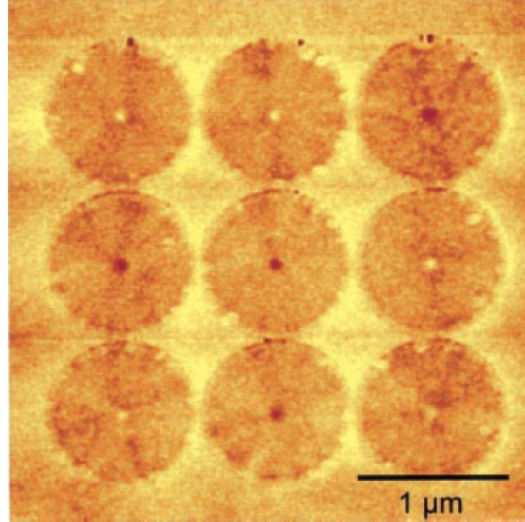


Figura 3.7: Imagem obtida por microscópio de força magnética (MFM) de um arranjo de discos de permalloy, extraído da referência [2].

Assim, o núcleo do vórtice, embora já tivesse sido previsto teoricamente [7] foi observado experimentalmente pela primeira vez em 2000, através de medidas de microscopia de força magnética (MFM) em discos de permalloy que mostram pontos escuros ou claros no centro dos discos, como mostra a figura (3.7) [2], por dois grupos diferentes, simultaneamente ([2] e [23]).

O núcleo do vórtice tem em geral um raio R_c da ordem do comprimento de troca l_{tr} o qual no caso do permalloy é de 5,2 nm. A distribuição da magnetização perpendicular $M_z(\vec{r})$ apresenta uma simetria axial. A componente z da magnetização do núcleo do vórtice pode apontar para cima ou para baixo a partir desta característica. Definindo-se assim a polaridade do vórtice p , que é um parâmetro com valores +1 ou -1, respectivamente.

$$p = +1 \quad M_z > 0 \text{ (para cima)}$$

$$p = -1 \quad M_z < 0 \text{ (para baixo)}$$

O sentido de rotação da magnetização pode ser tanto no sentido horário (H) ou anti-horário (AH). Isso define a circulação ou vorticidade do vórtice, que é medida quantitativamente pela integral do ângulo ao longo da magnetização dividida por 2π . Assim, $c = -1$ para um vórtice girando no sentido horário e $c = +1$ para um vórtice anti-horário.

No caso de nanopontos que apresentam apenas um vórtice existem quatro estados

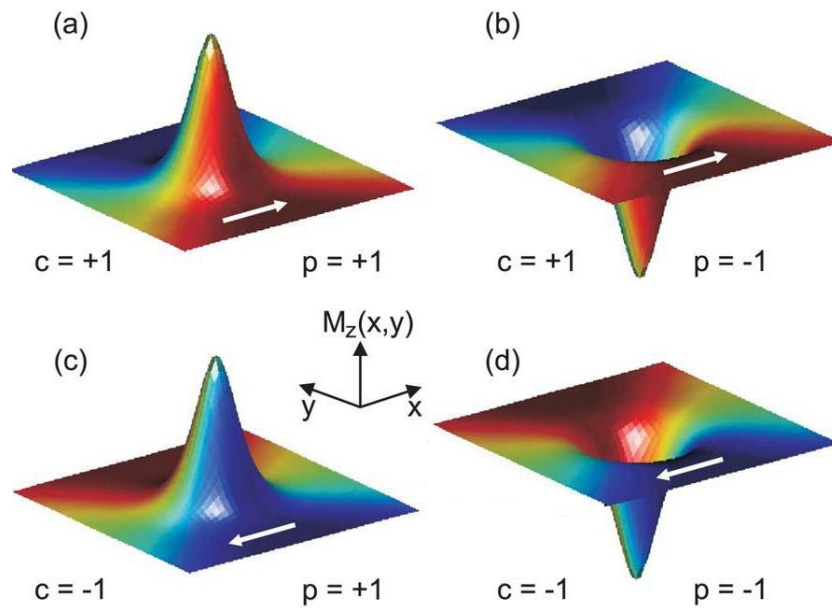


Figura 3.8: Os quatro estados degenerados de uma estrutura que apresenta um único vórtice. As setas brancas ilustram o sentido de rotação da magnetização no plano. Imagem extraída da referência [3].

possíveis com a mesma energia, resultantes de combinações entre a polarização e a circulação, ou seja, estes estados são degenerados. As combinações entre o sentido de circulação e a polaridade do vórtice, onde p é a polaridade, H circulação no sentido horário AH anti-horário, enquanto cp é a quiralidade, são mostradas na figura (3.8).

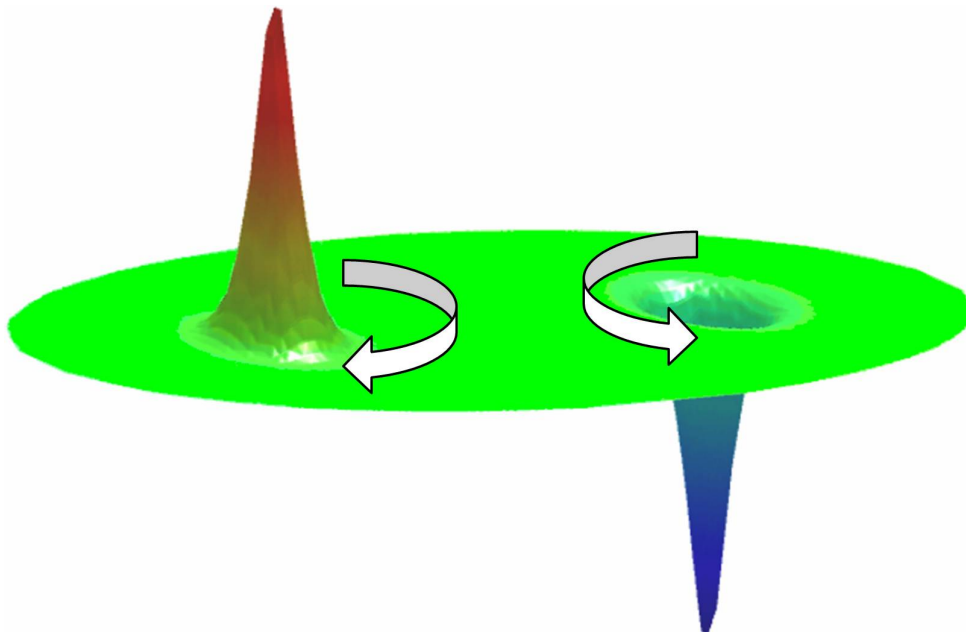


Figura 3.9: Nanoponto magnético de material macio e forma elipsoidal exibindo dois vórtices de polaridades e circulações opostas, obtida por simulação micromagnética.

Tabela 3.1: As combinações da polaridade com a circulação em estruturas que apresentam um único vórtice.

$p = +1$ (para cima)	$c = -1$ (H)	$cp = -1$
$p = +1$ (para cima)	$c = +1$ (AH)	$cp = +1$
$p = -1$ (para baixo)	$c = -1$ (H)	$cp = +1$
$p = -1$ (para baixo)	$c = +1$ (AH)	$cp = -1$

Contudo, existem casos onde aparecem mais de um vórtice, em nanopontos de forma elíptica com o eixo maior acima de $2 \mu\text{m}$. No caso da elipse que apresenta duplo vórtice a circulação da magnetização apresenta sentidos de rotação opostos, ou seja, horário e anti-horário (H e AH) na mesma elipse (3.9). Entretanto, as polaridades dos vórtices podem ser as mesmas, ou opostas. Para os dois vórtices, o produto das polaridades $p_1 \cdot p_2$ toma valores $p_1 \cdot p_2 = \pm 1$ [24].

Capítulo 4

Método Computacional

Com a teoria do micromagnetismo poucos problemas podem ser resolvidos rigorosamente; assim, ao envolver microestruturas mais complexas esses problemas têm sido resolvidos através de métodos aproximados, sem uma solução rigorosa das equações não-lineares do micromagnetismo. Contudo, utilizando métodos numéricos podemos resolver problemas que envolvem pequenas partículas magnéticas. As primeiras soluções numéricas foram obtidas usando o método de Ritz, minimizando a energia livre de Gibbs (2.1) em relação a parâmetros livres de uma função para uma distribuição de magnetização. Porém, a técnica de Ritz não permite um tratamento muito correto para um campo dipolar de longo alcance, então, outros métodos foram desenvolvidos. Os métodos de elemento finito e diferença finita associados à transformada de Fourier rápida têm sido mais eficientes. Estes métodos têm sido aplicados extensivamente em problemas de pequenas partículas para determinar sua magnetização. O código computacional OOMMF [13], que utilizamos para realizar nossas simulações, utiliza o método de diferença finita associado à transformada de Fourier rápida.

4.1 Método de diferença finita (MDF)

O método de diferença finita é um método numérico amplamente utilizado para resolver problemas com equações diferenciais [25]. A ideia básica do método consiste na aproximação das derivadas parciais de uma função $u(r, t)$ por quocientes de diferenças

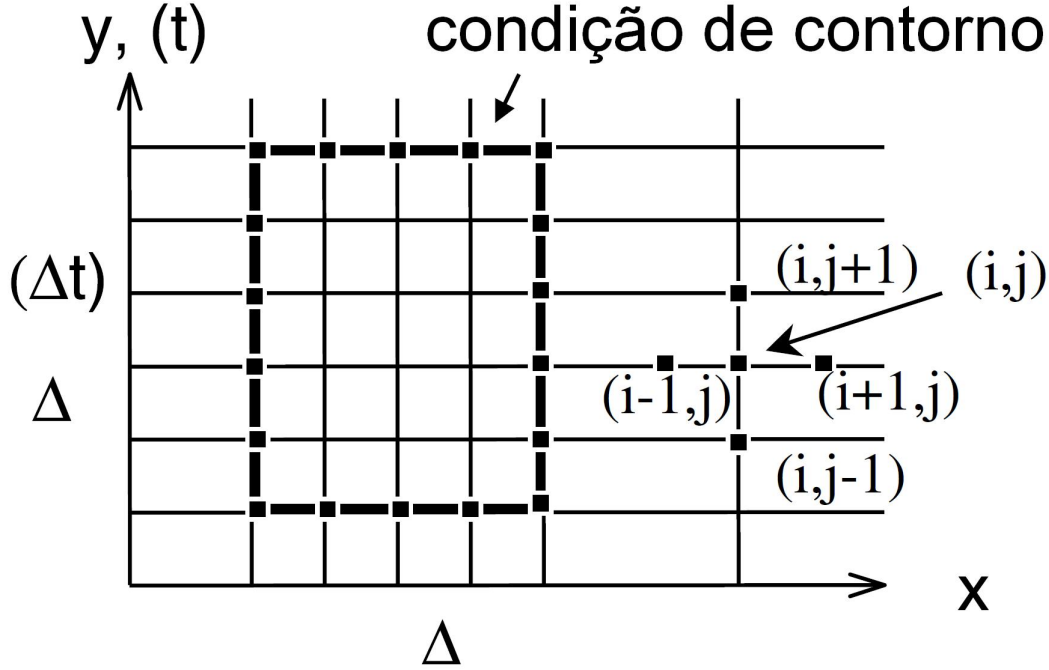


Figura 4.1: Esquema da discretização em duas dimensões de uma superfície quadrada.

finitas de Δx , Δy , Δz e Δt .

$$u(x + \Delta x, y, z, t) = u(x, y, z, t) + \Delta x \frac{\partial u(x, y, z, t)}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 u(x, y, z, t)}{\partial x^2} \quad (4.1)$$

A equação diferencial parcial pode ser substituída por um sistema de equações algébricas. O sistema de equações algébricas pode ser resolvido numericamente por um processo iterativo.

No método de diferença finita o espaço é discretizado em blocos retangulares tridimensionais ou em retângulos no espaço bidimensional. A figura (4.1) mostra o esquema da discretização para o caso bidimensional da função $u(x_i, y_i)$ de acordo com o método de diferença finita.

4.1.1 Método de diferença finita aplicado ao micromagnetismo

A simulação micromagnética utilizando o método de elemento finito tem sido extensamente aplicado para obter solução da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert [4]. Neste caso, a configuração magnética é determinada quer pela minimização da energia livre de Gibbs magnética (2.1) ou pela determinação do desaparecimento do torque $[\vec{M} \times \vec{H}_{efe}]$ exercido pelo campo \vec{H}_{efe} sobre a magnetização \vec{M} .

A solução numérica para um problema de micromagnetismo requer uma discretização da função $\vec{M}(\vec{r})$ para estabelecer o mínimo de energia para uma determinada configuração magnética. Para isto, a magnetização dentro de cada bloco (que chamaremos de célula) é supostamente homogênea.

$$\vec{M} = \frac{M_s}{V} \sum_i \vec{m}_i V_i \quad (4.2)$$

onde V_i é o volume da célula i e V é o volume do material. A energia devida ao campo de desmagnetização resulta das cargas na superfície das células e a energia de troca é devida à mudança da direção da magnetização do eixo fácil entre elementos vizinhos. Perto de cantos e bordas das amostras, em geral, ocorrem grandes mudanças na direção da magnetização; para reduzir este efeito é necessário reduzir o tamanho das células. A célula tem que ser grande comparada à dimensão atômica e menor que as variações características de magnetização, por exemplo, comprimento de troca. A energia dipolar é calculada pelo somatório de todas as cargas nas superfícies das células, como mostra a figura (4.2). A figura (4.2) mostra uma célula retangular com magnetização homogênea no plano x, y .

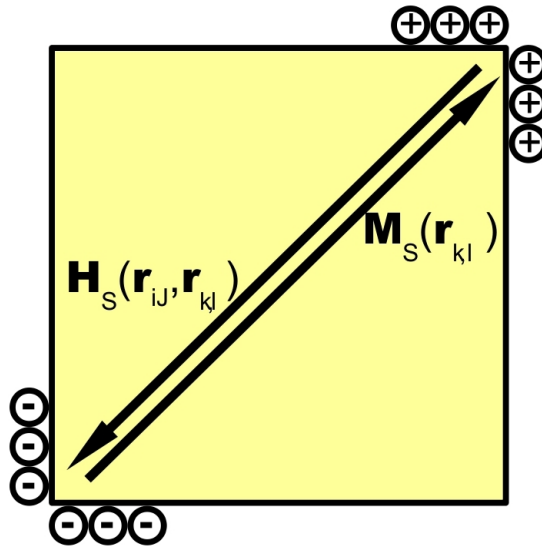


Figura 4.2: Célula quadrada de uma rede $r_{k,l}$ com magnetização homogênea. A cargas na superfície causam o campo de desmagnetização $\vec{H}_s(\vec{r}_{i,j}, \vec{r}_{k,l})$

O método iterativo é utilizado para resolver numericamente a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (2.46) e assim, determinar a configuração da magnetização local em

equilíbrio dada por:

$$\vec{m}_{i_{\text{novo}}} = \vec{m}_{i_{\text{antigo}}} - \alpha \left[\vec{m}_{i_{\text{antigo}}} \times \left(\vec{m}_{i_{\text{antigo}}} \times \vec{H}_{i_{\text{efe}}} \right) \right] \quad (4.3)$$

onde i é um índice ou conjunto de índices relativo à discretização e α está relacionado com a constante de relaxação. Esta expressão resulta de aplicar o método de Euler para resolução de equações diferenciais a uma expressão obtida a partir da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert. Partindo de uma configuração inicial de magnetização calcula-se o valor do campo efetivo H_{efe} em cada célula. Ao aplicar a equação acima apresentada a cada célula, obtém-se uma nova configuração de magnetização. Com esta nova configuração, calcula-se um novo campo efetivo, e assim por diante até se verificar a condição de convergência

$$|\vec{m}_i \times H_{i_{efe}}| < \epsilon.$$

O campo efetivo H_{efe} obtido na secção (2.2) na equação (2.38) é uma função contínua, mostrada abaixo.

$$\vec{H}_{efe} = \frac{\partial E}{\partial \vec{H}} = \frac{2}{\mu_0 M_S} \vec{\nabla} \left(A(\vec{\nabla} \vec{m}) \right) - \frac{1}{\mu_0 M_S} \frac{\partial E_A}{\partial \vec{m}} + \vec{H}_{ms} + \vec{H}_{ext} \quad (4.4)$$

Contudo, o campo efetivo tem que ser escrito em uma forma discreta. Os termos do campo efetivo discretizados são:

Energia de troca discretizada contribui para o campo na forma:

$$\vec{H}_{tr} = \frac{2A}{\Delta x^2 \cdot M_s^2} \sum_{i \in NN} \vec{M}_i \quad (4.5)$$

onde NN representa os índices de vizinhos mais próximos.

O campo efetivo devido à contribuição da energia anisotrópica é

$$\vec{H}_{ani} = \frac{2K_1}{M_s^2} \vec{u}_c (\vec{M}_i \cdot \vec{u}_c) \quad (4.6)$$

onde \vec{u}_c é a direção da anisotropia cristalina.

A energia dipolar gera o campo dipolar dado por:

$$\vec{H}_{dip} = -\frac{\Delta x^3}{4\pi\mu_0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{M_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{\vec{r}_{ij}(\vec{M}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (4.7)$$

logo, o campo efetivo total é dado por

$$\vec{H}_{efe} = \frac{2A}{\Delta x^2 \cdot M_s^2} \sum_{i \in NN} \vec{M}_i + \frac{2K_1}{M_s^2} \vec{u}_c(\vec{M}_i \cdot \vec{u}_c) - \frac{\Delta x^3}{4\pi\mu_0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{M_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{\vec{r}_{ij}(\vec{M}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] + \vec{H}_{ext} \quad (4.8)$$

4.2 Simulação de nanopontos magnéticos

O OOMMF foi utilizado para realizar as simulações desta dissertação. Simulamos nanoestruturas magnéticas de permalloy ($\text{Ni}_{0,8}\text{Fe}_{0,2}$) com a forma de disco e elipse. O permalloy é um material macio magneticamente, com uma anisotropia cristalina muito baixa; na simulação a anisotropia foi considerado nula. A célula utilizada na simulação possui um tamanho constante de $5 \times 5 \times 5$ nm, aproximadamente igual ao troca do permalloy que é de $l_{tr} = 5,2$ nm. A condição de convergência é satisfeita quando a variação do torque é menor que $|\vec{m}_i \times H_{i_{efe}}| < 10^{-6}$, ou seja, a configuração magnética está em equilíbrio quando a condição de convergência é alcançada.

Na simulação micromagnética temos que ter a preocupação com o tempo computacional e necessitamos de muita memória para realizar os cálculos. Assim, estabelecemos condições iniciais para as amostras para minimizar o tempo computacional e o uso de memória. As figuras (4.3(a)) e (4.3(b)) mostram as condições iniciais e finais dos nanopontos magnéticos em nossas simulações.

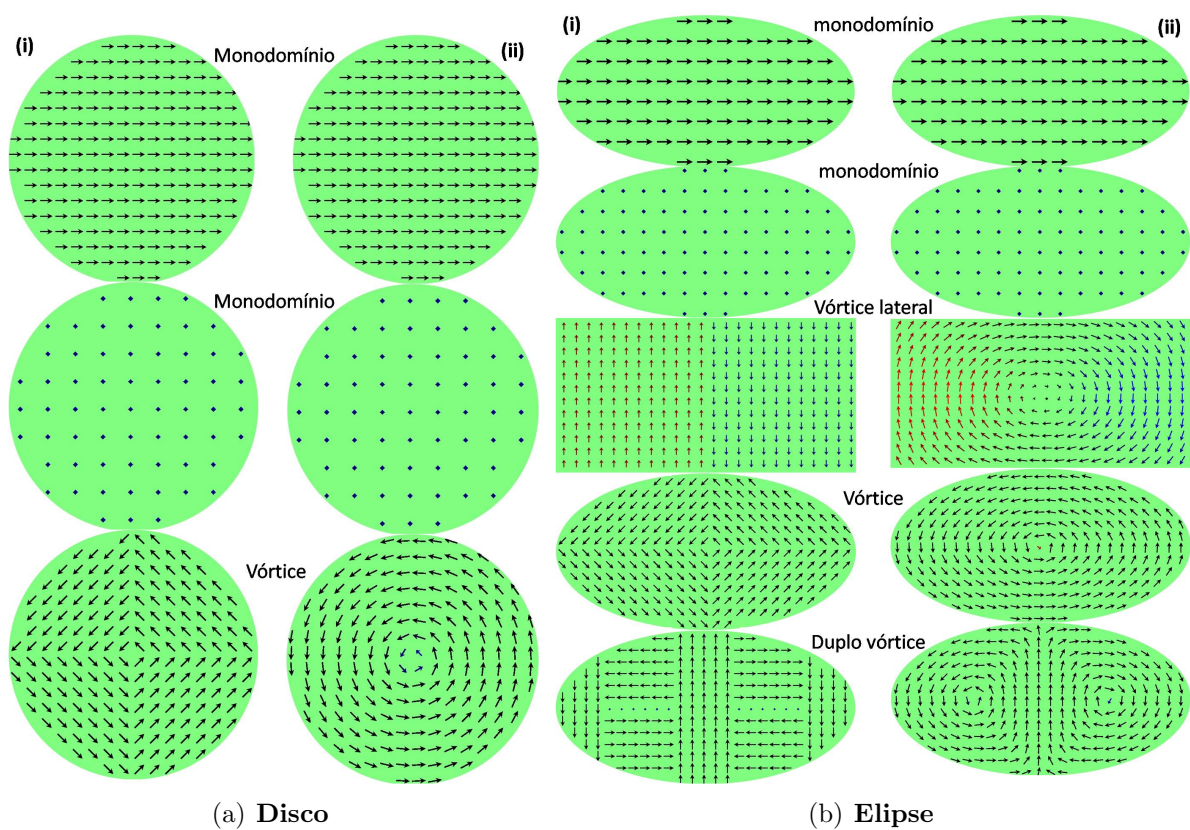


Figura 4.3: Configuração magnética de nanopontos circulares e elípticos, mostrando (i) configuração inicial e (ii) configuração final nas simulações micromagnéticas

Capítulo 5

Resultados e Discussão

Fizemos, através de simulação micromagnética, um estudo sistemático das configurações magnéticas dos nanopontos circulares e elípticos, estes últimos com uma razão entre os eixos de 2:1. As simulações foram feitas utilizando o código OOMMF 3D (ver capítulo (4)). O cálculo foi realizado para amostras de permalloy com a constante de rigidez de troca $A = 1,3 \times 10^{-11}$ J/m, a magnetização de saturação $M_s = 860 \times 10^3$ A/m e a constante de anisotropia $K = 0$, os valores típicos utilizados no programa. As células usadas para a simulação possuíam uma dimensão constante de $5 \times 5 \times 5$ nm³.

Os resultados aqui apresentados estão normalizados em termos do comprimento de troca $l_{tr} = 5,2$ nm e portanto podem ser utilizados de forma mais geral. Logo, para qualquer amostra sem anisotropia os resultados desta dissertação são válidos.

A simulação micromagnética que utiliza o método de elementos finitos possui uma limitação devido à discretização da amostra em células, com isto, podem aparecer polos descompensados nas bordas dos nanopontos, alterando assim a sua energia, mas esta limitação pode ser minimizada de duas formas:

- Usando células adaptativas, isto é, células que mudam de tamanho nas regiões onde a variação da magnetização é maior [26, 27].
- Diminuindo o tamanho das células, caso elas não sejam adaptativas.

O trabalho foi realizado para valores de células constantes, porém, a dependência dos resultados da simulação com o tamanho celular foi verificada para algumas configurações

Tabela 5.1: Diferença relativa de energia (em %) entre cálculos realizados com as células de 5 nm e 2,5 nm de aresta.

Altura	Raio 30 nm			Raio 50 nm		
	No plano	Fora do plano	Vórtice	No plano	Fora do plano	Vórtice
10	1,82	0,39	8,47	2,00	0,22	9,8
20	1,04	0,41	14,87	1,41	0,37	15,61
30	0,72		20,2	1,01		20,76
100		1,11	20,95		1,96	8,36

magnéticas, como mostrado na tabela (5.1) que mostra a diferença relativa em por cento ($E_5/E_2, 5$) entre a energia das configurações magnéticas para as células de 5 e 2,5 nm.

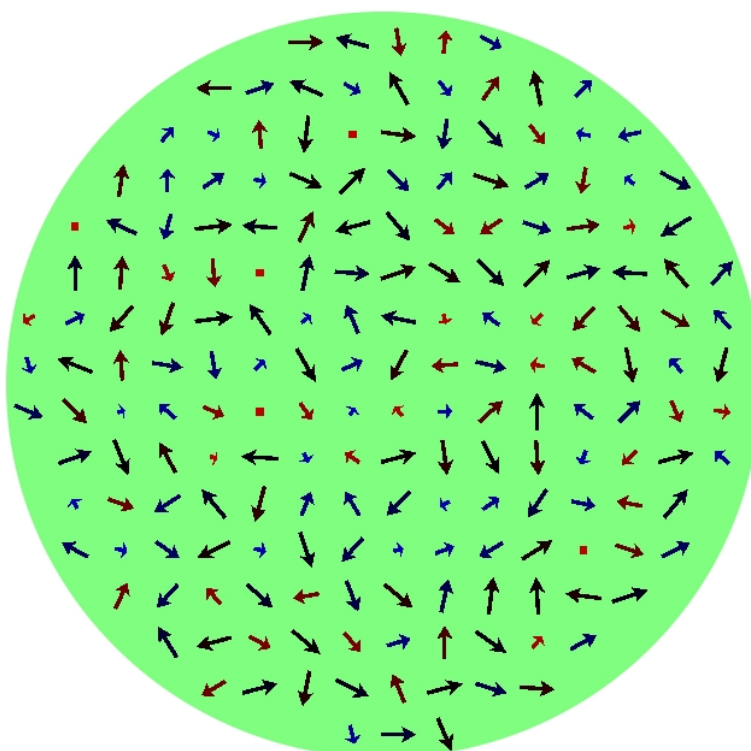


Figura 5.1: Configuração de momentos magnéticos de um disco magnético. As cores das setas indicam a componente perpendicular da magnetização.

Deste modo, os efeitos da discretização inerentes à metodologia utilizada aqui (ver [28]), são responsáveis por pequenas mudanças nos limites dos diagramas de fase de nanopontos circulares e elípticos. Isto ocorre porque a redução da dimensão da célula para as regiões onde o vórtice corresponde ao mínimo de energia ainda resulta nesta mesma configuração como mínimo; por outro lado, quando o vórtice não é um mínimo, esta variação na energia não altera a região com a escolha de um tamanho da célula menor. O efeito de discretização é desprezível para a magnetização perpendicular, e para

a magnetização no plano não passa de 2% (ver tabela 5.1).

Para algumas dimensões de nanopontos, partindo de uma configuração magnética aleatória, que é mostrada na figura (5.1), a simulação nem sempre converge para uma configuração que corresponde à energia mínima absoluta. Portanto, para conhecer a configuração de menor energia as simulações com nanopontos foram realizadas impondo as configurações de spin desejadas, e em seguida comparamos os valores de energias de cada configuração para determinar a configuração de spin correspondente ao mínimo absoluto de energia, como está mostrado na figura (5.2).

Para nanopontos de dimensões maiores a configuração inicial da magnetização influencia diretamente no tempo computacional. Por isto, impus no início do cálculo determinadas configurações magnéticas para diminuir o tempo computacional (ver seção (4.2) figura (4.3)).

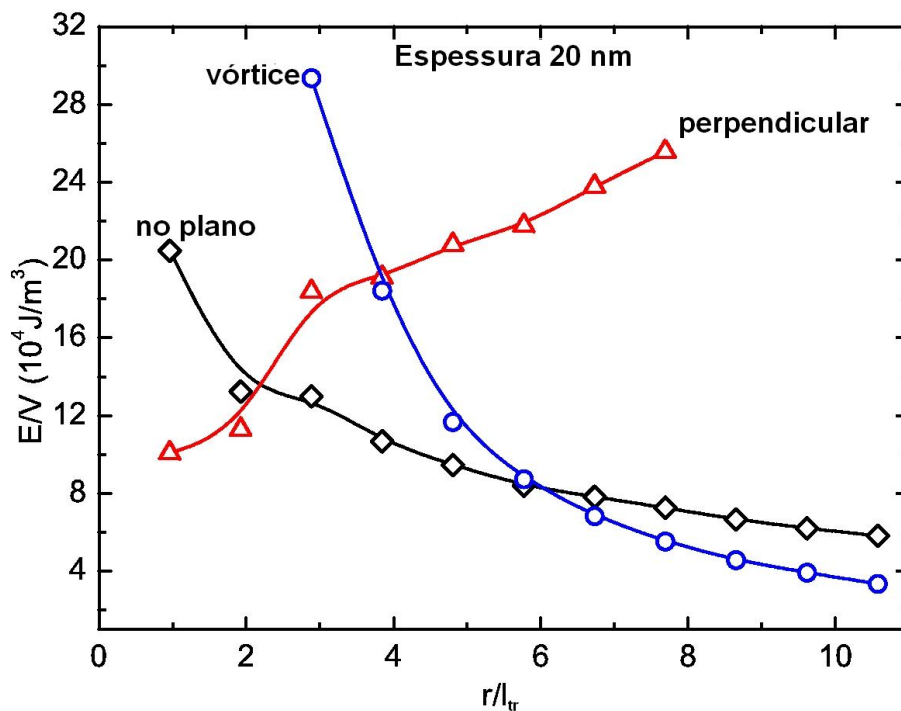


Figura 5.2: Comparação das diversas configurações magnéticas para o círculo com a espessura fixa em 20 nm, normalizado em termos do comprimento de troca l_{tr} .

5.1 Nanopontos Circulares

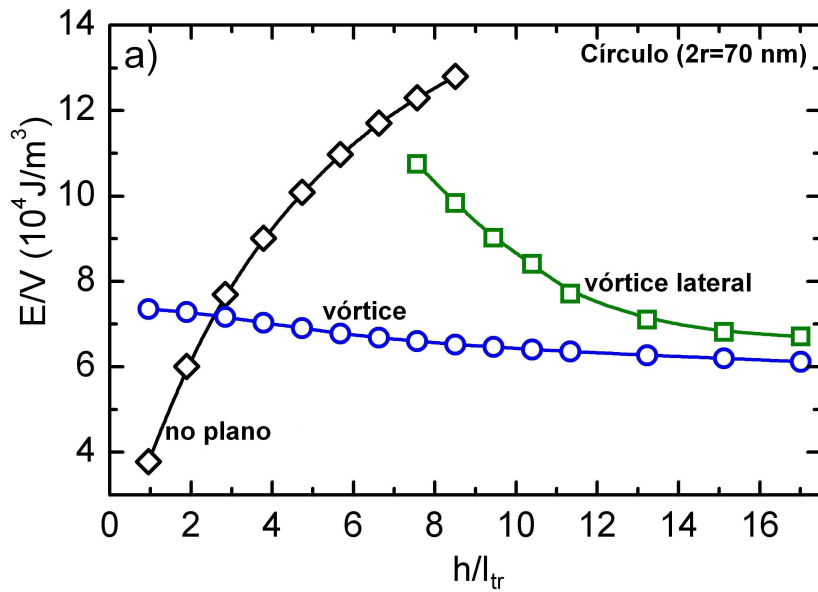
Metlov e Gusliencko [29] derivaram uma expressão para a energia total dos nanopontos circulares e para este resultado obtiveram um diagrama de fase com regiões com

magnetização no plano, fora do plano e vórtice. Scholz e colaboradores [30] calcularam a configuração magnética de equilíbrio para as mesmas dimensões dos pontos via simulação micromagnética e encontraram um diagrama que de um modo geral concorda com o diagrama de fase derivado por Metlov e Gusliencko [29]. O diagrama de fase obtido no nosso trabalho e mostrado na figura (5.4) está em concordância com os derivados pelas referências ([29, 30]).

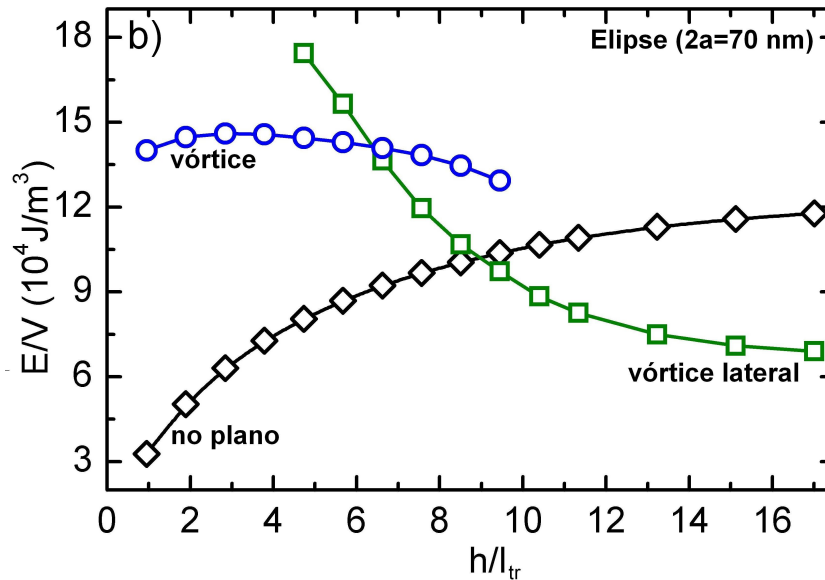
Outro estudo de simulação, desta vez utilizando uma abordagem com outra aproximação, foi feito para nanopontos circulares e elípticos por Zhang e colaboradores [31]. Nesta simulação, além dos termos de troca e dipolar os autores levaram em conta também a anisotropia cristalina. Para pontos circulares os autores encontraram neste trabalho configurações de spins paralelos, perpendiculares e vórtices. Os seus resultados para os pontos elípticos serão comentados adiante na seção (5.2).

Nossos resultados obtidos para a energia total por volume (E/V) ou densidade de energia para os nanopontos circulares estão presentes nas figuras (5.2) e (5.3(a)). A figura (5.2) mostra a variação de E/V em função do r/l_{tr} . Neste gráfico vemos as três configurações de magnetização possíveis. A variação de energia no intervalo mostrado é de quase uma ordem de grandeza, porém, na região onde a energia é mínima esta variação é menor que um fator 3. A figura (5.3(a)) mostra um gráfico que é traçado da densidade de energia (E/V) em função da espessura reduzida h/l_{tr} ; a energia mínima se concentra em uma região com relação de E/V menor do que uma ordem de grandeza.

Na figura (5.4) mostramos o diagrama de fase para nanopontos circulares magnéticos, obtido em nosso trabalho a partir da energia para diferentes configurações magnéticas via cálculo computacional. O diagrama mostra três regiões, correspondentes à magnetização no plano e fora do plano, o que significa um monodomínio e vórtice magnético. As curvas das fronteiras entre as diferentes configurações magnéticas exibidas na figura (5.4) e (5.5) foram obtidas pela intersecção das curvas de $(E/V \times h/l_{tr})$ para as diferentes configurações magnéticas, como descritas abaixo. Por exemplo, vamos tomar um disco com raio 10 nm, onde as configurações possíveis variando a alturas do disco são: monodomínio planar e monodomínio perpendicular. Então construímos o gráfico de $(E/V \times h/l_{tr})$ das



(a) Disco



(b) Elipse

Figura 5.3: Comparação das diversas configurações magnéticas para a elipse e o círculo, considerando o círculo de diâmetro de 70 nm e elipses de eixo maior de ($2a$) também de 70 nm.

duas configurações; encontramos através de um ajuste as expressões que descrevem os gráficos e as igualamos. Logo, o valor da altura onde as curvas se cruzam é a altura de separação das duas configurações. Deste modo, variamos o raio para varrer todo o diagrama do disco e assim encontramos uma curva que descreve a separação entre as regiões com diferentes configurações dos diagramas.

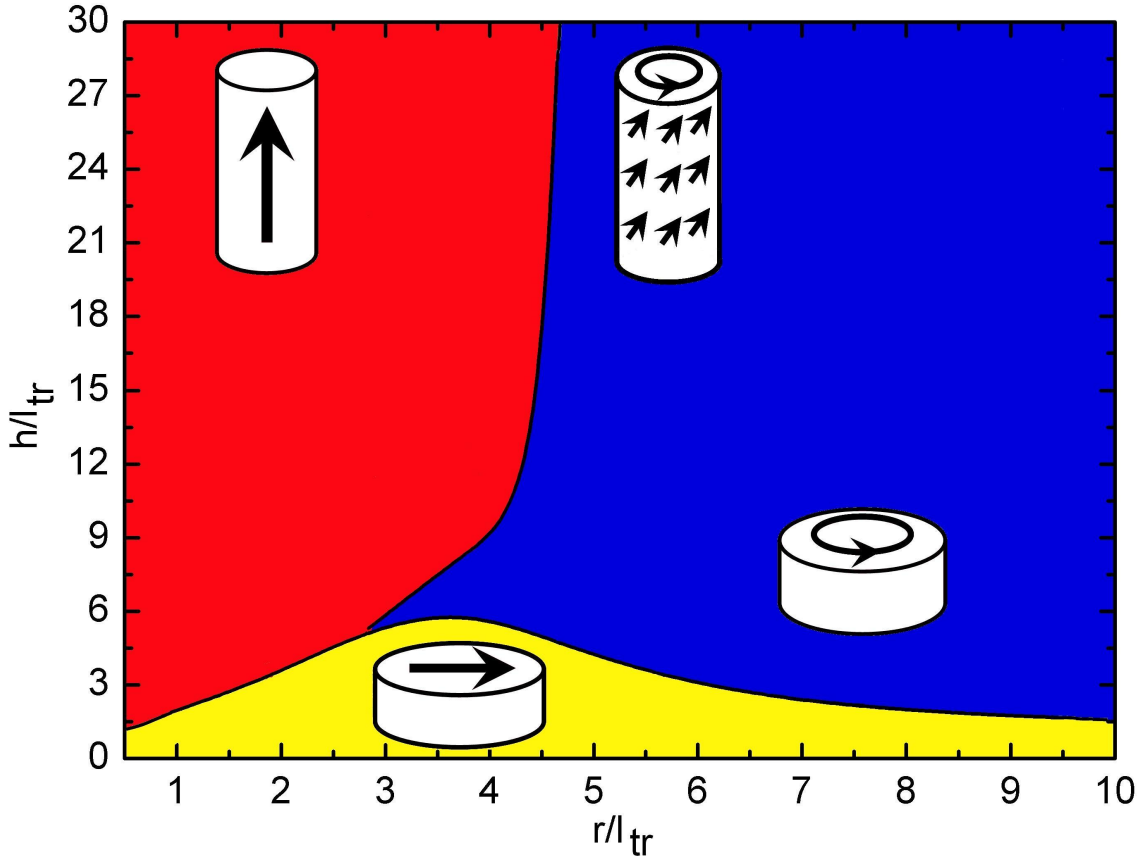


Figura 5.4: Diagrama de fase para nanopontos circulares de permalloy em função da altura normalizada h/l_{tr} e do raio normalizado r/l_{tr} (l_{tr} é o comprimento de troca), construído a partir do mínimo de energia obtido via simulação numérica.

5.2 Nanopontos Elípticos

Estudos experimentais usando arranjos de elipses micrométricas de permalloy com razão entre os comprimentos dos eixos de 2:1 mostram configurações magnéticas de único vórtice e duplo vórtice, Esta última configuração é mais provável quando o nanoponto é observado em remanência, isto é, após saturação com o campo magnético na direção do eixo maior [32].

Configurações magnéticas com um, dois e três vórtices foram observados experimentalmente com a técnica de MFM (Microscopia de Força Magnética) em elipses de permalloy com eixo maior ($2a$) de alguns microns [33]. No mesmo estudo as configurações magnéticas também foram obtidas a partir de simulações micromagnéticas com elipses de permalloy de $720 \times 720 \times 30 \text{ nm}^3$.

Trabalhos anteriores sobre pontos elípticos utilizando simulação micromagnética esboçaram

um diagrama de fase contendo três configurações: uma região com estrutura quase-monodomínio, um domínio e vórtice. O cálculo foi feito para nanopontos de espessura fixa em 30 nm [34].

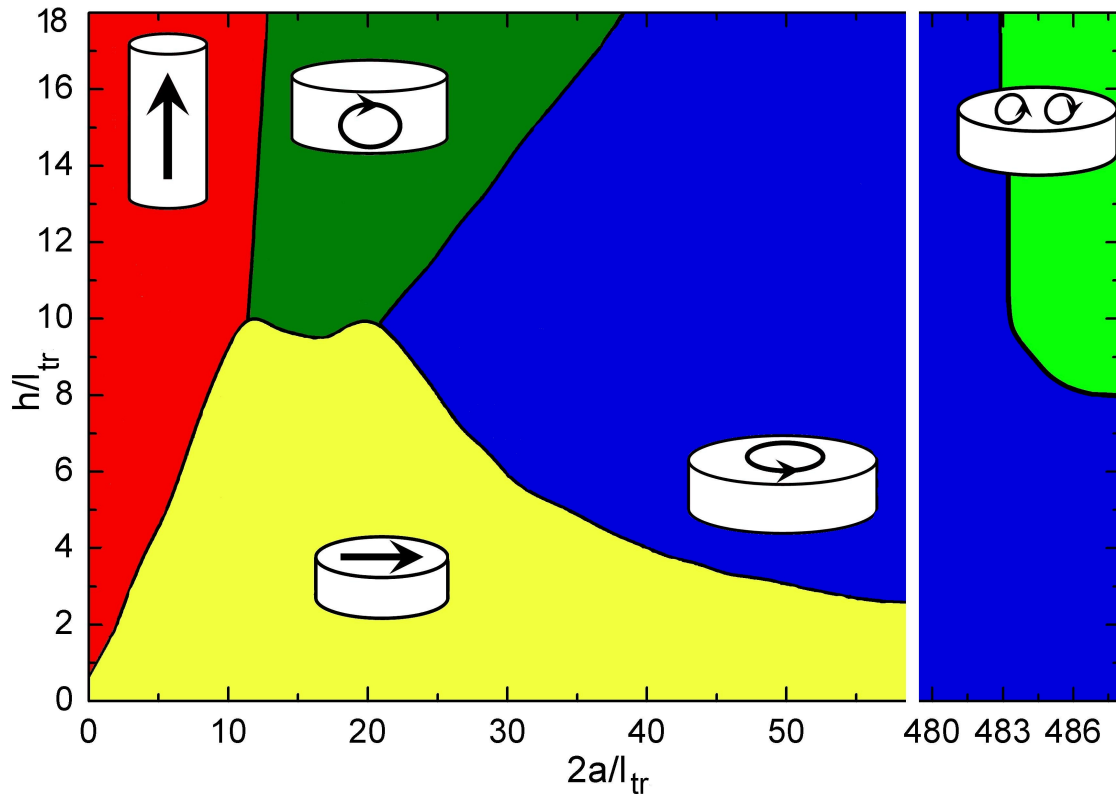


Figura 5.5: Diagrama de fase para nanopontos elípticos de permalloy, em função da altura normalizada h/l_{tr} e comprimento normalizado do eixo maior da elipse $2a/l_{tr}$, traçado a partir do mínimo de energia obtido via simulação micromagnética. As elipses em cada caso têm eixos na relação 2:1. Note-se que há uma quebra no eixo horizontal, para revelar as estruturas de dois vórtices obtidas para elipses maiores.

As curvas que obtivemos de densidade energética (E/V) versus espessura, ou altura, são mostradas, para nanopontos elípticos, na figura (5.3(b)); a altura é medida em unidades de comprimento de troca l_{tr} . A comparação entre os gráficos de nanopontos circulares e elípticos (Figs.: 5.3(a) e 5.3(b)) mostra que a configuração com vórtice lateral é um mínimo de energia para os nanopontos elípticos, mas não para os circulares. No trabalho de Hertel e colaboradores [35] usando um outro código computacional, em um único caso um vórtice lateral foi observada nas simulações para nanopontos circulares. Entretanto, sua metodologia foi diferente, envolvendo a determinação da configuração de magnetização remanente, isto é, após a saturação do nanoponto com um campo magnético. Além da metodologia diferente os nanopontos utilizados na simulação por

Hertel e colaboradores em ([35]) eram maiores que os nossos.

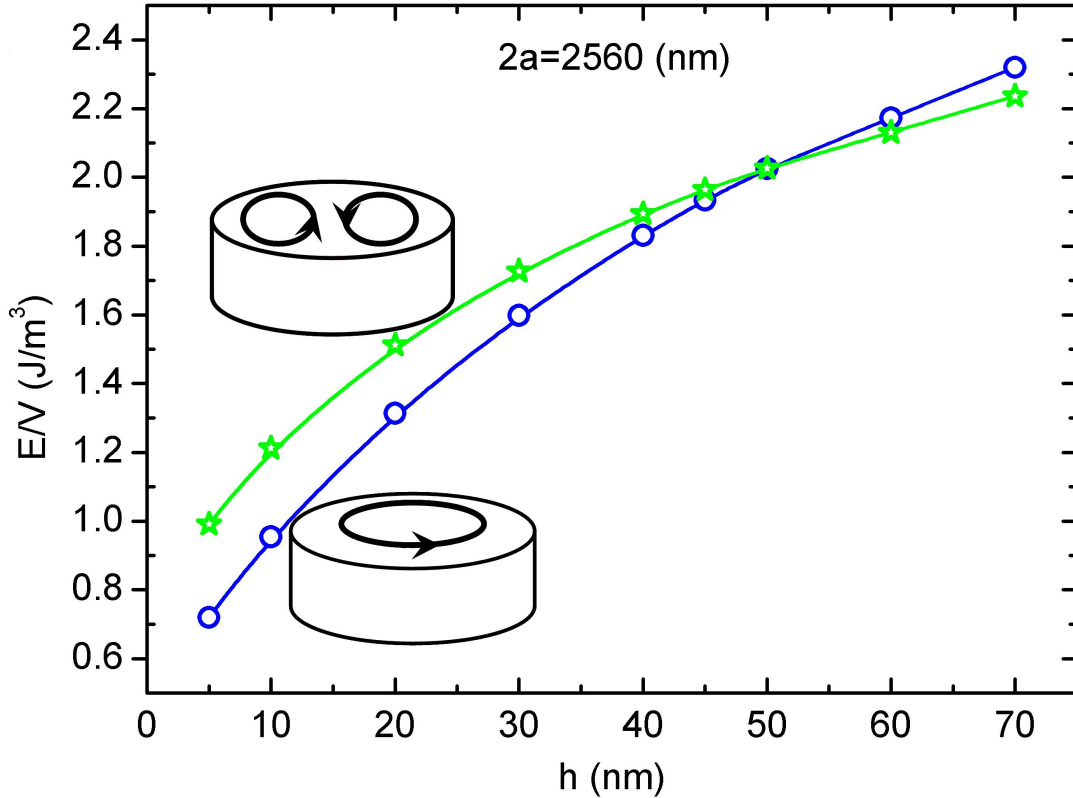


Figura 5.6: Energia por volume E/V versus espessura h de nanopontos elípticos, com eixo $2a=2560$ nm, mostrando que acima de aproximadamente $h=50$ nm, a configuração com dois vórtices tem uma menor densidade energética do que a configuração com um só vórtice, a partir da simulação micromagnética.

O diagrama de fase obtido a partir das nossas simulações micromagnéticas para nanopontos elípticos é mostrado na figura (5.5); este diagrama mostra o regime de monodomínio, com magnetização no plano e normal ao plano, como encontrado em simulações para nanopontos circulares. No entanto, tem uma estrutura mais complexa, com configurações com vórtices laterais em uma região onde a razão entre o eixo maior e a altura é próximo de 1 ($2a/h \sim 1$) e para os nanopontos maiores, aparecem configurações com mais de um vórtice (duplo vórtice) representando arranjos de menor energia.

Mostramos também, no gráfico para nanopontos elípticos, as curvas de densidade energética para configurações de um e dois vórtices magnéticos (5.6). Podemos ver a partir dessas curvas que a configuração com mais de um vórtice (duplo vórtice) corresponde a um mínimo de energia apenas para os grandes pontos elípticos considerados no presente estudo, com espessura acima de cerca de 50 nm.

Capítulo 6

Conclusões

O objetivo do nosso trabalho foi mapear as configurações magnéticas de estruturas que vão da escala nanométrica à micrométrica, isto é, construir diagramas de fase para estruturas circulares e elípticas de permalloy. Para tanto, utilizamos o programa de simulação micromagnética OOMMF, produzido pelo NIST e distribuído gratuitamente.

Verificamos que tanto a variação do raio no caso do disco, ou a dimensão dos eixos da elipse (mantendo a razão 2:1), assim como a variação da altura dos objetos influenciam as configurações magnéticas dos mesmos. Logo, para obter uma configuração magnética desejada, que corresponda ao mínimo de energia, podemos variar raio (eixos) e altura separadamente, ou ambos simultaneamente.

Desta maneira, variando separadamente raio (eixos) e altura, obtemos a curva de energia por volume versus raio reduzido ($E/V \times r/l_{tr}$) para nanopontos na forma circular. A figura (5.2) mostra como a energia depende da variação do raio para uma espessura fixa em 20 nm, assim, vemos três configurações magnética que correspondem ao mínimo de energia. A curva de energia por volume versus altura reduzida ($E/V \times h/l_{tr}$) para nanopontos na forma circular e elíptica (5.3) mostra como a energia depende da variação do espessura para um diâmetro fixo em 70 nm. Da figura (5.3) podemos ver que mesmo para um diâmetro ($2r=70$ nm) para o círculo igual ao valor do eixo maior $2a=70$ nm da elipse temos configurações magnéticas diferentes correspondendo ao mínimo de energia.

Deste modo, podemos obter as configurações que possuem mínimo de energia para determinado raio (eixo) e altura fixos. Assim, variando simultaneamente raio (eixos) e

altura conseguimos mapear as configurações magnéticas que correspondem ao mínimo de energia para os nanopontos circulares, como mostra a figura (5.4) e elípticos, que pode ser vista na figura (5.5). Para a forma circular nossos resultados estão de acordo com trabalhos anteriores realizados utilizando métodos diferentes. As configurações magnéticas encontradas neste caso são:

- **Monodomínio Planar:** esta configuração é encontrada para pequenas alturas, mas se estende em uma região considerável de valor da dimensão do disco.
- **Monodomínio Perpendicular:** paradoxalmente estas estruturas são encontradas para alturas maiores, porém estas configurações são encontradas em um região mais restrita que a do monodomínio, isto é, para raios menores que 25 nm ($\sim 5 l_{tr}$).
- **Vórtice:** configuração magnética predominante no diagrama para raios maiores que 25 nm ($\sim 5 l_{tr}$).

No caso do diagrama de fase da estrutura elíptica, existem algumas diferenças importantes em relação ao circular. Contudo, as configurações magnéticas encontradas no diagrama de fase de objetos circulares compõem o diagrama de fase de estruturas elípticas, porém o diagrama de fase de objetos elípticos fica completo seguido das seguintes configurações magnéticas:

- **Vórtice Lateral:** esta configuração é encontrada em espessura acima de 50 nm ($\sim 10 l_{tr}$) em uma região onde a razão entre o diâmetro da elipse e sua espessura é aproximadamente 1.
- **Duplo Vórtice:** esta configuração é encontrada com mínimo de energia em elipses micrométricas com eixo maior acima de $2a=2560$ nm ($\sim 483 l_{tr}$) como pode ser visto na figura (5.6)

Os diagramas de fase para os nanopontos circulares (5.4) e elípticos (5.5) de permalloy foram construídos desconsiderando a anisotropia. Como os diagramas foram construídos em função de dimensões reduzidas, isto é, dimensões divididas pelo comprimento de troca

l_{tr} , eles são aplicáveis a qualquer material, desde que se possa considerar sua anisotropia aproximadamente zero.

As investigações que permitam o mapeamento dessas diferentes configurações magnéticas são úteis no projeto de experimentos para o estudo das propriedades básicas, como também em aplicações tecnológicas dos nanopontos magnéticos. Os estudos realizados neste trabalho foram feitos para estruturas sem o campo externo aplicado. Nossa intenção para trabalhos futuros é o estudos da dinâmica dessas novas configurações magnéticas.

Apêndice A

Cálculo da Integral de Troca

A teoria do campo molecular de Weiss explica satisfatoriamente o ferromagnetismo de um ponto de vista qualitativo. Porém, essa teoria não trata a origem desse campo molecular, simplesmente supõe sua existência. A origem física do ordenamento ferromagnético veio a ser elucidada a partir de 1928, quando Heisenberg mostrou que a chamada interação de troca entre elétrons estava por trás do ferromagnetismo.

A interação de troca resulta de uma modificação na interação coulombiana entre os elétrons devido ao fato de eles serem férmions, e serem obedientes à simetrização.

As possibilidades de escrever um estado anti-simétrico de spins de elétrons não interagentes, são

$$|\Psi_{\text{singlete}}(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2)\rangle = |\Phi_s \otimes X_{\text{singlete}}(\sigma_1, \sigma_2)\rangle \quad (\text{A.1})$$

$$|\Psi_{\text{triplete}}(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2)\rangle = |\Phi_A \otimes X_{\text{triplete}}(\sigma_1, \sigma_2)\rangle \quad (\text{A.2})$$

A anti-simetrização dos estados $|\varphi_a\rangle$ e $|\varphi_b\rangle$ que consideraremos ortogonais, nos dá

$$|\Psi_{s_A}(r_1; r_2)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\varphi_a(r_1); \varphi_a(r_2)\rangle \pm |\varphi_a(r_1); \varphi_a(r_2)\rangle] \quad (\text{A.3})$$

Base de autovetores S_{1Z} e S_{2Z} , $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ e autovalores $\hbar/2$ e $-\hbar/2$ e

$$|X(\sigma_1; \sigma_2)\rangle = |1 : \chi_a; 2 : \chi_b\rangle = |\chi_a \chi_b\rangle \quad (\text{A.4})$$

os estados simétricos ou tripleto são:

$$|X_{\text{tripleto}}(\sigma_1; \sigma_2)\rangle = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \sqrt{\frac{1}{2}}\{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\} \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

onde $S = S_1 + S_2$ tem autovetor S_1 e S_2 tem autovalores $m = 1, 0, -1$

o estado anti-simétrico, singleto é

$$|X_{\text{singleto}}(\sigma_1; \sigma_2)\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\} \quad (\text{A.6})$$

com $s = m = 0$

Ao aproximar os dois átomos os elétrons irão interagir através da repulsão coulombiana, dada por

$$V_{12} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (\text{A.7})$$

o hamiltoniano do sistema fica:

$$\mathcal{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mathcal{H}(\vec{r}_1) + \mathcal{H}(\vec{r}_2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_{12}|} \quad (\text{A.8})$$

onde $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ e o hamiltoniano para o elétron 1 é

$$\mathcal{H}(\vec{r}_1) = \frac{\hbar}{2m_e} \nabla_1^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_{12}|} \quad (\text{A.9})$$

O hamiltoniano \mathcal{H} é independente dos spins. Então, os valores para as equações (A.1) e (A.2) são

$$\begin{aligned} E_{\text{singleto}} = \langle \mathcal{H} \rangle &= \langle \Psi_{\text{singleto}} | \mathcal{H} | \Psi_{\text{singleto}} \rangle \\ &= \langle \Phi_S | \mathcal{H} | \Phi_S \rangle \langle \Psi_{\text{singleto}} | \Psi_{\text{singleto}} \rangle \\ &= \langle \Phi_S | \mathcal{H} | \Phi_S \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

e para o tripleto, temos

$$\begin{aligned}
E_{\text{tripleto}} = \langle \mathcal{H} \rangle &= \langle \Psi_{\text{tripleto}} | \mathcal{H} | \Psi_{\text{tripleto}} \rangle \\
&= \langle \Phi_A | \mathcal{H} | \Phi_A \rangle \langle \Psi_{\text{tripleto}} | \Psi_{\text{tripleto}} \rangle \\
&= \langle \Phi_A | \mathcal{H} | \Phi_A \rangle
\end{aligned} \tag{A.11}$$

Portanto, \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 não são afetados com a anti-simetrização, pois só depende de uma coordenada, deste modo apenas a interação coulombiana vai ser afetada, $\vec{r}_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$. Logo, a diferença de energia dos estados singleto e tripleto é dada por

$$\begin{aligned}
\mathcal{J} &= E_{\text{singleto}} - E_{\text{tripleto}} \\
&= \langle \Phi_S | \mathcal{H} | \Phi_S \rangle - \langle \Phi_A | \mathcal{H} | \Phi_A \rangle \\
&= \langle \Phi_S | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} | \Phi_S \rangle - \langle \Phi_A | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} | \Phi_A \rangle
\end{aligned} \tag{A.12}$$

da equação (A.3), temos

$$\begin{aligned}
&\langle \Phi_{SA} | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} | \Phi_{SA} \rangle = \\
&= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \left[\langle \varphi_a \varphi_b | \frac{1}{r_{12}} | \varphi_a \varphi_b \rangle \pm 2 \langle \varphi_a \varphi_b | \frac{1}{r_{12}} | \varphi_a \varphi_b \rangle + \langle \varphi_b \varphi_a | \frac{1}{r_{12}} | \varphi_b \varphi_a \rangle \right]
\end{aligned} \tag{A.13}$$

para o singleto, temos,

$$\begin{aligned}
&\langle \Phi_{SA} | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} | \Phi_{SA} \rangle = \\
&= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \left[\langle \varphi_a \varphi_b | \frac{1}{r_{12}} | \varphi_a \varphi_b \rangle + \langle \varphi_b \varphi_a | \frac{1}{r_{12}} | \varphi_b \varphi_a \rangle - 2 \langle \varphi_a \varphi_b | \frac{1}{r_{12}} | \varphi_a \varphi_b \rangle \right] = 0
\end{aligned} \tag{A.14}$$

Logo, para um tripleto temos,

$$\langle \Phi_{SA} | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} | \Phi_{SA} \rangle = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0} \left[\langle \varphi_a \varphi_b | \frac{1}{r_{12}} | \varphi_a \varphi_b \rangle \right] \tag{A.15}$$

daí, a partir da equação (A.15) podemos definir uma integral de troca como

$$\begin{aligned}\mathcal{J} &= \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0} \left[\langle \varphi_a \varphi_b | \frac{1}{r_{12}} | \varphi_a \varphi_b \rangle \right] \\ &= \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0} \int \varphi_a^* \varphi_b^* \frac{1}{r_{12}} \varphi_a \varphi_b dr_1 dr_2\end{aligned}\tag{A.16}$$

Referências Bibliográficas

- [1] Johannes Eisenmenger e Ivan K. Schuller. Magnetic nanostructures: Overcoming thermal fluctuations. *Nature Materials*, 2(7):437–438, 2003. [xv](#), [26](#)
- [2] T. Shinjo; T. Okuno; R. Hassdorf; K. Shigeto e T. Ono. Magnetic Vortex Core Observation in Circular Dots of Permalloy. *Science*, 289(5481):930–932, 2000. [xv](#), [3](#), [33](#), [34](#)
- [3] Stellan Bohlens; Benjamin Krüger; André Drews; Markus Bolte; Guido Meier e Daniela Pfannkuche. Current controlled random-access memory based on magnetic vortex handedness. *Applied Physics Letters*, 93(14):142508, 2008. [xvi](#), [3](#), [35](#)
- [4] Helmut Kronmüller e Manfred Fähnle. *Micromagnetism and the Microstructure of Ferromagnetic Solids*. Cambridge University Press, New York, first edition, 2003. [2](#), [5](#), [6](#), [12](#), [15](#), [38](#)
- [5] L. Landau e E. Lifshitz. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. *Physics Z. Sowjetunion*, 8:153–169, 1935. [2](#)
- [6] R. Becker e W. Döring. *Ferromagnetismus*. Springer, Berlin, first edition, 1939. [2](#)
- [7] Alex Hubert e Rudolf Schäfer. *Magnetic Domains: The Analysis of Magnetic Microstructures*. Springer, New York, third edition, 2009. [2](#), [14](#), [15](#), [20](#), [24](#), [34](#)
- [8] S.-B. Choe; Y. Acremann; A. Scholl; A. Bauer; A. Doran; J. Stohr e H. A. Padmore. Vortex Core-Driven Magnetization Dynamics. *Science*, 304(5669):420–422, 2004. [3](#)

- [9] R. P. Cowburn; D. K. Koltsov; A. O. Adeyeye; M. E. Welland e D. M. Tricker. Single-domain circular nanomagnets. *Physical Review Letters*, 83(5):1042–1045, August 1999. [3](#)
- [10] S.-K. Kim; K.-S. Lee; Y.-S. Yu e Y.-S. Choi. Reliable low-power control of ultrafast vortex-core switching with the selectivity in an array of vortex states by in-plane circular-rotational magnetic fields and spin-polarized currents. *Applied Physics Letters*, 92(2):022509, 2008. [3](#)
- [11] Kristen S. Buchanan; Pierre E. Roy; Marcos Grimsditch; Frank Y. Fradin; Konstantin Yu Guslienko; Sam D. Bader e Valentyn Novosad. Magnetic vortex oscillator driven by d.c. spin-polarized current. *Nature Physics*, 3(7):498–503, July 2007. [3](#)
- [12] R. Lehndorff; D. E. Bürgler; S. Gliga; R. Hertel; P. Grünberg; C. M. Schneider e Z. Celinski. Magnetization dynamics in spin torque nano-oscillators: Vortex state versus uniform state. *Physical Review B*, 80(5):054412, 2009. [3](#)
- [13] M. J. Donahue; D. G. Porter e National Institute of Standards and Technology (U.S.). *OOMMF user's guide*. <http://math.nist.gov/oommf/>. [4](#), [21](#), [37](#)
- [14] Alberto P. Guimarães. *Principles of Nanomagnetism*. Springer, Berlin, first edition, 2009. [5](#), [11](#), [14](#), [15](#), [17](#), [24](#), [25](#)
- [15] Giorgio Bertotti. *Hysteresis in magnetism*. Academic Press, New York, first edition, 1998. [5](#), [30](#)
- [16] Alberto P. Guimarães. *Magnetismo e Ressonância Magnética em Sólidos*. Editora Edusp, primeira edição, São Paulo, 2009. [6](#), [10](#)
- [17] Stephen Blundell. *Magnetism in Condensed Matter*. Oxford, first edition, 2001. [7](#)
- [18] Ralph Skomski e Jian Zhou. *Advanced Magnetic Nanostructures*. Springer, New York, 2006. [12](#)
- [19] Amikam Aharoni. *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*. Oxford University Press, New York, second edition, 2000. [14](#), [15](#), [17](#)

- [20] J. Stöhr e H.C. Siegmann. *Magnetism: From Fundamentals to Nanoscale Dynamics*. Springer, New York, third edition, 2006. [19](#)
- [21] Mathias Getzlaff. *Fundamentals of Magnetism*. Springer, New York, 2008. [24](#), [28](#), [29](#)
- [22] C. P. Bean e J. D. Livingston. Superparamagnetism. *Journal of Applied Physics*, 30(4):S120–S129, 1959. [24](#)
- [23] J. Raabe; R. Pulwey; R. Sattler; T. Schweinböck; J. Zweck e D. Weiss. Magnetization pattern of ferromagnetic nanodisks. *Journal of Applied Physics*, 88(7):4437–4439, 2000. [34](#)
- [24] E. R. P. Novais e A. P. Guimaraes. Phase diagram of magnetic configurations for soft magnetic nanodots of circular and elliptical shape obtained by micromagnetic simulation. *arXiv.org:0909.5686*. [36](#)
- [25] Josef Fidler e Thomas Schrefl. Micromagnetic modelling - the current state of the art. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 33(15):R135–R156, 2000. [37](#)
- [26] R. Hertel e H. Kronmuller. Adaptive finite element mesh refinement techniques in three-dimensional micromagnetic modeling. *Magnetics, IEEE Transactions on*, 34(6):3922–3930, Nov 1998. [43](#)
- [27] D. Lewis e E. Della Torre. Migrating mesh micromagnetic model. *Magnetics, IEEE Transactions on*, 33(5):4161–4163, Sep 1997. [43](#)
- [28] P.-O. Jubert e R. Allenspach. Analytical approach to the single-domain-to-vortex transition in small magnetic disks. *Physical Review B*, 70(14):144402, outubro 2004. [44](#)
- [29] Konstantin L. Metlov e Konstantin Yu. Guslienko. Stability of magnetic vortex in soft magnetic nano-sized circular cylinder. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 242-245(Part 2):1015 – 1017, 2002. [45](#), [46](#)

- [30] Transition from single-domain to vortex state in soft magnetic cylindrical nanodots. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 266(1-2):155 – 163, 2003. Proceedings of the 4th International Conference on Fine Particle Magnetism (ICFPM). [46](#)
- [31] Wen Zhang; Rohit Singh; Noah Bray-Ali e Stephan Haas. Scaling analysis and application: Phase diagram of magnetic nanorings and elliptical nanoparticles. *Physical Review B*, 77(14):144428, 2008. [46](#)
- [32] Kristen S. Buchanan; Pierre E. Roy; Marcos Grimsditch; Frank Y. Fradin; Konstantin Yu Guslienko; Sam D. Bader e Valentyn Novosad. Soliton-pair dynamics in patterned ferromagnetic ellipses. *Nature Physics*, 1(3):172–176, december 2005. [48](#)
- [33] M.-F. Lai; Z.-H. Wei; J. C. Wu; W. Z. Shieh; C. R. Chang e J. Guo. Field evolution of multivortex and cross-tie states in permalloy thin films. *10th Joint MMM/Intermag Conference*, 101(9):09N111, 2007. [48](#)
- [34] Nonuniform magnetization structures in thin soft type ferromagnetic elements of elliptical shape. *Journal of Applied Physics*, 89(11):7591–7593, 2001. [49](#)
- [35] J. K. Ha; R. Hertel e J. Kirschner. Micromagnetic study of magnetic configurations in submicron permalloy disks. *Physical Review B*, 67(22):224432, Jun 2003. [49](#), [50](#)