

Tese de
Mestrado

Portas Lógicas Magnéticas

Tiago Siman Machado

Rio de Janeiro, Fevereiro de 2006.
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Resumo

A atual tecnologia de circuitos usados em microeletrônica é baseada no chaveamento ("on/off") da corrente elétrica. Novas idéias têm sido propostas onde não somente a carga mas também o spin do elétron tem papel relevante na realização de operações lógicas, o que é modernamente chamado de spintrônica. Mais recentemente, uma idéia ainda mais sofisticada foi proposta, consta de construção de portas lógicas com uso de nanoelementos magnéticos.

A porta lógica é construída dispondo espacialmente pequenos elementos magnéticos na forma de monodomínios que interagem entre si através da interação dipolar. Alguns elementos atuam como entrada da porta lógica e um atua como saída ou resposta. A interação dipolar aliada a disposição dos elementos tem o papel de gerar a função da porta lógica. Inspirados em uma estrutura do tipo autômato celular e com auxílio do modelo de Ising e do método Monte Carlo, o funcionamento de portas lógicas NAND e NOR são simuladas.

Outra estrutura utilizada foi baseada em filmes contínuos com uma dada geometria. Com o uso do modelo XY e do método Monte Carlo foi calculada a propagação de paredes de domínio ao longo da estrutura. Foi simulado o funcionamento de tais estruturas como porta lógica NOT e como um diodo.

Abstract

The current technology of circuits used in microelectronics is based on the switching (on/off) of the electric current. New ideas have been proposed where not only the charge but the electronic spin has a relevant role on the logical operations, what is modernly called as spintronic. More recently, an idea still more sophisticated was proposed, it consists on the construction of logic gates with the use of magnetic nanoelements.

The logic gate is constructed placing small magnetic elements in the form of nanodomains that interact between them through dipolar interaction. Some elements act as input of the logic gate and one acts as output. In conjunction with the dipolar interaction and disposing the elements in a given form, the function of the logic gate is generated.

Inspired in a cellular automata structure, using the Ising model and the Monte Carlo method, the functioning of logic gates NAND and NOR were simulated. Another studied structure was based on continuous films with a given geometry. Using the XY model and the method Monte Carlo, the propagation of domain walls on the structure was calculated. The functioning of such structures was simulated as the logic gate NOT and as a diode.

Aos meu país

Agradecimentos

Agradeço em primeiro lugar a Deus.

Agradeço ao Prof. Luiz Carlos Sampaio por me orientar.

Um agradecimento especial para Natália, minha namorada.

Agradeço aos amigos que ajudaram direta ou indiretamente auxiliando nesse trabalho de tese.

E agradeço a Capes pelo apoio financeiro durante esse trabalho de mestrado.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Nanomagnetismo	7
2.1	Introdução	7
2.2	Energia Zeeman	8
2.3	Interação Dipolo-Dipolo	9
2.4	Energia de Troca	10
2.5	Energia de Anisotropia	11
2.6	Superparamagnetismo	13
3	Operações Lógicas	23
3.1	Introdução	23
3.2	Portas Lógicas	26
4	Autômato Celular	31
4.1	Introdução	31
4.2	Autômato Celular	33
4.3	Autômato Celular Quântico	34
4.3.1	Pontos Quânticos	34

4.3.2	EQCA - Autômato Celular Eletrônico Quântico	34
4.4	MQCA - Autômato Celular Magnético Quântico	37
4.5	Porta Lógica Universal MQCA	43
4.6	Método Monte Carlo	46
4.6.1	Introdução	47
4.6.2	Equação Mestra	47
4.6.3	Método Monte Carlo	48
5	Resultados	51
5.1	Introdução	51
5.2	Transporte de Informação	55
5.3	Confiabilidade	57
5.4	Portas Lógicas NAND e NOR	60
5.4.1	Confiabilidade	63
5.5	Porta Lógica NOT	65
5.6	Diodo	70
5.7	Outras Portas	72
5.8	Sumário	74
6		77
6.1	Conclusão	77
A		79
A.1	Interação Dipolo Magnético Campo Magnético	79

A.2	Campo Magnético de um Dipolo	82
A.3	Interação Dipolo-Dipolo	84
A.3.1	$\Delta E_{dipolo\ dipolo}$	85
A.4	Interação de Troca	86
A.4.1	ΔE_{troca}	86

Lista de Figuras

2.1	Magnetização em função do campo magnético aplicado na amostra. A saturação é alcançada mais rápido dependendo da orientação da amostra(2)	12
2.2	Figura mostrando a direção de cada momento. Na figura superior os momentos estão na horizontal devido ao produto escalar de \vec{m}_i e $r_{i,j}$. Na figura inferior é mostrado um alinhamento para $J > 0$ na energia de troca. Em termos de energia as duas figuras estão corretas.	13
2.3	A figura mostra o alinhamento dos momentos magnéticos, setas vermelhas, do material para minimizar a energia magnetostática. O alinhamento ao longo do eixo maior (também chamado de eixo fácil) corresponde ao mínimo de energia e além de corresponder ao mínimo de polos.	14
2.4	Figura mostrando os mínimos de energia magnetostática para $\Theta = \pm 90$ e máximo em $\Theta = 0$. Os estados $\Theta = \pm 90$ estão separados por uma barreira de energia potencial V_0 que corresponde a altura dela	15
2.5	Material superparamagnético na forma circular. O momento magnético oscila apontando para todas as direções. Com um campo magnético externo o momento passa a ter a mesma direção que o campo.	16
2.6	Curva de magnetização por campo magnético externo aplicado em um material superparamagnético(1).	17

2.7	Campo B_{ex} usado para inverter a direção de magnetização do material. Onde B_{di} é o campo magnético interno criado pelo material. Quando $\vec{B}_{ex} = -\vec{B}_{di}$ definimos o campo externo como campo de coercividade.	18
2.8	Gráfico de magnetização M por campo magnético externo. Quando a magnetização é nula definimos o campo aplicado no material como campo de coercividade. Quando o campo é nulo a magnetização resultante é definida como magnetização remanescente $B_{ex}(1)(2)$	19
2.9	Figura mostrando vários domínios magnéticos.	20
2.10	Domínios magnéticos de um material. As setas representam a direção da magnetização no domínio específico. As linhas brancas representam as paredes de domínios. Mesmo que o material tenha vários domínios sua magnetização é diferente de zero.	20
2.11	Gráfico coersividade em função do tamanho da partícula. Mostrando a ligação de um material sem estruturas de domínios com material com estrutura de domínio. M-D - multi-domínios, S-D - único domínio e SP - superparamagnético(2)(1).	21
3.1	Dispositivo lógico simplificado	24
3.2	Figura mostrando dois mínimos de energia associados as direções $\Theta \pm 90^\circ$. Onde podemos ver dois estados lógicos codificado como 1 e 0 com as direções de magnetização $\Theta \pm 90^\circ$, respectivamente.	25
3.3	Energia em função do ângulo entre a magnetização e para vários módulos de campo magnético	26

3.4	Porta Lógica AND	27
3.5	Porta lógica OR	28
3.6	Porta lógica NOT	28
3.7	Figura representando uma operação de soma que utiliza as portas lógicas AND, OR e NOR. Os números 1 e 0 são somados.	28
4.1	Devido a força Coulombiana os elétrons ficaram em vértices opostos afim de minimizar a energia potencial. Os vértices mais escuros representam a presença do elétron.	35
4.2	Duas estruturas EQCA. Figura da superior tem a propriedade de transportar informação e inferior inverte o sinal que estava sendo transportado.	36
4.3	Um possível arranjo para porta lógica universal. A funcionalidade dessa porta depende do estado, fixado, na célula C. Podemos ver isso na tabela 4.3.2.	36
4.4	Arranjo de partículas magnéticas realizados por Cowburn e Welland para realizar operações lógicas. A estrutura consiste de 69 pontos magnéticos, formando uma cadeia, acoplados por interação magnetostática. Um ponto magnético alongado, entrada, é colocado numa das extremidade para poder inverter a direção de magnetização da cadeia	38
4.5	Para magnetização resultante para direita associamos o dígito 1 e direção contrária o dígito 0	39

4.6	A figura superior mostra a oscilação do campo magnético aplicado na estrutura. Na figura inferior temos o sinal de saída da cadeia de partículas magnéticas mostrado na figura 4.4. Podemos concluir que o estado da cadeia está preso(6).	40
4.7	Figura superior mostra o campo oscilante aplicado na cadeia. Figura inferior mostra a resposta da cadeia quando a estrutura é inicializada no estado 1.(6)	41
4.8	Movimento do soliton na estrutura. Análogo à parede de domínio.	42
4.9	Interação entre dois pontos magnéticos. A interação gera um ordenamento anti-ferromagnético.	43
4.10	Figura superior mostra uma imagem de microscopia de força atômica e a figura inferior mostra uma imagem por MFM de uma cadeia de pontos magnéticos de dimensões 70, 135 e 30 nm separados por 30 nm. A imagem mostra o alinhamento anti-ferromagnético(13).	44
4.11	Organização espacial proposta por Imre e colaboradores para uma porta lógica universal magnética.	45
4.12	Imagem MFM do funcionamento da porta lógica universal proposta por Imre e colaboradores. A até D um campo magnético aplicado horizontalmente para direita e E até H é aplicado para mudar as entradas(13).	46
5.1	O mínimo de energia ocorre com dois ordenamentos. Para $J > 0$, os spins estão paralelos, chamado de fase ferromagnética. Para $J < 0$, eles estão antiparalelos, denominado de fase anti-ferromagnética.	53

5.2	Estrutura proposta para uma material que poderia ser utilizado para construir uma porta lógica	54
5.3	Interação entre dois materiais apresentados na figura 5.2. A interação gera um ordenamento anti-ferromagnético.	54
5.4	Transporte da informação +1 do primeiro spin numa rede de spin 1D. Figura esquerda corresponde ao estado inicial e direito ao final no mínimo de energia do sistema.	56
5.5	Infomação -1 transportada numa rede 1D de spin. Lado esquerdo representa o estado inicial e direito o estado final do sistema que corresponde ao mínimo de energia.	56
5.6	Gráfico de energia por tempo de Monte Carlo, mostrando que o sistema evolui para o mínimo de energia após mudar o primeiro spin.	57
5.7	Figura superior esquerda corresponde a configuração inicial. Superior a direita representa a primeira evolução do sistema para o mínimo de energia. Inferior a esquerda mostra a mudança do primeiro spin com o sistema no mínimo de energia. Inferior a direita é a nova configuração do sistema no mínimo de energia novamente.	58
5.8	Gráfico de Confibilidade por temteratura para condições iniciais aleatórias. .	59
5.9	Gráfico realizado a partir da equação 5.3. Onde as condição iniciais são: aleatórias, mesma direção para todos os spins e estado inicial de uma nova rodada corresponde ao estado final da última rodada.	60
5.10	Porta lógica universal realizada pelo método Monte Carlo. Onde a bola azul indica bit +1 e a vermelha bit -1.	61

5.11	Figura da esquerda representa uma porta lógica NOR e da direita uma NAND.	62
5.12	Gráfico de energia em função do número de passos Monte Carlo. A esquerda para a porta lógica NOR com 6 momentos e a direita com 2500 momentos.	63
5.13	Os gráficos acima mostram a grau de confiança da porta NOR. A diferença entre eles é o número de passos Monte Carlo que para o gráfico da direita é maior.	64
5.14	O gráfico de Média Confibibilidade por (Número de passos Monte Carlo) ⁻¹ . O gráfico a esquerda é o resultado de nossas simulações. Direita mostramos um resultado encontrado na literatura (8).	64
5.15	Gráfico de média Confibiliadde por (Passo de Monte Carlo) ⁻¹ . K apresenta o número de vizinhos interagentes	65
5.16	Esquema de uma porta lógica NOT. Figura A é a imagem de um anel magnético incluindo a junção NOT. H_x e H_y são as componentes do campo magnético utilizado para mover a parede de domínio (3).	66
5.17	Estrutura da porta lógica NOT simulada. As três primeira filas a esquerda foram utilizadas como entrada.	67
5.18	Figura mostrando porta lógica NOT. A esquerda temos a configuração inicial onde na média os momentos estão apontando para cima e a direita a configuração depois que o sistema alcançou o mínimo de energia.	68
5.19	Início da simulação do função lógica NOT.	68
5.20	69
5.21	69

5.22	Figura retirada de um artigo(17) na qual baseamos nossa simulação do diodo de parede de domínio.	70
5.23	Figura representando um diodo de parede de domínio. A estrutura está inicialmente com os momentos apontando para direita, em seguida as três fila de momentos são invertidas. Isso cria um parede de domínio.	71
5.24	A figura a esquerda mostra uma configuração do sistema antes dele assumir um mínimo de energia. A direita mostra o sistema nessa mínimo. Vemos que a parede de domínio propagou em todo a estrutura.	71
5.25	Complemento se a saída, D, for o último elemento. Transfer se a saída, D, for o penúltimo elemento.	73
5.26	Implication se a saída, D, for o último elemento. Inhibition se a saída, D, for o penúltimo elemento.	74
A.1	Figura exemplificando o alinhamento do dipolo magnético	80
A.2	Representação de um material magnético. Os números 1, 2, 3 e n representam momentos magnéticos desse material e r' e r'' são as distâncias entre os momentos 1 e 2 e 1 e 3 respectivamente.	85
A.3	Rede de spin unidimensional. O spin maior será modificado gerando uma variação na energia do sistema.	86
A.4	Rede de 100 spins. O spin maior será modificado na evolução do sistema para uma mínimo de energia utilizando o metodo de Monte Carlo.	88

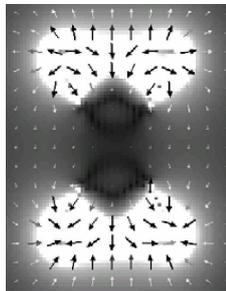
A.5 Rede de 400 spins. O spin em vermelho indica o spin que será modificado no passo de Monte Carlo. A energia do sistema é dada pelo hamiltoniano do modelo XY. 89

Lista de Tabelas

3.1	Tabela Verdade.	27
3.2	Tabela Verdade AND.	27
3.3	Tabela Verdade OR.	29
3.4	Tabela Verdade NOT.	29
4.1	Tabela Verdade AND. A célula C está fixada em 0	37
4.2	Tabela Verdade OR. A célula C está fixada em 1	37
4.3	Tabela Verdade AND.	42
4.4	Tabela Verdade da porta lógica universal. Tabela superior para AND e inferior para OR	46
5.1	Tabela Verdade "NOR"e "NAND".	62
5.2	Tabela da Verdade "Complement"e "Transfer".	74
5.3	Tabela da Verdade "Implication"e "Inhibitin".	75

Capítulo 1

Introdução



A invenção do transistor trouxe, indiscutivelmente, uma revolução na produção de equipamentos eletrônicos. Ela mudou o modo como se construía dispositivos eletrônicos e talvez o mais importante, criou uma nova indústria: a indústria de computadores.

Computadores - O interesse em máquinas que realizam cálculos aumentou muito nos últimos 300 anos¹. Em 1890, em época de censo nos Estados Unidos da America, Hermann Hollerith percebeu que terminaria de apurar os dados do censo quando já seria época de começar o próximo censo. Ele inventou uma máquina para auxiliá-lo utilizando cartões perfurados. O sucesso foi tal que ele fundou uma companhia chamada *TMC* - *Tabulation Machine Company* que mais tarde se associaria com duas outras empresas

¹Não estamos levando em consideração o ábaco já que ele até a criação da primeira máquina de somar (Pascalina) não houve grandes avanços

formando a *Computing Tabulation Recording Company*, que viria a ser mais tarde a *IBM - Internacional Business Machine*.

A base do Computador - Computadores são máquinas que realizam cálculos. Mas como fazem isso? O homem realiza usualmente as operações de soma, subtração, multiplicação e divisão, de modo que elas podem ser resumidas em uma única operação básica - a soma. Assim uma máquina calculadora tem que poder somar números. Então, como somar?

Quando o homem junta uma pedra com outra, ele basicamente realiza uma "lógica" e depois dá um *resposta*. Por exemplo, se ele quer juntar pedras de um determinado tipo ele tem uma pedra padrão numa mão. Na outra, ele pega outras pedras. *Se* a nova pedra for do mesmo tipo que a padrão ele *junta* senão ele volta a pegar outra pedra.

A máquina calculadora tem de realizar essencialmente as mesmas operações. Assim ela tem que *analisar* uma situação e dar uma *resposta*. No decorrer dessa tese serão apresentados exemplos de funções lógicas que deve-se ter em um computador. Por enquanto, é suficiente saber que as funções lógicas básicas em computação são AND, OR e NOT. Essas funções lógicas são comumente implementadas com a utilização de transistor e atualmente a construção dessas funções lógicas com uso de materiais magnéticos tem atraído atenção de muitos pesquisadores.

Formas Alternativas de Computação - Atualmente a maioria dos computadores utilizam corrente elétrica e principalmente transistores para realizar operações lógicas, não somente as básicas como também funções mais complexas. Assim um transistor analisa as correntes de entrada e dá uma resposta. Mas pode-se contruir dispositivos, outros transistores, utilizando outras propriedades físicas, químicas ou, mesmo biológicas.

Citamos abaixo, algumas formas alternativas de computação.

- RSFQ - "Rapid single-flux quantum- Uma estrutura capaz de realizar operações baseado no estado supercondutor. A estrutura de um RFSQ consiste de um anel supercondutor com uma Junção Josephson. A presença ou ausência de fluxo quântico no anel representam os bits.
- Computação Molecular - A lógica em computação molecular está fundamentada nas propriedades de transporte eletrônico em moléculas, e onde o grande problema consta da confecção de conectores. Algumas moléculas são biestáveis com respeito ao transporte de elétrons. Um potencial é aplicado na molécula para reconfigurá-la e assim moldar suas propriedades de condução eletrônica.
- EQCA - "Electronic Quantum Cellular Automata- Uma única célula EQCA é formada por quatro células de pontos quânticos. Eles estão arranjados de modo a formar um quadrado. Cada ponto quântico está localizado num dos vértices do quadrado. Devido à interação eletrostática as cargas, em geral elétrons, estarão localizadas em vértices opostos da célula. Assim há duas configurações disponíveis para os elétrons o que cria um sistema biestável. Qualquer função lógica pode ser construída utilizando uma ou mais células EQCA.
- MQCA - "Magnetic Quantum Cellular Automata- A estrutura da porta lógica é constituída de vários elementos ferromagnéticos acoplados via interação dipolar. As funções lógicas básicas são realizadas devido a uma dupla estabilidade na magnetização resultante, ou de toda a estrutura ou de um dos elementos ferromagnéticos.



Este trabalho de tese tem como motivação principal apresentar uma proposta experimental para o estudo de portas lógicas no grupo de Magnetismo do CBPF. Isto é feito baseado em nossas simulações computacionais e inspirados nas propostas apresentadas na literatura.

Será inicialmente apresentada uma descrição da literatura no assunto, onde daremos mais atenção para as portas lógicas que utilizam propriedades magnéticas. Apresentaremos, também, métodos computacionais para simulações das portas, TRANFER, AND, OR, NOT e etc. E por fim, os resultados encontrados em nossas simulações computacionais.

A presente Tese está estruturada da seguinte maneira,

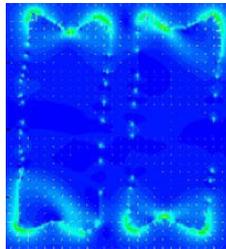
- Capítulo 2, **Nanomagnetismo**, apresentaremos os conceitos básicos de magnetismo.
- Capítulo 3, **Operações Lógicas**, apresentaremos os conceitos básicos inerentes às portas lógicas.
- Capítulo 4, **Autômato Celular**, são expostas as idéias básicas sobre autômato celular e como essa ferramenta poder ser utilizada para construção de portas lógicas. Apresentaremos também os principais resultados encontrados na literatura sobre portas lógicas sem a utilização do chaveamento da corrente elétrica. Apresentamos também um resumo conceitual do Método Monte Carlo.
- Capítulo 6, por fim, **Resultados**, mostraremos os nossos resultados de simulações computacionais para um sistema unidimensional e bidimensional. Resultados como

o transporte de informação, confiabilidade de uma porta lógica TRANSFER, AND, OR, NOT e outras são apresentados.

- Nos apêndices, **A**, estão detalhados alguns cálculos e explicações complementares

Capítulo 2

Nanomagnetismo



Neste capítulo apresentaremos alguns conceitos básicos de magnetismo. A entidade básica no estudo de magnetostática é a interação dipolar magnética. Apresentaremos também a teoria de interações de momentos magnéticos entre si tanto por uma abordagem clássica como quântica.

2.1 Introdução

O hamiltoniano das interações magnéticas entre momentos magnéticos em um certo material pode ser dado por

$$H_{total} = H_{Zeeman} + H_{Magn.} + H_{Troca} + H_{Anis.cris.} + H_{Anis.forma}. \quad (2.1)$$

A variação relativa na magnitude dos termos desse hamiltoniano leva a várias propriedades magnéticas importantes. O estudo analítico desse hamiltoniano só é possível

para alguns casos simples, como por exemplo no caso do termo de troca que tem solução analítica somente para sistemas em 1 e 2 dimensões no modelo de Ising.

2.2 Energia Zeeman

O que acontece quando um campo magnético é aplicado a um material? E quando esse campo é retirado?

Se não há interação do campo com o material, ou ela é muito pequena, nada acontece, tanto quando o campo é colocado e muito menos quando é retirado. Havendo interação, o campo magnético fará com que os momentos magnéticos do material se alinhem com o campo (ver apêndice, seção A.1). Quando o campo é retirado o momento não necessariamente terá que voltar para o estado inicial, mas se voltar, ele terá que perder a energia que tinha quando estava alinhado com o campo. Zeeman observou em 1896 que as linhas espectrais emitidas no processo de desexcitação de átomos submetidos a um campo magnético, ou seja, estados excitados, separavam-se em várias linhas ou componentes. O que é hoje chamado de *Efeito Zeeman*.

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 (ver apêndice, seção A.1),

$$B_i(\vec{x}) = B_i(0) + \vec{x} \cdot \nabla B_i(0) + \dots \quad (2.2)$$

e substituindo na equação de força temos,

$$\vec{F} = \vec{B}(0) \times \int \vec{J}(\vec{x}') d^3x' + \int \vec{J}(\vec{x}') \times [(\vec{x}' \cdot \nabla) \vec{B}(0)] d^3x' + \dots \quad (2.3)$$

e por manipulação algébrica chegamos a,

$$\vec{F} = \nabla(\vec{m} \cdot \vec{B}). \quad (2.4)$$

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

$$U = -\vec{m} \cdot \vec{B}. \quad (2.5)$$

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,

$$E_{Zeeman} = - \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{B}_i \quad (2.6)$$

onde \vec{B}_i é o campo magnético em que cada momento magnético \vec{m}_i está exposto.

2.3 Interação Dipolo-Dipolo

Na seção anterior foi mostrado que a energia potencial é o produto escalar do momento \vec{m} com o campo magnético \vec{B} externo. Mas se \vec{B} fosse um campo produzido por um outro dipolo?

O potencial vetor \vec{A} criado por um dipolo é,

$$\vec{A}(\vec{x}) = \frac{\vec{m} \times \vec{x}}{|\vec{x}|^3} \quad (2.7)$$

e sabemos que,

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (2.8)$$

Assim o campo magnético criado por dipolo é,

$$\vec{B}(\vec{x}) = \frac{3\vec{x}(\vec{x} \cdot \vec{m}) - \vec{m}}{|\vec{x}|^3} \quad (2.9)$$

fazendo o produto escalar de \vec{m} com a equação (2.9) temos a energia potencial da interação dipolo-dipolo,

$$E_{D_i-D_i} = \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{|r_{ij}|^3} - 3 \frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|r_{ij}|^5}, \quad (2.10)$$

onde $\vec{r}_{ij} = |\vec{x}_i - \vec{x}_j|$ é a distância entre o momento \vec{m}_i e \vec{m}_j . Ver apêndice, seção A.3, para mais detalhes.

O efeito desse termo no hamiltoniano é de reduzir o número de pólos do material. Se olharmos só o primeiro termo da equação (2.10), por exemplo, veremos que o mínimo de energia ocorre quando \vec{m}_i e \vec{m}_j estão anti-paralelos.

2.4 Energia de Troca

Ao contrário da energia Zeeman e da interação dipolo-dipolo a energia de troca é um fenômeno puramente quântico¹.

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

¹Observe que a expressão da energia Zeeman pode ser usada para fenômenos clássicos, como momento magnético dipolar, como também quântico, como momento magnético de spin. Quando Zeeman observou as linhas espectrais de átomos excitados ele estava diante de um fenômeno quântico, onde a nova energia dos átomos excitados inclui a interação do momento magnético de spin com o campo. Mas ao contrário do fenômeno quântico que Zeeman observou a expressão $\vec{m} \cdot \vec{B}$ pode ser obtida do eletromagnetismo clássico (ver apêndice, seção A.1) e com muitas aplicações e explicações de fenômenos clássicos.

Heisenberg propôs uma interação de troca quântica com a forma,

$$H = - \sum_{i < j} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.11)$$

onde $J_{i,j}$ é a integral de troca que descreve a intensidade de interação entre os spins e é função da distância entre eles.

Vemos claramente que a integral de troca leva a um alinhamento paralelo entre os spins para $J > 0$ e um alinhamento anti-paralelo para $J < 0$.

2.5 Energia de Anisotropia

Como foi visto nas seções anteriores cada termo de energia contribui para algum tipo de ordenamento magnético, ferromagnético ou antiferromagnético, ou ainda uma orientação magnética devido ao campo externo. Estas interações dependem unicamente da direção relativa entre os momentos ou do campo, ou seja, as interações eram essencialmente isotrópicas.

Ao se agrupar um conjunto de átomos para formar um cristal a estrutura final tem eixos que caracterizam a simetria do cristal formado. Se esse grupo de átomos usados para formar o cristal tem um momento magnético orbital e/ou de spin de forma que o cristal poderá apresentar um momento magnético total. Esse momento não necessariamente terá a mesma direção do eixo que caracteriza a simetria do cristal. Como é de se esperar, as curvas de magnetização mudam drasticamente devido aos eixos que caracterizam a simetria do cristal formado. Veja por exemplo a figura 2.1(2).

O importante é a dependência da magnetização com a orientação do cristal. "Quando uma propriedade física de um material é função da direção, essa propriedade é dita exibir

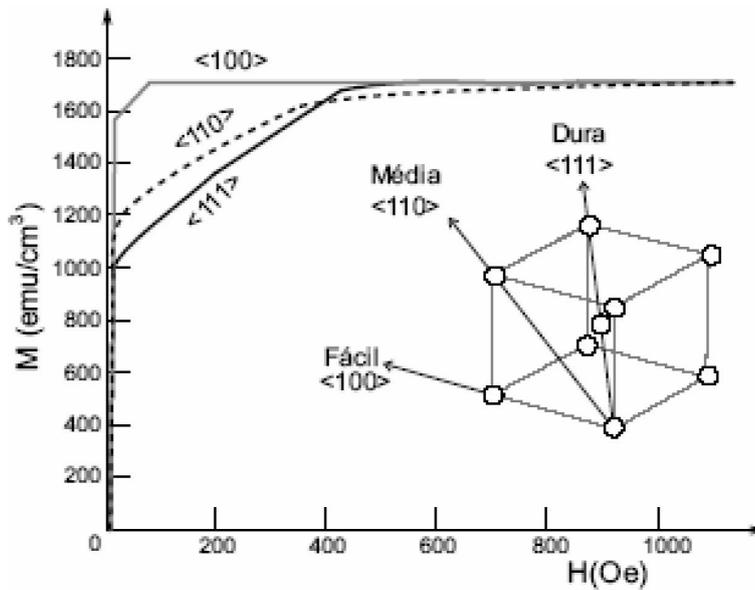


Figura 2.1: Magnetização em função do campo magnético aplicado na amostra. A saturação é alcançada mais rápido dependendo da orientação da amostra(2)

uma anisotropia "(1). Para o nosso caso a anisotropia magnética é definida como "...a dependência da energia de um sistema de momentos magnéticos paralelos com a orientação desses momentos com respeito aos eixos característicos das amostras."(2)

Devido a interação spin-orbita os spins eletrônicos sentem a simetria da amostra, ou seja, eles sentem a anisotropia. Dependendo da simetria cristalina a amostra pode apresentar vários eixos de magnetização também chamados de eixos fáceis. Em primeira aproximação a energia de anisotropia cristalina uniaxial em materiais magnéticos (anisotropia magnetocristalina) pode ser dado por,

$$E_k = K_1 \sin^2(\theta) \quad (2.12)$$

onde a energia é mínima quando o momento magnético tem as direções 0 e π em relação ao eixo fácil. Podemos ter também outras formas de anisotropia

Além da anisotropia magnetocristalina podemos ter outras formas de anisotropia. Podemos ver o surgimento de uma fonte de anisotropia, anisotropia de forma, com o

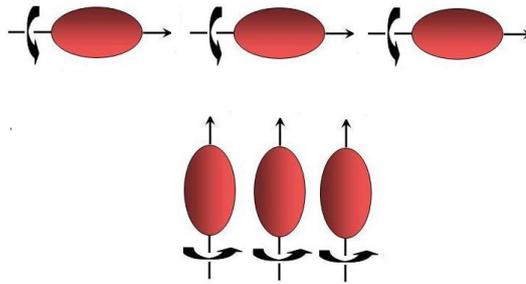


Figura 2.2: Figura mostrando a direção de cada momento. Na figura superior os momentos estão na horizontal devido ao produto escalar de \vec{m}_i e $r_{i,j}$. Na figura inferior é mostrado um alinhamento para $J > 0$ na energia de troca. Em termos de energia as duas figuras estão corretas.

auxílio da equação associada a interação dipolo-dipolo,

$$E_{Di-Di} = \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{|r_{ij}|^3} - 3 \frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|r_{ij}|^5}, \quad (2.13)$$

a partir do segundo termo pode ser visto que um material de forma quase planar a magnetização resultante estará orientada no plano. Além disso, devido a existência do produto escalar entre \vec{m}_i e $r_{i,j}$ o ângulo entre eles que minimiza a energia é 0° . Assim, se N momentos estão alinhados a magnetização resultante terá a mesma direção desse alinhamento. Vale lembrar que essa conclusão não pode ser obtida com o termo de troca (veja figura 2.2). Veja apêndice seção A.3 para mais detalhes.

2.6 Superparamagnetismo

Suponhamos que o nosso hamiltoniano tenha somente o termo de anisotropia de forma e que o material tenha dimensões da ordem de alguns nanômetros. Veja figura 2.3, onde os ângulos Θ 's são definidos em relação ao plano xy e a direção do momento magnético resultante do material.

A energia de anisotropia tem por resultado alinhar os momentos magnéticos. Esse alinhamento, como vimos na seção anterior, minimiza a energia. Estando alinhando

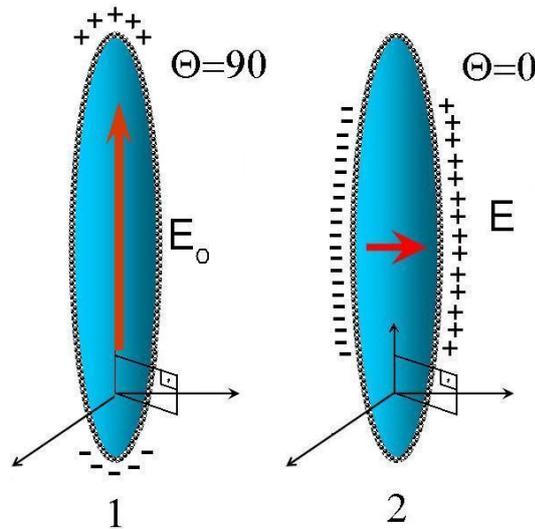


Figura 2.3: A figura mostra o alinhamento dos momentos magnéticos, setas vermelhas, do material para minimizar a energia magnetostática. O alinhamento ao longo do eixo maior (também chamado de eixo fácil) corresponde ao mínimo de energia e além de corresponder ao mínimo de polos.

os momentos magnéticos, a direção do momento resultante é a direção que minimiza o número de polos no material como podemos ver na figura 2.3. A direção $\Theta = 90^\circ$ não é única, podemos ter também $\Theta = -90^\circ$ e que corresponde ao mínimo de energia igualmente. Veja a figura 2.4.

Ao contrário da energia de anisotropia, a energia térmica atua no sistema de forma a desalinhar os momentos magnéticos², fazendo-os oscilar constantemente em torno de uma direção de equilíbrio (que seria a direção do momento magnético para temperatura absoluta zero).

Para o sistema apresentado nas figuras 2.3 e 2.4, se a temperatura T é tal que $k_b T \geq V_0$, onde k_B é a constante de Boltzmann, então a energia térmica é igual ou maior a energia potencial. Isso faz com que os momentos magnéticos oscilem constantemente nas

²O alinhamento não necessariamente está associado a momentos que têm a mesmas direções. Por exemplo alinhamento anti-ferromagnético é um alinhamento com seus momentos em direções opostas

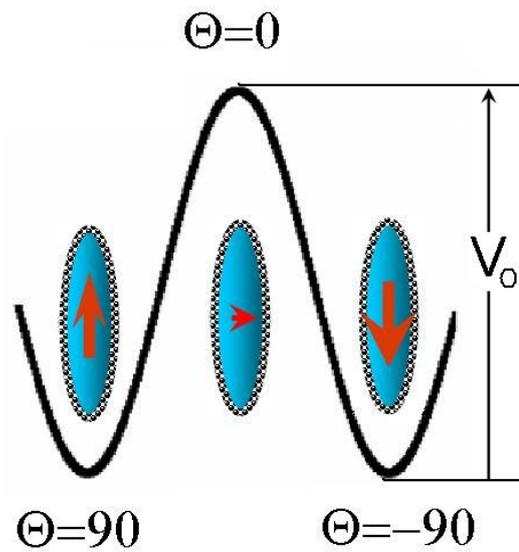


Figura 2.4: Figura mostrando os mínimos de energia magnetostática para $\Theta = \pm 90^\circ$ e máximo em $\Theta = 0$. Os estados $\Theta = \pm 90^\circ$ estão separados por uma barreira de energia potencial V_0 que corresponde a altura dela

direções $\Theta = \pm 90^\circ$. Assim na média, o momento magnético é nulo. Nessa situação o sistema apresenta uma propriedade chamada de *Superparamagnetismo*. Para $k_b T \leq V_0$, ou seja, o sistema passa da propriedade de superparamagnetismo para uma magnetização bloqueada.

Assim, essencialmente o *superparamagnetismo* é uma propriedade de um material magnético em que $E \leq k_b T$, onde E é a energia do sistema, menos a energia térmica.

Podemos ainda achar outra maneira para caracterizar o superparamagnetismo. Vimos que um material com a propriedade de superparamagnetismo a média da magnetização é nula. Assim, qualquer campo magnético externo aplicado nesse material alguns momentos magnéticos irão apontar na mesma direção dele. Portanto, suponhamos um material que tenha dimensões da ordem de alguns nanômetros, um material superparamagnético na forma circular³. Pela figura 2.5, vemos que o material tem seu momento magnético

³A forma circular utilizada não é a única a ter seus momentos alinhados na presença de campo. Foi utilizada por não apresentar anisotropia de forma (onde supomos também não ter anisotropia cristalina)

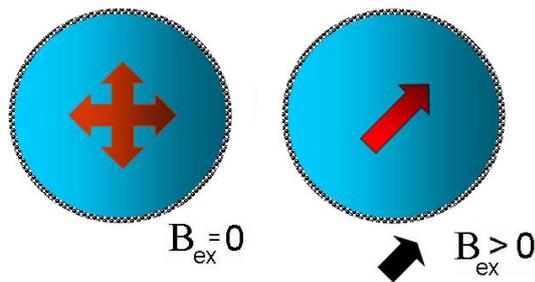


Figura 2.5: Material superparamagnético na forma circular. O momento magnético oscila apontando para todas as direções. Com um campo magnético externo o momento passa a ter a mesma direção que o campo.

oscilando entre todas as direções, figura a esquerda, e basta aplicar um campo magnético externo⁴ para alinhar o momento, figura a direita. Podemos ver isso por um gráfico de magnetização por campo magnético externo. Veja figura 2.6

A continuidade da curva se deve a vários fatores. Mas para um material em que os momentos magnéticos não interagem entre si a continuidade se deve a agitação térmica e por isso não apresenta uma mudança abrupta na direção no momento quando campos pequenos são aplicados. Mas quanto menor a temperatura mais abrupta será a mudança na direção de magnetização, ou seja, existe uma dependência da magnetização com a temperatura.

Podemos assim identificar a propriedade *Superparamagnética* de outra forma. Se um material magnético apresentar um curva de magnetização por campo magnético externo da forma do gráfico 2.6 dizemos que o material apresenta a propriedade de superparamagnetismo⁵.

e assim o campo não teria que "vencer" a anisotropia para que o material tenha seu momento na direção do campo. Assim poderíamos ter utilizado qualquer outra forma desde que o momento seja zero a campo nulo.

⁴O campo magnético externo a princípio pode ter qualquer módulo para um superparamagneto perfeito.

⁵Se aplicarmos um campo magnético numa dada direção num intervalo de tempo t tal que seja menor que o tempo em que o material gasta para se alinhar na direção do campo aplicado podemos ter coersividade em superparamagneto. Ver mais adiante sobre coersividade

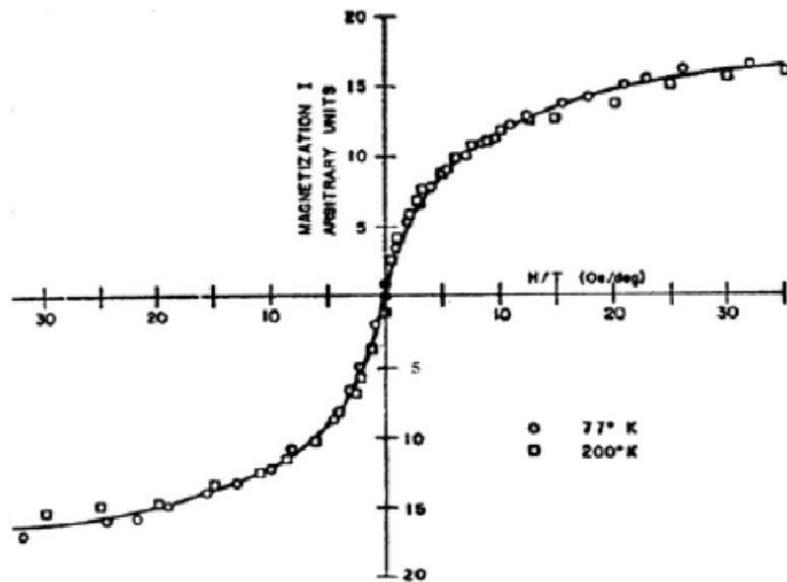


Figura 2.6: Curva de magnetização por campo magnético externo aplicado em um material superparamagnético(1).

••

Para um sistema bloqueado podemos definir um campo magnético externo B_{ex} que age no material de forma a inverter a direção de magnetização em que se encontra. Assim para o material apresentado na figura 2.3 quando aplicamos um campo externo a direção de magnetização irá mudar se $m * B_{ex} > H$. Onde m é o momento magnético do material e H é o hamiltoniano 2.1 menos a energia de Zeeman. Veja figura 2.7, onde B_{ex} e B_{di} são respectivamente os campos magnéticos externo e dipolar. O campo dipolar é a soma de todos os campos dipolares, equação 2.9, criados pelos dipolos. Quando $B_{ex} = B_{di}$ definimos o campo externo como campo de coercividade⁶. Mas como fazemos para obter o campo de coersividade?

Podemos repetir o processo que foi realizado para construir o gráfico 2.6, mas com a magnetização do material no estado bloqueado. Já esperamos que a direção da magne-

⁶Claramente a coercividade para um material superparamagnético é zero, por razões que já explicamos

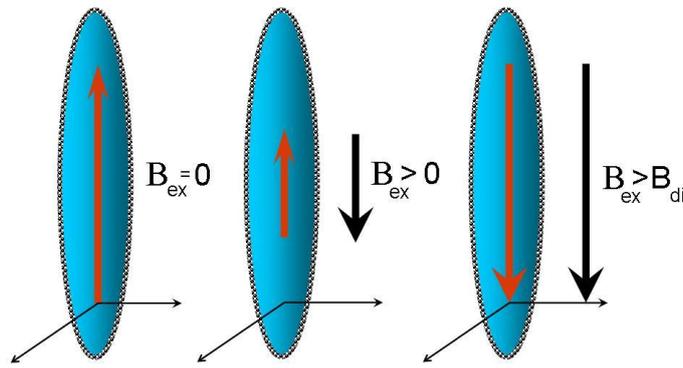


Figura 2.7: Campo B_{ex} usado para inverter a direção de magnetização do material. Onde B_{di} é o campo magnético interno criado pelo material. Quando $\vec{B}_{ex} = -\vec{B}_{di}$ definimos o campo externo como campo de coercividade.

tização não seja a direção de um campo qualquer aplicado, veja figura 2.8. Quando a magnetização é nula definimos o campo aplicado como campo de coercividade e quando o campo é nulo definimos a magnetização como magnetização remanescente. Essa curva é chamada de curva de histerese. Vemos por esse gráfico que a magnetização não segue o mesmo comportamento apresentado para superparamagnetismo (figura 2.6). A abertura na curva é devido ao fato de que $E < kT$. Assim, o campo externo tem "vencer" a anisotropia de forma do material a fim de inverter a magnetização. Novamente podemos classificar de uma outra maneira um material que apresenta a magnetização bloqueada. Se um material magnético composto por pequenas partículas apresentar uma magnetização na presença de um campo magnético externo da forma apresentada na figura 2.8, dizemos que a magnetização está bloqueada⁷.

••

Então até aqui temos duas propriedades apresentadas por materiais magnéticos, o superparamagnetismo e a magnetização bloqueada. Sendo que a magnetização bloqueada

⁷Apresentar magnetização bloqueada significa que se o campo magnético externo for nulo o material apresentará uma magnetização não nula

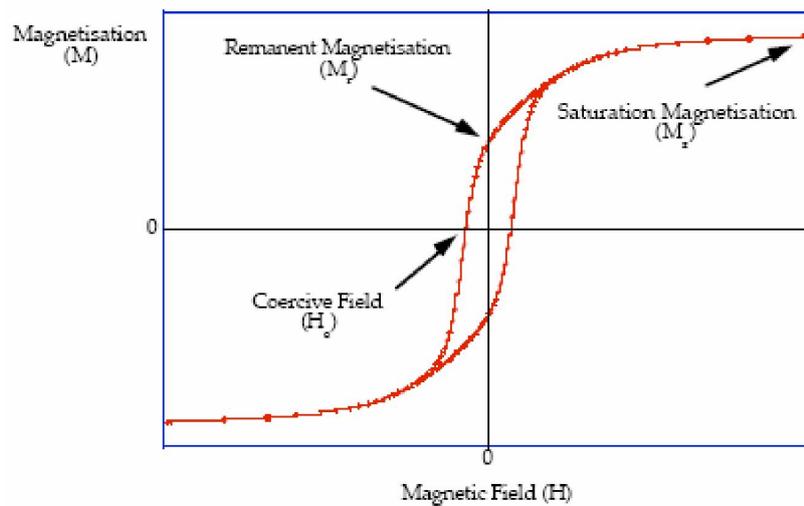


Figura 2.8: Gráfico de magnetização M por campo magnético externo. Quando a magnetização é nula definimos o campo aplicado no material como campo de coercividade. Quando o campo é nulo a magnetização resultante é definida como magnetização remanescente $B_{ex}(1)(2)$.

pode ser manipulada de forma a apresentar propriedade de superparamagnetismo e também o contrário. Isso pode ser realizado simplesmente controlando a temperatura ambiente em que se encontra a amostra. Mas para uma temperatura fixa, um material que apresenta a propriedade de superparamagnetismo pode passar a ter magnetização bloqueada. Uma maneira de fazer isso é aumentar o volume da amostra.

Um sólido macroscópico é constituído de uma grande quantidade de momentos magnéticos. O arranjo desses momentos tem que ser tal que minimize a energia magnetostática. Assim esse arranjo dos momentos, que às vezes pode ser considerado aleatório dos momentos, leva a formação de domínios magnéticos. Veja figura 2.9 onde cada seta representa o momento magnético associado ao seu domínio e as linhas retas em branco representam as paredes de domínios ⁸.

Olhando cada domínio individualmente podemos dizer que cada um está com a mag-

⁸Dois momentos magnéticos vizinhos têm a mesma direção devido a interação de troca entre eles. Mas momentos vizinhos de domínios diferentes não têm a mesma direção.

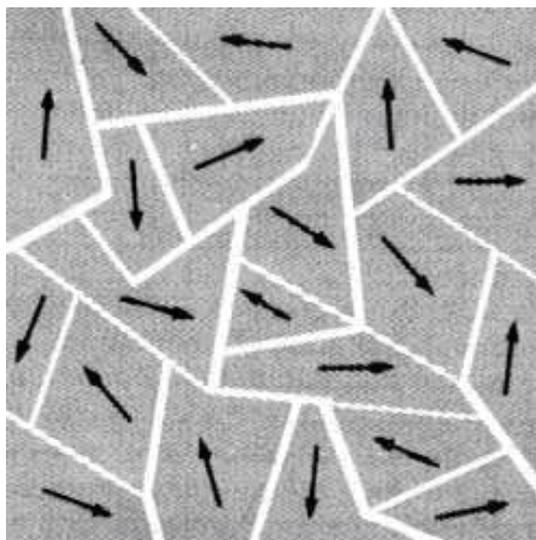


Figura 2.9: Figura mostrando vários domínios magnéticos.



Figura 2.10: Domínios magnéticos de um material. As setas representam a direção da magnetização no domínio específico. As linhas brancas representam as paredes de domínios. Mesmo que o material tenha vários domínios sua magnetização é diferente de zero.

netização bloqueada. Isso nos leva a pensar que se diminuirmos o volume do material chegamos a um com a magnetização não nula mas que pode ainda apresentar domínios. Veja figura 2.10 a esquerda, que apesar de três domínios a média da magnetização é não nula. Continuando a diminuir o material chegamos a um outro com a magnetização bloqueada, figura 2.10 a direita. E se ainda continuarmos a diminuir a amostra passa a apresentar a propriedade de superparamagnetismo. E esse processo aconteceria a uma temperatura fixa. Assim podemos classificar um material com estruturas de domínios?

Vemos na figura 2.10 que mesmo com a presença dos três domínios a média da magne-

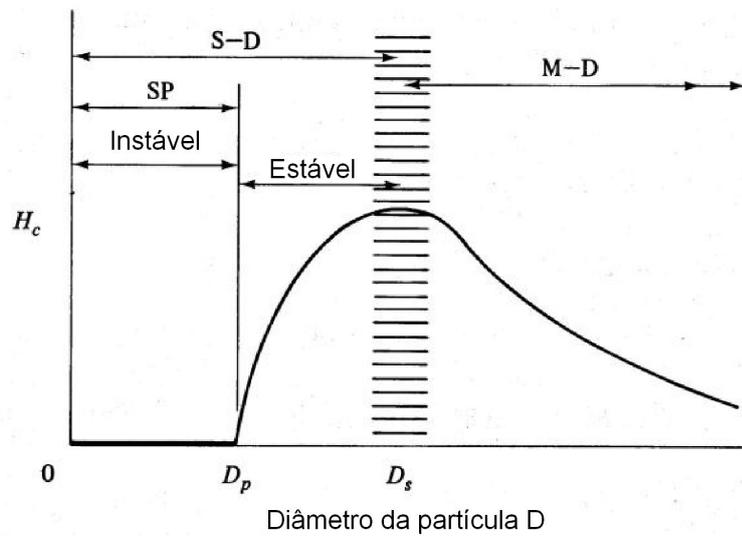


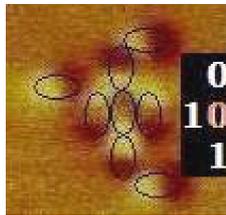
Figura 2.11: Gráfico coersividade em função do tamanho da partícula. Mostrando a ligação de um material sem estruturas de domínios com material com estrutura de domínio. M-D - multi-domínios, S-D - único domínio e SP - superparamagnético(2)(1).

tização é não nula. A média das setas aponta para cima, em relação ao texto. Portanto, para invertê-las temos que fazer as paredes de domínio se deslocarem. Assim, esperamos que esse material apresente uma curva de histerese semelhante ao material bloqueado (mesmo campo de coersividade).

Além disso, o material da figura 2.9, como sabemos, pode apresentar magnetização nula. Assim esperamos uma curva de histerese semelhante do material superparamagnético (campo de coersividade nulo). Veja figura 2.11.

Capítulo 3

Operações Lógicas



3.1 Introdução

O que é uma porta lógica?

Portas lógicas são dispositivos, ou circuitos, que operam um ou mais sinais de entrada para produzir uma e somente uma saída, a qual é dependente da função implementada no dispositivo.

O que está por trás de uma porta lógica? O que uma porta lógica necessita para realizar uma operação lógica? Basicamente os circuitos ou dispositivos lógicos apresentam duas características. *Distinção entre estados* e *Controle condicional de estado*.

1- *Distinção entre estados*, ou seja, o dispositivo deve ter a capacidade de distinguir os sinais lógicos de entrada. Por exemplo, tem-se duas bolas, uma azul e outra vermelha. O dispositivo tem que ter o poder de distinguir qual bola é azul e qual é vermelha. Outro

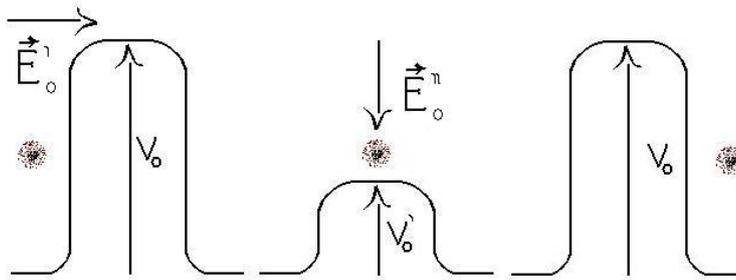


Figura 3.1: Dispositivo lógico simplificado

exemplo clássico é a utilização do transistor para construir portas lógicas. As correntes elétricas das entradas são diferenciadas pela estrutura.

2- Após fazer a distinção dos sinais de entrada o dispositivo tem que produzir uma saída. Mas para isso, ele tem de poder controlar os sinais de entrada, ou seja, *controle condicional de estados*. Isto está associado a deformação do potencial que separa os estados do dispositivo eletrônico em questão. Um exemplo de um dispositivo simplificado é mostrado na figura 3.1. A bola negra representa um elétron, V_0 representa o potencial que o impede de passar para o lado direito do potencial, E_0'' é o campo usado para diminuir a barreira V_0 e E_0' é o campo usado pra mover o elétron. Esse dispositivo tem um sinal de entrada quando o elétron está do lado esquerdo do potencial e somente uma saída, representada pelo elétron no lado direito do potencial. Apresentando assim as característica de *distinção entre estados*. O *controle condicional de estados* é a capacidade de controlar o potencial V_0 de forma a permitir a passagem de elétrons. Portanto, a estrutura apresentada na figura 3.1 tem as duas características básicas de um dispositivo lógico.

Em materiais magnéticos a distinção entre os estados está geralmente associada a direção de magnetização resultante do material. Se o material apresenta várias direções

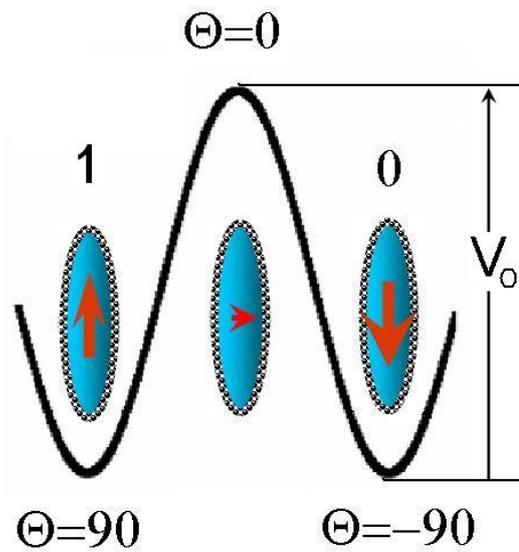


Figura 3.2: Figura mostrando dois mínimos de energia associados as direções $\Theta \pm 90^\circ$. Onde podemos ver dois estados lógicos codificado como 1 e 0 com as direções de magnetização $\Theta \pm 90^\circ$, respectivamente.

de magnetização preferenciais com mínimo em cada um, o potencial que separa os estados lógicos é o potencial entre as direções de magnetização.

O controle condicional de estados é realizado manipulando o potencial entre as direções de magnetização, veja figura 3.2. Podemos ver nessa figura dois estados lógicos. Temos a pequena partícula com a magnetização resultante bloqueada e como ela apresenta duas direções de magnetização com mínimo de energia em cada uma delas. Podemos identificar cada direção como um estado lógico. Então, essa partícula apresenta *distinção entre estados*. A característica de *controle condicional de estados* é obtida, como já foi dito, por manipulação do potencial que separa os estados lógicos, V_0 . Veja figura 3.3. Podemos ver por essa figura que há dois estados lógicos representados pelos desenhos inferiores, onde temos uma magnetização com ângulo 0 e π com respeito ao eixo duro da partícula. Quando aumentamos o campo magnético na direção antiparalela ao eixo fácil, o potencial que separa os estados lógicos diminui e é quebrada a simetria dos potenciais. Isso pode

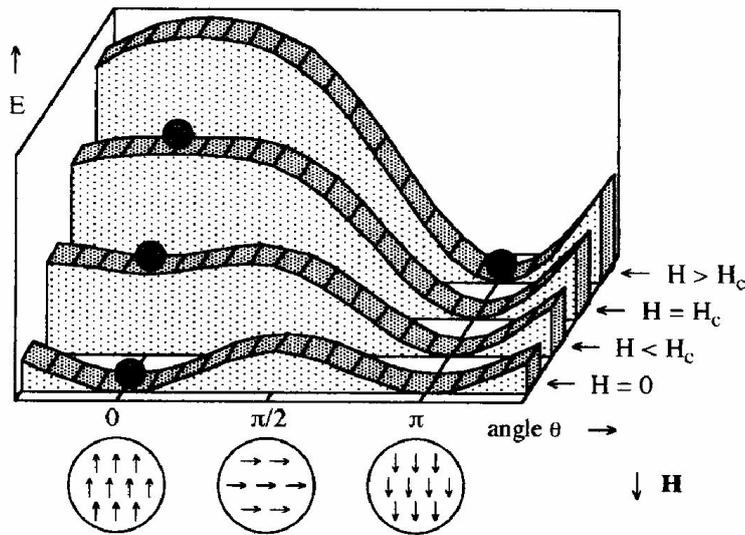


Figura 3.3: Energia em função do ângulo entre a magnetização e para vários módulos de campo magnético

ser visto claramente na figura 3.3.

3.2 Portas Lógicas

No capítulo 1 falamos um pouco da história do computador e sobre as funções básicas usadas em computação. Com o uso das portas lógicas NAND e NOR é possível contruir qualquer outra operação.

Na figura 3.1 vimos que os sinais lógicos da entrada são: campo E_0'' e o elétron. Se o campo E_0'' e o elétron estão presentes haverá uma saída. O que percebemos é que a figura 3.1 representa uma porta lógica AND. Se representarmos os sinais lógicos por dois dígitos, 0 e 1, podemos construir uma tabela verdade. Veja tabela 3.2.

Podemos representar a porta lógica da figura 3.1, e outros com funções lógicas diferentes, por uma figura com duas ou mais entradas e uma saída. Veja as figuras 3.4, 3.5 e 3.6 representando portas lógicas e suas respectivas tabelas verdade 3.2, 3.2 e 5.7.

Apresentamos no capítulo 1 que as funções básicas em computação que são AND, OR

Elétron	Campo E_0''	Saída
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

Tabela 3.1: Tabela Verdade.

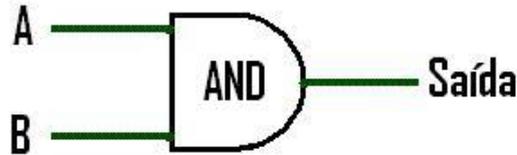


Figura 3.4: Porta Lógica AND

e NOT e no presente capítulo apresentamos cada uma e suas respectivas tabela verdade.

Mas como essas portas lógicas são usadas em computação?

Sabemos que computadores são máquinas que realizam cálculos e sabemos também que esses cálculos podem ser resumido em uma única operação - a soma. Assim apresentamos aqui um exemplo de uma operação de soma utilizando as portas lógicas AND, OR e NOT (veja figura 3.7). Os números 1 e 0 escritos na base 2 também são 1 e 0. A soma é realizada na base 2.

A	B	Saída
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

Tabela 3.2: Tabela Verdade AND.

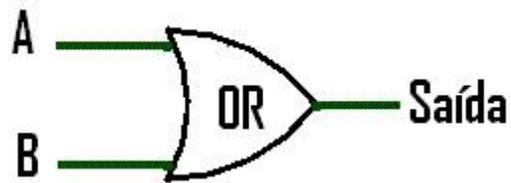


Figura 3.5: Porta lógica OR



Figura 3.6: Porta lógica NOT

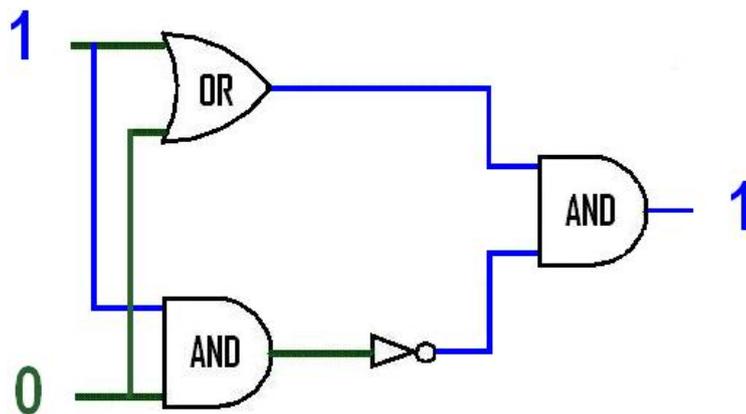


Figura 3.7: Figura representando uma operação de soma que utiliza as portas lógicas AND, OR e NOT. Os números 1 e 0 são somados.

A	B	Saída
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	1

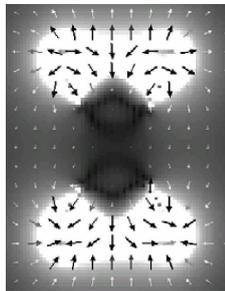
Tabela 3.3: Tabela Verdade OR.

A	Saída
0	1
1	0

Tabela 3.4: Tabela Verdade NOT.

Capítulo 4

Autômato Celular



Pouca atenção, principalmente no meio comercial, tem sido dada para o processamento lógico de informação com uso de materiais magnéticos. O presente capítulo destina-se a apresentar o que tem sido feito em portas lógicas magnéticas e como realizar simulações dessas portas. Essas simulações em geral utilizam o Método Monte Carlo que será apresentado na última seção. Tais dispositivos magnéticos em geral utilizam o estado de magnetização de materiais ferromagnéticos para codificar informação, e por consequência, armazenar dados.

4.1 Introdução

Nossos computadores pessoais processam informação utilizando corrente elétrica, ou seja, utilizam uma propriedade do elétron que é a sua carga e . Não explicaremos em detalhes

como esse processamento eletrônico é realizado, mas ele se dá basicamente a partir do chaveamento da corrente elétrica.

Recentemente Imre e colaboradores(13) construíram uma porta lógica que realiza as funções lógicas básicas de microeletrônica, suprimindo assim as funções lógicas mínimas e necessárias no processamento de informação. Mas ao contrário da microeletrônica, as funções lógicas não são construídas utilizando transistores, mas materiais magnéticos. Em ambos os casos, as portas lógicas utilizam o elétron, mas cada uma utiliza uma propriedade diferente. Em microeletrônica, como foi dito, o transistor utiliza a propriedade de carga do elétron. A propriedade de spin é utilizada em geral no armazenamento de informação pois se um grupo de partículas têm a magnetização na mesma direção, isso pode ser codificado como 1 e se o grupo tem outra direção de magnetização codifica-se como 0. A codificação 0 e 1 é uma escolha, sendo esses os mais usados, mas podendo ser feita com outros números, ou com cores ou símbolos.

Apesar da propriedade de spin do elétron ser utilizada para codificar informação e assim armazená-la, essa propriedade não era utilizada até então em processamento de informação a fim de criar uma função lógica. Imre e colaboradores conseguiram fazer isso, mas ao construir uma porta lógica utilizando a propriedade de carga do elétron a arquitetura da porta terá uma forma definida, ou estabelecida. Agora, se a porta lógica é construída utilizando a propriedade de spin a estrutura será totalmente diferente. Assim, uma mudança em nível microscópico leva a uma mudança dramática na estrutura macroscópica.

4.2 Autômato Celular

Não entraremos em detalhes nos fundamentos e aplicações de um autômato celular, mas será feita uma descrição básica para podermos usar essa ferramenta matemática em nosso trabalho.

O Autômato Celular é formado por um conjunto de células, onde cada célula pode assumir k estados. Elas estão numa rede específica que tem d dimensões¹ e seus estados evoluem num tempo discreto seguindo um conjunto de regras simples. São essas regras que definem a maneira como as células irão evoluir e como elas irão interagir entre si.

O papel desempenhado pelo autômato celular em nanomagnetismo é simples. Uma amostra ferromagnética de dimensões de centímetros apresenta vários domínios magnéticos podendo ter, em campo nulo, uma magnetização nula. Mas para uma amostra com dimensões de alguns nanômetros os domínios magnéticos ainda não existem, a partícula é um monodomínio, e por consequência a amostra apresenta uma magnetização diferente de zero².

Assim, se um material apresenta direções de magnetização preferenciais, podemos codificar a informação baseada nessas direções. Por exemplo, se uma amostra apresenta dois estados estáveis, ou seja, magnetização diferente para cada estado, associamos cada direção a um número (por exemplo 0 e 1). A interação de um grupo desses materiais pode ser resumida a uma regra tipo autômato celular. O arranjo espacial e microscópico de um grupo dessas partículas magnéticas pode então levar a uma função lógica. Então, o estudo ou a criação de novas funções lógicas se resume em arranjar espacialmente as

¹O número de dimensões d é inteiro.

²As direções de magnetização característica de um material depende de vários fatores, tais como anisotropia cristalina, forma do material, temperatura e etc. Para mais detalhes ver capítulo 2

partículas que apresentam direções de magnetização características.

4.3 Autômato Celular Quântico

Autômato Celular Quântico é uma estrutura física constituída por uma rede de células quânticas e apresenta um comportamento discreto(16). Apresentaremos alguns conceitos e mais detalhes nas seções seguintes.

4.3.1 Pontos Quânticos

São partículas com dimensões de nanômetros, constituídas de materiais semicondutores. As aplicações são muito variadas, indo da química a biologia. Por exemplo, com a utilização de pontos quânticos pesquisadores puderam observar reações moleculares e químicas por mais tempo e assim adquirir mais informações. Os pontos quânticos produzem elétrons quando absorvem luz, sendo usados na construção de células solares.

Uma aplicação de especial interesse para esse trabalho é em computação. Um arranjo especial de pontos quânticos pode apresentar dupla estabilidade. O que permite a codificação da informação.

Devido seu tamanho diminuto os pontos quânticos aprisionam os elétrons nas três dimensões espaciais e apresentam níveis de energia discretas. Por isso que pontos quânticos são as vezes chamados de átomos artificiais.

4.3.2 EQCA - Autômato Celular Eletrônico Quântico

Um grupo de pesquisadores da "University of Notre Dame"propôs uma estrutura utilizando pontos quânticos para computação digital elementar. Os componentes básicos desse autômato celular quântico chamado de autômato celular eletrônico quântico EQCA

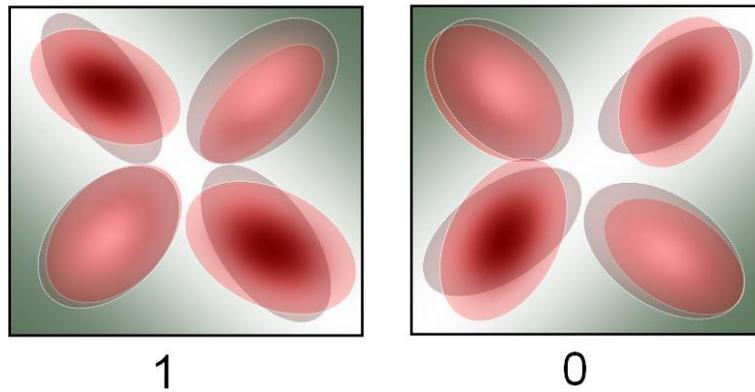


Figura 4.1: Devido a força Coulombiana os elétrons ficaram em vértices opostos afim de minimizar a energia potencial. Os vértices mais escuros representam a presença do elétron.

é constituído de quatro pontos quânticos formando um quadrado. Dois elétrons livres são acrescentados, de forma a poderem ocupar os quatros pontos quânticos. Os elétrons são presos nos pontos por um potencial Coulombiano. Devido a interação repulsiva entre os elétrons eles ficam o mais longe possível um do outro, e ocupam vértices opostos. Mas há duas possibilidades de ocupação dos vértices opostos que minimiza a energia potencial. Essas duas possibilidades geram a codificação de informação. Veja figura 4.1.

Na figura 4.1 a esquerda representa digito 1 e da direita o 0. O EQCA pode ser usado para guardar informação. Os vértices mais escuros representam a presença do elétron. Uma estrutura maior constituída de vários EQCA's pode transferir informação de um ponto x para outro ponto y . Pode-se construir também uma estrutura que inverte o sinal que estava sendo transportada. Veja figura 4.2.

Há também uma estrutura EQCA que realiza operações lógicas básicas necessárias em computação convencional. Trata-se da porta lógica "Majority Gate". Veja figura 4.3.

A figura 4.3 é um possível arranjo de pontos quânticos que funcionam como uma porta lógica com as funções lógicas básicas. A porta tem uma funcionalidade dependente da

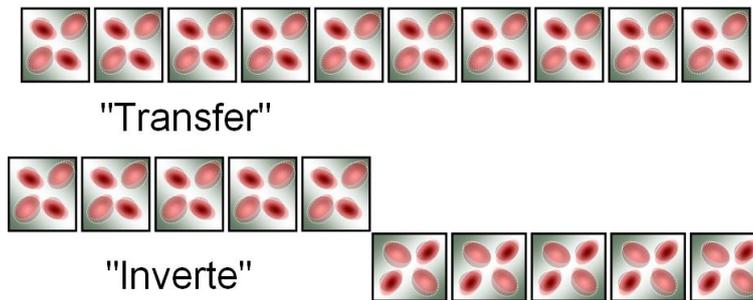


Figura 4.2: Duas estruturas EQCA. Figura da superior tem a propriedade de transportar informação e inferior inverte o sinal que estava sendo transportado.

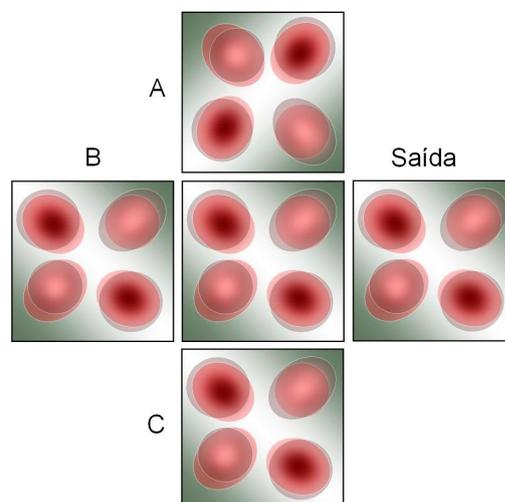


Figura 4.3: Um possível arranjo para porta lógica universal. A funcionalidade dessa porta depende do estado, fixado, na célula C. Podemos ver isso na tabela [4.3.2](#).

maneira que é fixada a célula C, como podemos ver nas tabelas 4.3.2 e 4.3.2.

A	B	Saída	C
0	0	0	0
1	0	0	0
0	1	0	0
1	1	1	0

Tabela 4.1: Tabela Verdade AND. A célula C está fixada em 0

A	B	Saída	C
0	0	0	1
1	0	1	1
0	1	1	1
1	1	1	1

Tabela 4.2: Tabela Verdade OR. A célula C está fixada em 1

Uma possível computação utilizando EQCA tem vantagens tais como baixo consumo de energia. Não necessita de conexão dos pontos quânticos, já que a interação entre os elétrons de células distintas é por força coulombiana. Os problemas de EQCA no entanto são vários. Por exemplo, a temperatura de trabalho do EQCA é da ordem de alguns miliKelvin. Isto pode ser um problema para a implementação computacional em sistemas mais complexos formados de várias células. Além disto a energia superficial possui muitos mínimos locais de energia. Se o sistema evoluir para um desses mínimos locais, eles podem gerar atraso no sinal.

4.4 MQCA - Autômato Celular Magnético Quântico

Ao contrário do EQCA que opera a miliKelvin e utiliza a interação coulombiana nas interações entre as células de EQCA. O MQCA é um dispositivo que opera a temperatura ambiente e as interações são de natureza dipolar magnética.

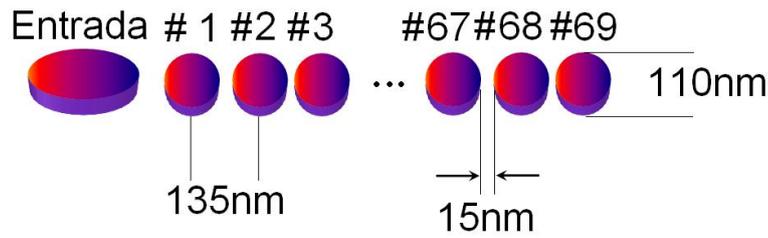


Figura 4.4: Arranjo de partículas magnéticas realizados por Cowburn e Welland para realizar operações lógicas. A estrutura consiste de 69 pontos magnéticos, formando uma cadeia, acoplados por interação magnetostática. Um ponto magnético alongado, entrada, é colocado numa das extremidade para poder inverter a direção de magnetização da cadeia

Uma rede de partículas ou pontos magnéticos acoplados por interações magnetostáticas poderia realizar operações lógicas e propagar informação. Os estados lógicos são determinados pela direção de magnetização resultante dos pontos magnéticos. Cowburn e Welland(6) foram as primeiras pessoas a realizar um MQCA - Autômato Celular Magnético Quântico. O termo quântico de MQCA é devido a interação de troca (ver capítulo 2) entre os spins dentro de cada partícula magnética. Essa interação cria um ordenamento ferromagnético. Cada ponto magnético pode ser assim tratado como um único spin, um spin gigante ou macrospin (15).

Eles demonstraram que uma estrutura que utilizava pontos magnéticos com aproximadamente 100 nm de tamanho poderia processar informação a temperatura ambiente. A estrutura era composta de 69 partículas magnéticas, formando uma cadeia, onde os pontos são circulares com 110 nm de diâmetro e 10 nm de espessura e seus centros separados por 135 nm. Uma partícula magnética alongado é colocado numa das extremidades da cadeia. Toda a estrutura é constituída de partículas de "Supermalloy" ($Ni_{80}Fe_{14}Mo_5X_1$ onde X é um metal). A figura 4.4 mostra esse arranjo.

No capítulo 2 vimos que a anisotropia de forma favorece o alinhamento dos dipolos magnéticos na direção do eixo maior. Para um conjunto de pontos magnéticos circulares

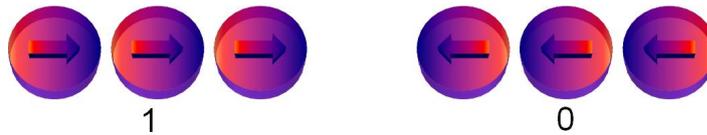


Figura 4.5: Para magnetização resultante para direita associamos o dígito 1 e direção contrária o dígito 0

esperamos que a magnetização média seja nula. Assim um campo magnético pequeno é suficiente para mudar a direção de magnetização do ponto magnético circular. Podemos ver na figura 4.4 que o ponto magnético alongado tem uma direção de magnetização fixa. O campo criado por ele é suficiente para alinhar a cadeia. O vizinho mais próximo da forma alongada assume a mesma direção de magnetização. Esse vizinho cria um campo no vizinho mais próximo, e de menor intensidade nos vizinhos mais distantes, e força-o a se alinhar na mesma direção/sentido. Ao final toda a cadeia está alinhada.

Se a cadeia de partículas magnéticas tem a magnetização resultante para direita ou esquerda os bit 1 e 0 são associados. Veja figura 4.5.

A forma alongada tem uma energia de anisotropia que o deixa estável. Sua estabilidade não é influenciada pelos pontos magnéticos circulares. Assim ele é usado para injetar um sinal numa das extremidade da cadeia. Um campo magnético oscilante é aplicado em toda a cadeia afim de inverter sua magnetização. Então podemos interpretar a forma alongada que está numa das extremidades e o campo magnético como entradas de uma porta lógica, que ainda não sabemos qual função lógica está implementada e nem como manipular.

Um pulso de campo magnético, aplicado em toda a estrutura, de ± 300 Oe (300 Oe para estado 1 e -300 Oe estado 0) é usado para iniciar a forma alongada. Após isso é aplicado em toda cadeia um campo magnético de ± 25 Oe com frequência de 30 Hz.

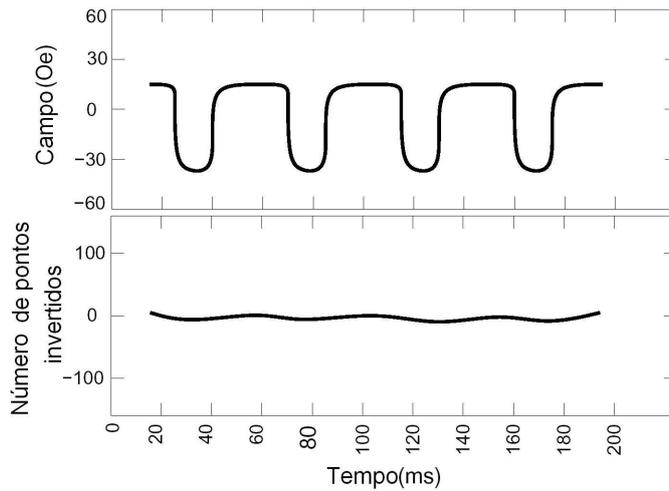


Figura 4.6: A figura superior mostra a oscilação do campo magnético aplicado na estrutura. Na figura inferior temos o sinal de saída da cadeia de partículas magnéticas mostrado na figura 4.4. Podemos concluir que o estado da cadeia está preso(6).

Para um campo de -300 Oe o estado da forma alongada é 0. Em seguida é aplicado o campo oscilante. Quando o campo oscilante estiver negativo temos que a cadeia também está no estado 0. Quando o campo passa para positivo o estado da cadeia ainda é 0, apesar do campo ser positivo. Devido a forma alongada estar no estado 0 o campo não tem valor suficiente para criar um soliton e fazê-lo propagar na cadeia e então inverter a magnetização. Assim o estado da cadeia está preso apesar da presença do campo oscilante. Veja figura inferior em 4.6(6).

Na situação oposta em que um campo na direção $+300$ Oe é aplicado para iniciar a forma longa no estado 1 toda a cadeia muda de acordo com o campo oscilante. Quando o campo magnético oscilante está positivo toda a cadeia aponta para direita. Quando o campo passa para negativo ele tem energia suficiente para criar um soliton. Com isso inverte a cadeia para o estado 0. Agora, quando o campo volta para positivo o sistema tem energia suficiente para criar um soliton logo após a forma alongada. Ao contrário da situação com a forma alongada em 0. Veja figura 4.7(6).

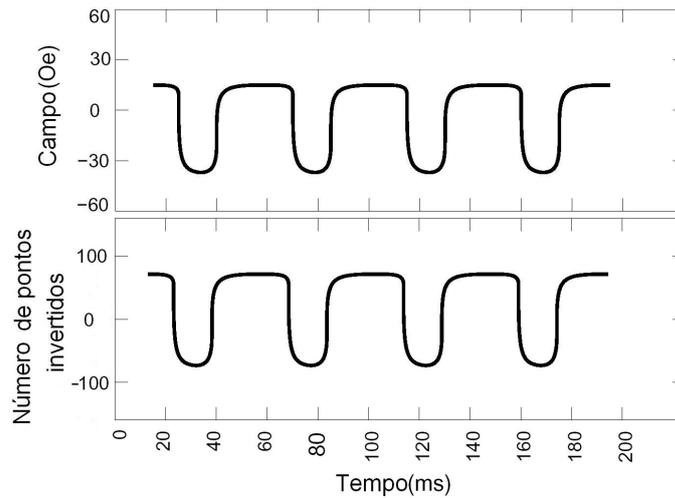


Figura 4.7: Figura superior mostra o campo oscilante aplicado na cadeia. Figura inferior mostra a resposta da cadeia quando a estrutura é inicializada no estado 1.(6)

Nas figuras 4.6 e 4.6 o sinal de entrada, ou seja, o campo oscilante de ± 25 Oe aplicado em toda cadeia está deslocado. Seus máximos e mínimos são $+15$ Oe e -35 Oe respectivamente. Supondo que a cadeia é iniciada com a lógica 1 e que o campo criado pela forma alongada no seu primeiro vizinho seja $H_{alon.}$. Quando o campo está em $+25$ Oe toda a cadeia aponta para direita, pois temos dois campos agindo nele apontando para direita. Quando ele passa para -25 Oe temos que o campo resultante aplicado na cadeia é $H_{alon.} - 25$. Assim a cadeia só terá sua magnetização invertida se essa soma for menor do que zero. Por isso o campo oscilante é deslocado.

Supomos que os pontos magnéticos circulares tivessem a capacidade de influenciar um ao outro. Assim dois pontos circulares A e B estariam com a magnetização contrária e estando próximos um do outro a magnetização total seria nula. Com um campo magnético pequeno (campo de outros pontos magnéticos) faria A e B se alinhar. Assim o soliton criado entre A e B faria um deles inverter. A energia para isso viria de um dos pontos magnéticos adjacentes. Veja figura 4.8.

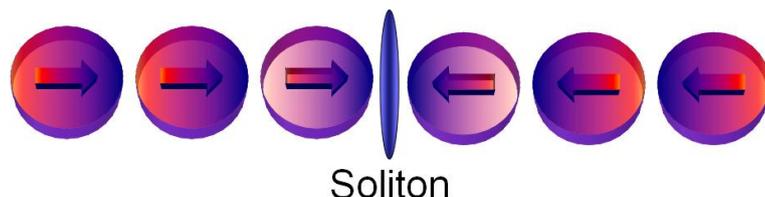


Figura 4.8: Movimento do soliton na estrutura. Análogo à parede de domínio.

Podemos dizer que a partícula alongada e o campo magnético oscilante podem ser interpretados como entradas e a direção de magnetização resultante da cadeia como saída de uma porta lógica embora não saibamos qual é a função lógica implementada. Podemos montar uma tabela verdade e verificar qual função lógica ela tem. Quando analisamos os estados de entrada e saída vemos que a estrutura se comporta como uma porta lógica AND. Veja tabela 4.4

Forma alongada	Campo magnético oscilante	Saída
0	0	0
1	0	0
0	1	0
1	1	1

Tabela 4.3: Tabela Verdade AND.

A grande vantagem que MQCA traz é a capacidade de um QCA (Autômato Celular Quântico) funcionar a temperatura ambiente. Isso é uma grande vantagem sobre EQCA. Mas ao contrário de EQCA os pontos magnéticos não apresentam individualmente dupla estabilidade, sendo então alcançada somente através de interação magnetostática entre eles.

O baixo consumo de energia é outra característica importante de MQCA. Em princípio a propagação do soliton é realizada sem perda. Assim o processo lógico deve ocorrer sem dissipação de energia. Na prática, devido a uma leve variação na forma dos pontos

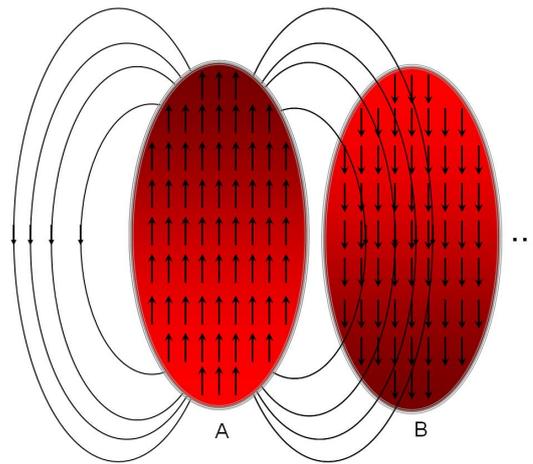


Figura 4.9: Interação entre dois pontos magnéticos. A interação gera um ordenamento anti-ferromagnético.

magnéticos circulares leva uma flutuação da energia de anisotropia, o que causa dissipação de energia pelo soliton.

4.5 Porta Lógica Universal MQCA

No capítulo 1 - Nanomagnetismo - na seção Superparamagnetismo foi mostrado que uma estrutura magnética em escala nanométrica pode apresentar essencialmente energia de anisotropia de forma. Essa anisotropia de forma está presente, por exemplo, na partícula ou ponto magnético alongado da seção anterior.

No MQCA mostramos seu funcionamento lógico. O ponto magnético alongado na rede é fundamental para a estrutura realizar a função lógica AND. Sua anisotropia de forma favorece uma magnetização na direção do seu eixo maior. Podemos alinhar vários pontos magnéticos de forma que os eixos maiores fiquem paralelos. Veja figura 5.3, onde podemos ver que a interação entre os pontos magnéticos é basicamente dipolar.

Imre e colaboradores construíram uma estrutura formada de partículas magnéticas semelhantes ao da figura 5.3 de forma a propagar a informação magnética. As partículas

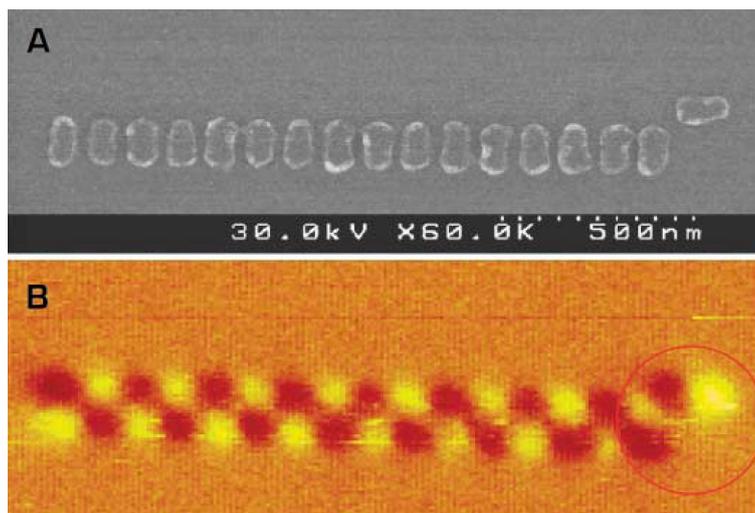


Figura 4.10: Figura superior mostra uma imagem de microscopia de força atômica e a figura inferior mostra uma imagem por MFM de uma cadeia de pontos magnéticos de dimensões 70, 135 e 30 nm separados por 30 nm. A imagem mostra o alinhamento anti-ferromagnético(13).

magnéticas têm dimensões 70, 135 e 30 nm separados por 30 nm e alinhados horizontalmente. Veja figura 4.10. Nessa figura, obtida por microscopia de força magnética, podemos ver o alinhamento anti-paralelo entre as magnetizações das partículas. É possível transportar a informação pela cadeia simplesmente invertendo a direção de magnetização do ponto magnético que está na horizontal circulado a direita da figura 4.10. A direção dele é mudada com a aplicação de um campo magnético na horizontal, isto é, na direção paralela ao eixo da cadeia.

Além da estrutura que transporta informação Imre e colaboradores construíram uma estrutura baseada de pontos magnéticos alongados que realiza as operações lógicas NAND e NOR, que são fundamentais em computação. A estrutura consiste de duas linhas de pontos magnéticos que se cruzam. A interação dipolar cria um ordenamento paralelo na vertical e anti-paralelo na horizontal. Veja figura 4.11, onde a extremidade escuro (claro) indica a direção positiva (negativa) da magnetização. O controle das entradas é realizado

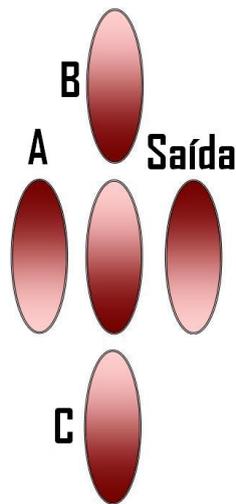


Figura 4.11: Organização espacial proposta por Imre e colaboradores para uma porta lógica universal magnética.

por pontos magnéticos alongados colocados nas proximidades delas de maneira que mude a direção de magnetização.

Um campo magnético é aplicado na horizontal em todo material. Por um acoplamento dipolar entre as entradas e os pontos magnéticos colocados em suas proximidades elas, as entradas, têm uma determinada direção. Se fixada a direção da entrada A e é realizada todas as mudanças possíveis das outras, a estrutura terá um funcionamento NAND ou NOR, onde assumimos as codificações  1 e 0 respectivamente. Veja figura 4.12.

Da figura 4.12 podemos montar uma tabela verdade. Se A está fixado em 0 e 1 a estrutura funciona como uma porta lógica NAND e NOR, respectivamente. Veja tabela 4.5.

Imre e colaboradores encontraram cerca de 40 por cento das estruturas construídas assumiam a orientação correta. Isso demonstra que o resultado obtido por não é aleatório. O tempo mínimo necessário para que os oito pontos magnéticos assumam a orientação correta é da ordem de 100 ps.

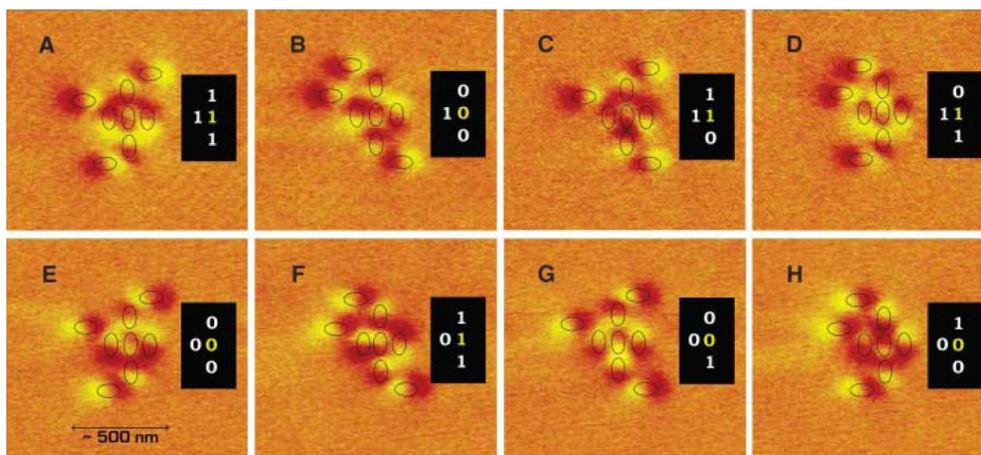


Figura 4.12: Imagem MFM do funcionamento da porta lógica universal proposta por Imre e colaboradores. A até D um campo magnético aplicado horizontalmente para direita e E até H é aplicado para mudar as entradas(13).

A	B	C	Saída
0	0	0	0
0	1	0	0
0	0	1	0
0	1	1	1
1	0	0	0
1	1	0	1
1	0	1	1
1	1	1	1

Tabela 4.4: Tabela Verdade da porta lógica universal. Tabela superior para AND e inferior para OR

4.6 Método Monte Carlo

As portas lógicas apresentadas até aqui são muitas vezes estudadas através de simulações computacionais, e uma maneira de se fazer essas simulações é utilizando o Método Monte Carlo.

Na presente seção abordaremos alguns conceitos do Método Monte Carlo. O método consiste em escolher as configurações mais representativas de um sistema físico em equilíbrio afim de calcular a média de algumas variáveis de interesse.

4.6.1 Introdução

Muitos sistemas físicos estudados não estão isolados, eles trocam calor com o ambiente. O ambiente age como um reservatório de calor, onde uma variação na temperatura do sistema físico em questão não afeta o reservatório pelo simples fato de que o ambiente tem muito mais energia que o sistema físico.

Como o sistema físico está trocando calor com o reservatório a energia dele irá oscilar. Necessitamos calcular médias, por exemplo da energia,

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^N E_i e^{-\beta E_i} \quad (4.1)$$

onde Z é a função de partição e $\beta = \frac{1}{kT}$. A soma é realizada sobre todas as configurações microscópicas do sistema com a energia E . A utilização do método Monte Carlo para o cálculo dessa média se justifica quando o sistema apresenta um número de partículas muito grande. Por exemplo: o número de microestados acessíveis para um sistema de N partículas onde cada partícula pode assumir estados energéticos distintos é 2^N .

4.6.2 Equação Mestra

Um evento inicial qualquer y_i no tempo t_i a probabilidade de ocorrência do evento y_f no tempo t_f é $P(y_f, t_f; y_i, t_i)$ dado pela equação Chapman-Kolmogorov (Para mais detalhes ver apêndice)

$$P(y_f, t_f; y_i, t_i) = \sum_k P(y_f, t_f; y_k, t_k) P(y_k, t_k; y_i, t_i), \quad (4.2)$$

onde k indica os eventos intermediários entre y_f e y_i no intervalo de tempo $\Delta t = t_f - t_i$.

Calculando a derivada parcial com respeito ao tempo, temos,

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \sum_k P(y', t) w(y' \rightarrow y) - P(y, t) w(y \rightarrow y') \quad (4.3)$$

onde $w(y' \rightarrow y)$ é a probabilidade por unidade de tempo de que o sistema muda do estado y' para o estado y . A equação 4.3 é chamada de equação mestra. Retornaremos a ela mais adiante.

4.6.3 Método Monte Carlo

Na introdução desse capítulo foi dito que o método Monte Carlo consiste em realizar uma média de uma variável de interesse de um sistema de muitas partículas. Média essa que utilizava as configurações de equilíbrio que mais representava o sistema.

Explicaremos nessa seção como obter as configurações representativas do sistema. Algumas configurações podem ao início não representar ou estar longe da configuração real do sistema. Mas o processo de escolha das configurações imposto pelo método obriga que após um certo tempo as configurações do sistema tendam ao equilíbrio.

Quando sistema está evoluindo em direção ao estado de equilíbrio qualquer uma das probabilidades dos estados intermediários se modifica. Mas ao assumir um estado estacionário a probabilidade não deve variar mais com o tempo. Assim, a probabilidade $P(y, t)$ não pode depender explicitamente do tempo, ou seja,

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = 0, \quad (4.4)$$

na situação de equilíbrio. Da equação mestra temos que,

$$P(y', t)w(y' \rightarrow y) = P(y, t)w(y \rightarrow y') \quad (4.5)$$

para quaisquer estados y' e y . Essa é um *condição suficiente* para o equilíbrio. A equação 4.5 é chamada de *princípio do balanço detalhado*.

Mas sabemos da mecânica estatística que no equilíbrio as probabilidades devem tender

para valores das probabilidades de Gibbs,

$$P(y', t \rightarrow \infty) = P_G(y) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(y)}, \quad (4.6)$$

onde Z é a função canônica de partição. Da equação do balanço detalhado 4.5 temos,

$$\frac{w(y \rightarrow y')}{w(y' \rightarrow y)} = e^{-\beta \Delta E}, \quad (4.7)$$

onde ΔE é a diferença de energia entre os estados y' e y .

Sumário

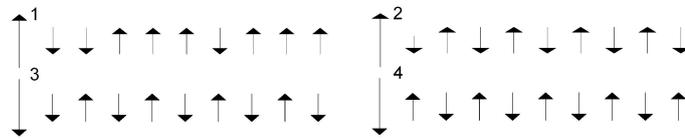
Para gerar as configurações representativas do sistemas devemos seguir os seguintes passos, tal como um algoritmo,

1. Escolher uma configuração inicial qualquer.
2. Fazer uma escolha aleatória ou sequencial de uma partícula do sistema e modificar sua energia, ou seja, $x_i = x_i + \delta x$. Onde δx é um número aleatório no intervalo $[-\delta, \delta]$.
3. Calcular $w = e^{-\beta \Delta E}$.
4. Se $w \geq 1$ aceitar a mudança efetuado na partícula.
5. Se $w < 1$ gerar um número aleatório r .
6. Se $r \geq w$ aceitar a mudança na partícula.
7. Se a mudança na partícula não for aceita voltar com as condições iniciais dela, ie, número 1

Desprezando as configurações iniciais, que ainda representam a evolução do sistema numa configuração fora do equilíbrio. Se pegarmos as configurações finais podemos assim calcular a média da variável de interesse.

Capítulo 5

Resultados



Este capítulo destina-se a apresentar os resultados de nossas simulações. Simulações utilizando o método Monte Carlo . Portas lógicas TRANSFER, NAND, NOR, entre outras, com uso de elementos magnéticos, são alguns desses resultados.

5.1 Introdução

No capítulo 2 foram apresentados os conceitos básicos sobre as interações entre momentos magnéticos, que podem ser expresso pelo seguinte hamiltoniano,

$$H_{total} = H_{Zeeman} + H_{Magn.} + H_{Troca} + H_{Anis.cris.} \quad (5.1)$$

Como foi dito anteriormente, a variação dos termos desse hamiltoniano leva a uma variedade de propriedades interessantes. Foram também apresentadas algumas delas, tais como superparamagnetismo, magnetização bloqueada e efeito Zeeman. Uma pergunta que agora podemos fazer é: Como utilizar as interações para construir uma porta lógica?

O primeiro termo do hamiltoniano, a energia de Zeeman, tem seu comportamento resumido em 2 processos,

- Uma pequena partícula exposta a um campo magnético tem seu dipolo magnético alinhado na forma paralela ou anti-paralela.
- Ao se retirar o campo, os dipolos magnéticos podem ou não ¹ voltar a sua configuração inicial.

Um outro termo, a energia magnetostática possui dois termos. O primeiro gera um alinhamento anti-paralelo para minimizar a energia. O segundo, depende da forma do material, pois há um produto escalar do momento magnético com a distância entre dois momentos interagentes.

Em seguida, o termo de troca tem várias configurações. Depende de J , da dimensionalidade do sistema e depende do número de componentes que possuem os spins. Um dos casos mais comuns e simples é uma rede unidimensional de spins alinhados, onde estes têm uma única componente S_z positiva ou negativa. Veja figura 5.1.

Considere um material com estrutura cristalina que favoreça o alinhamento de seus momentos magnéticos paralelo ou anti-paralelo ao eixo de anisotropia, veja figura 5.2. Além disso, se a partícula magnética tivesse a forma que é mostrado na figura 5.2, o termo de energia de forma obrigaria a magnetização a ter componentes nas direções \pm do eixo maior.

Podemos resumir de forma a favorecer a construção de uma porta lógica nas seguintes etapas.

¹Para voltar ao seu estado inicial depende do material. Veja apêndice para mais detalhes

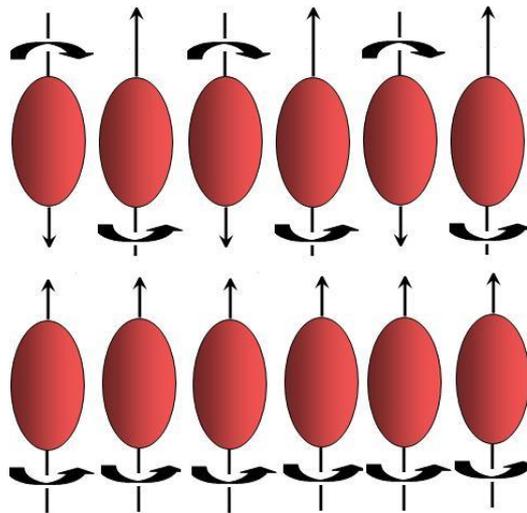


Figura 5.1: O mínimo de energia ocorre com dois ordenamentos. Para $J > 0$, os spins estão paralelos, chamado de fase ferromagnética. Para $J < 0$, eles estão antiparalelos, denominado de fase anti-ferromagnética.

- Material com a forma geométrica conforme mostrado na figura 5.2.
- Energia de anisotropia cristalina com alinhamento de seu momento magnético paralelo ou antiparalelo ao eixo de anisotropia.
- $J > 0$.

Se colocarmos duas partículas desse tipo lado a lado e próximas, teremos um acoplamento entre elas. De acordo com a figura 5.2 vemos que o campo magnético criado por uma das partículas age de maneira a forçar a outra estrutura a ter uma magnetização anti-paralela. Veja figura 5.3. Pela figura 5.3 observamos que: A é a entrada de uma porta lógica e B é a saída. Temos assim uma porta lógica de transporte de informação, chamada de "transfer". Investigamos propriedades físicas de materiais magnéticos por simulações com o método Monte Carlo, onde encontramos resultados de acordo com algumas simulações já realizadas e resultados compatíveis com experimentos. Neste estudo foi utilizado o algoritmo Metropolis.

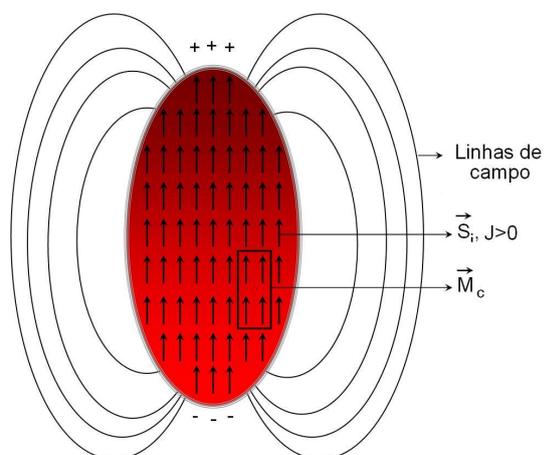


Figura 5.2: Estrutura proposta para uma material que poderia ser utilizado para construir uma porta lógica

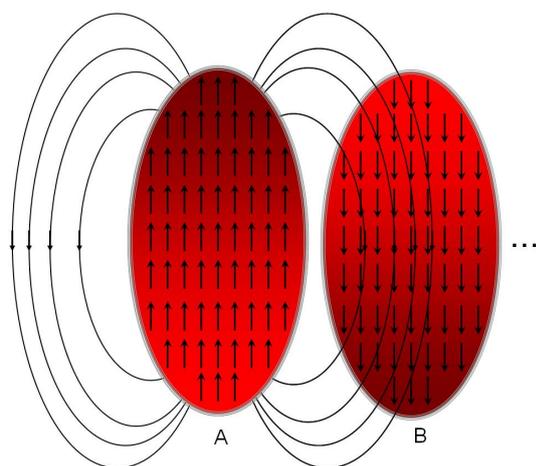


Figura 5.3: Interação entre dois materiais apresentados na figura 5.2. A interação gera um ordenamento anti-ferromagnético.

A idéia básica do método Monte Carlo é que não há necessidade de fazer a média de uma variável sobre todos os microestados do sistema. E sim, fazer a média da variável utilizando as grandezas que melhor representam o sistema. Uma média devidamente selecionada.

Para obter as grandezas representativas de um sistema magnético com o hamiltoniano mostrado na Eq 5.6 temos as seguintes etapas.

1- Escolher uma configuração inicial para os momentos magnéticos.

2- Escolher uma partícula aleatoriamente do sistema. Calcular $\Delta E = E_f - E_i$, que é a variação da energia devido a mudança de magnetização associada a mudança na direção dessa partícula da rede.

3- Se $\Delta E > 0$, fazer $r < e^{-\beta\Delta E}$, onde r é um número aleatório, entre 0 e 1, e aceitar a nova configuração somente nesse caso.

Desprezando as grandezas iniciais que correspondem a escolha da configuração inicial, ou seja, estamos interessados nas grandezas após o sistema entrar em equilíbrio. Isso garante que teremos grandezas representativas do sistema. Podemos assim calcular a média da variável de interesse.

5.2 Transporte de Informação

Como se poderia transportar uma informação de um ponto a outro utilizando o hamiltoniano 5.6? Na introdução fizemos uma simplificação dele para construir uma porta lógica e podemos simplificar um pouco mais. Tomamos somente a parte de energia de troca e podemos contruir uma porta lógica que transporta informação.

Um modelo de porta lógica simples é a porta que transporta informação de um ponto



Figura 5.4: Transporte da informação $+1$ do primeiro spin numa rede de spin 1D. Figura esquerda corresponde ao estado inicial e direita ao final no mínimo de energia do sistema.



Figura 5.5: Informação -1 transportada numa rede 1D de spin. Lado esquerdo representa o estado inicial e direito o estado final do sistema que corresponde ao mínimo de energia.

x até um ponto y que é constituída de uma estrutura formada por momentos magnéticos alinhados, onde o primeiro momento terá seu estado controlado, ou seja, será a entrada da porta lógica. Assim, fizemos uma configuração inicial aleatória de ± 1 para os momentos da rede, mas o primeiro spin é mantido fixo na evolução do sistema para um mínimo de energia. Ao final, vemos que a informação do primeiro spin é transportada pela rede. Veja figura 5.4, onde a esquerda corresponde a uma configuração inicial aleatória com o primeiro spin fixo na direção $+1$. A figura a direita é o estado de menor energia para o sistema, mostrando o transporte de informação. O mesmo acontece se invertemos a direção do primeiro momento, passando para -1 e repetindo o processo. Novamente a informação é transportada.

Nas figuras 5.4 e 5.5 acima, vemos que a informação foi transportada. Para cada mudança na direção do primeiro momento um novo microestado é sorteado. Depois o sistema evolui para um mínimo de energia. Uma questão interessante: a informação é transportada se o sistema estivesse em um mínimo de energia e a entrada fosse mudada?

Ao fazer a mudança do primeiro momento no final, ou seja, depois que o sistema

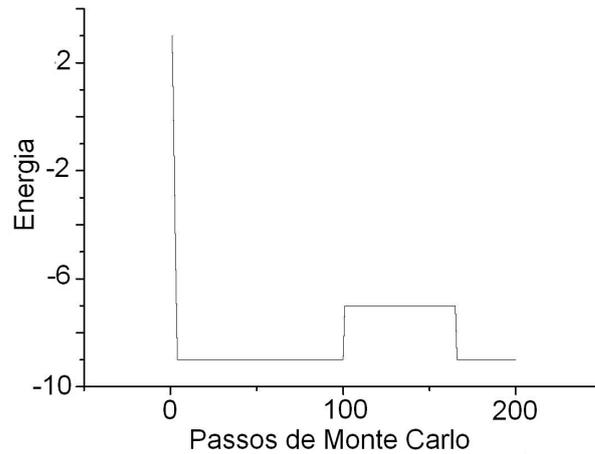


Figura 5.6: Gráfico de energia por tempo de Monte Carlo, mostrando que o sistema evolui para o mínimo de energia após mudar o primeiro spin.

alcançou um mínimo de energia, a nova energia do sistema é superior a energia final. Assim o sistema terá de evoluir para o mínimo de energia novamente, ou seja, o sistema terá que perder $\Delta H = 2J\vec{S}_1 \cdot (\vec{S}_e + \vec{S}_d)$ (ver apêndice A), onde \vec{S}_e e \vec{S}_d correspondem aos primeiros vizinhos de \vec{S}_1 , ver gráfico 5.6.

O aumento da energia próximo de 100 passos de Monte Carlo (figura 5.6) representa a mudança do primeiro momento depois que o sistema já está num mínimo de energia. Após assumir a nova energia o sistema evolui para o mínimo de energia novamente. É interessante observar a estabilidade de tal sistema em preservar seu estado de equilíbrio, e por sua vez, a informação é armazenada.

5.3 Confiabilidade

O funcionamento de uma porta lógica pode depender também da temperatura. Nas etapas descritas para o modelo de Ising, para se obter as grandezas que melhor repretentam o

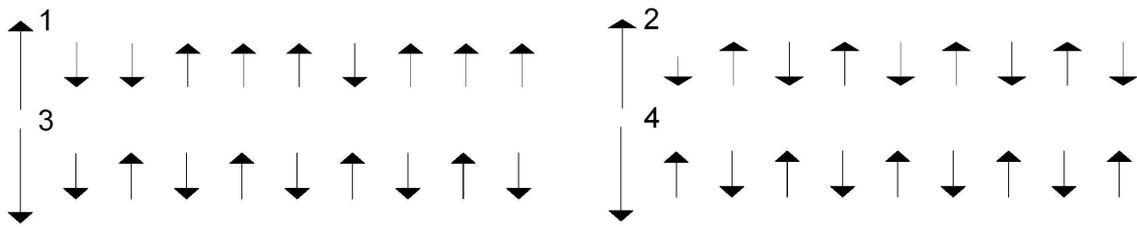


Figura 5.7: Figura superior esquerda corresponde a configuração inicial. Superior a direita representa a primeira evolução do sistema para o mínimo de energia. Inferior a esquerda mostra a mudança do primeiro spin com o sistema no mínimo de energia. Inferior a direita é a nova configuração do sistema no mínimo de energia novamente.

sistema, temos que na terceira etapa aparece uma expressão dependente da temperatura,

$$r < e^{-\beta\Delta E}, \quad (5.2)$$

onde r é um número aleatório, $\beta = \frac{1}{k_b T}$ e ΔE é a variação da energia considerando um outro momento da rede. Dessa expressão vemos que a dependência com T é um fator importante para o bom funcionamento de uma porta lógica.

Se $T \rightarrow 0$ então $e^{-\beta\Delta E} \rightarrow 0$, há sempre um r aleatório que faça o sistema mudar de configuração. Assim o sistema alcança um mínimo de energia.

Se $T \rightarrow$ "grande" então $e^{-\beta\Delta E} \rightarrow 1$ e r provavelmente mudará a cada passo de Monte Carlo, ou seja, o sistema não encontrará um mínimo de energia.

Para um bom funcionamento T deve ser menor que a barreira de energia que separa os estado $+1$ e -1 . Assim podemos definir uma variável que fornece o quão confiável é uma porta lógica, ou seja, o quão frequente a resposta correta é encontrada.

Quando realizamos uma simulação uma condição inicial é escolhida e depois é deixado o sistema evoluir em direção a um mínimo de energia, ou alguma estabilidade já que o sistema não alcança o mínimo quando $T \rightarrow$ "grande". A configuração final não necessariamente corresponde a configuração esperada para a porta lógica em questão.

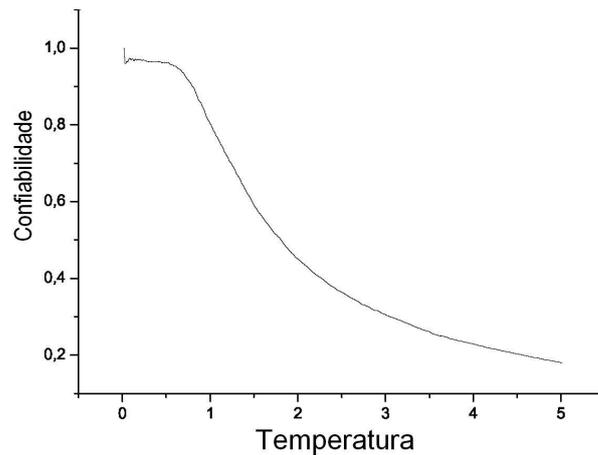


Figura 5.8: Gráfico de Confabilidade por temperatura para condições iniciais aleatórias.

Se realizarmos a simulação várias vezes para uma mesma temperatura e contarmos quantas vezes a saída foi correta e quantas vezes saiu errado, podemos calcular o grau de confiança da porta lógica.

$$\text{Confabilidade} = \frac{\text{Número de saídas certas} - \text{Número de saídas erradas}}{\text{Número total de testes}} \quad (5.3)$$

Esse processo é repetido para cada temperatura, e assim para cada temperatura, vários estados iniciais são sorteados e o sistema é deixado evoluir para um mínimo de energia, em cada um desses estados. É feita assim uma estatística do funcionamento da porta para uma dada temperatura. Podemos então fazer um gráfico do quão confiável é uma porta lógica em função da temperatura, veja a figura 5.8.

A figura 5.8 foi obtida utilizando a equação 5.3 onde as condições iniciais são aleatórias. Pode também se fazer para estados iniciais onde os momentos têm a mesma direção. Isso corresponderia a casos em que o material tem seus momentos iniciados (ou orientados) via campo magnético. Temos ainda outro caso interessante. Uma configuração inicial é escolhida com o sistema já no mínimo de energia, para uma certa temperatura. Em seguida

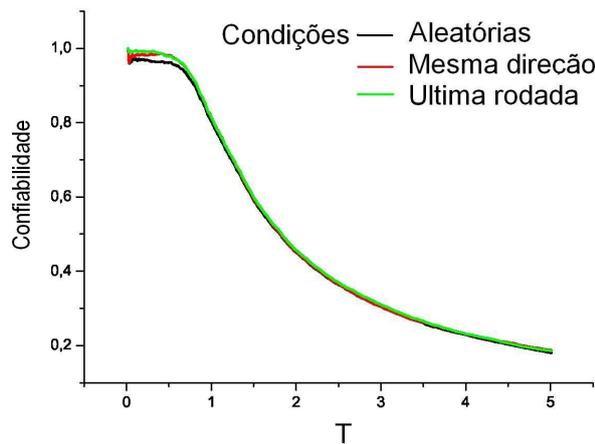


Figura 5.9: Gráfico realizado a partir da equação 5.3. Onde as condições iniciais são: aleatórias, mesma direção para todos os spins e estado inicial de uma nova rodada corresponde ao estado final da última rodada.

a primeiro momento é invertido e então o sistema evolui novamente para o mínimo de energia, e isso é realizado várias vezes para podermos usar a equação 5.3. E para cada temperatura. Isso corresponde ao funcionamento propriamente dito, onde a entrada é a configuração da simulação anterior. Utilizando a equação (5.3) para os três casos ditos acima obtemos a figura 5.9.

Podemos ver pela figura 5.9 que a confiabilidade não é 1 quando $T \rightarrow 0$. Isso é devido ao tempo de simulação, ou seja, passos Monte Carlo dado para o sistema evoluir para o mínimo de energia. Retornaremos a essa questão na próxima seção.

5.4 Portas Lógicas NAND e NOR

Baseado na configuração da porta lógica universal apresentada no capítulo 3 e também na porta lógica "transfer" apresentada na seção anterior, realizamos a simulação de uma porta lógica universal.

Como na seção anterior alinhamos um grupo de momentos, seus estados são ± 1 .

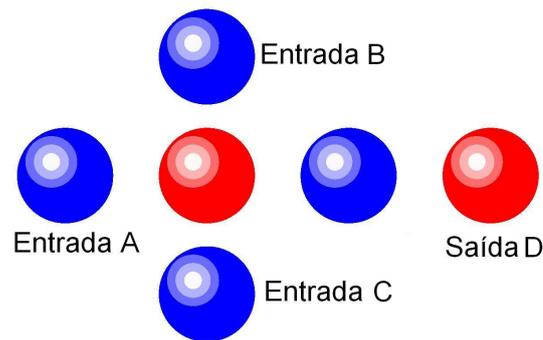


Figura 5.10: Porta lógica universal realizada pelo método Monte Carlo. Onde a bola azul indica bit +1 e a vermelha bit -1.

O primeiro momento da rede é fixo numa da direção e vimos que sua informação era transportada. Mas e se o último spin também fosse fixo?

Suponhamos a porta lógica "transfer" onde o último spin também é fixo, ou seja, as extremidades são fixas. Veja por exemplo a figura 5.10. Suponhamos também que entre as extremidades há somente 1 momento magnético. Para uma dada configuração das extremidades qual é a direção do momento do centro? Assim baseado na porta lógica universal temos a configuração que além de responder a essa pergunta cria uma estrutura lógica fundamental em computação. Veja figura 5.10.

Observando a figura 5.10 podemos saber qual tipo de função lógica está implementada nela. Fixando a entrada que caracteriza a porta, entrada A, em azul, mostramos na figura 5.11 que essa porta se comporta como NOR, fixada a entrada A em vermelha a função lógica desempenhada é NAND. As entradas variáveis são as bolas B e C. Para cada mudança nas portas uma nova configuração aleatória é estabelecida. Após isso o sistema evolui para um mínimo de energia.

A configuração final estabelecida em cada caso, ou seja, para cada entrada é garantida manter-se nesse estado pois o sistema encontra-se numa configuração de mínimo de

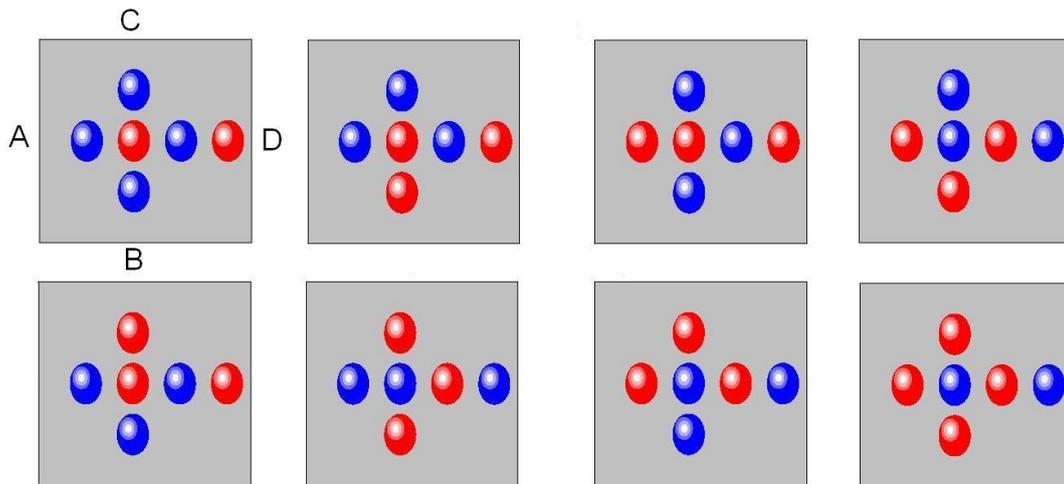


Figura 5.11: Figura da esquerda representa uma porta lógica NOR e da direita uma NAND.

	A	B	C	Saída
1	0	1	1	0
1	0	0	1	1
1	0	1	0	1
1	0	0	0	1

Tabela 5.1: Tabela Verdade "NOR" e "NAND".

energia. Assim para cada configuração mostrada o sistema formado de momentos iniciais aleatórios, exceto as portas, evolui para um estado de mínimo de energia. Para cada configuração, o mínimo de energia constitui a configuração mostrada acima.

Um exemplo mostrando a evolução da energia do sistema em função do número de passos Monte Carlo é mostrado na figura 5.12. Sendo que na figura 5.12 a esquerda corresponde a evolução da energia para a configuração da porta mostrada na figura 5.11 a esquerda. A figura 5.12 a direita é a evolução da energia, mas para uma rede de momentos constituída de 2500 spins. Vemos que a queda, ou evolução abrupta, da energia para as configurações da porta lógica é devido a quantidade de spins na simulação.

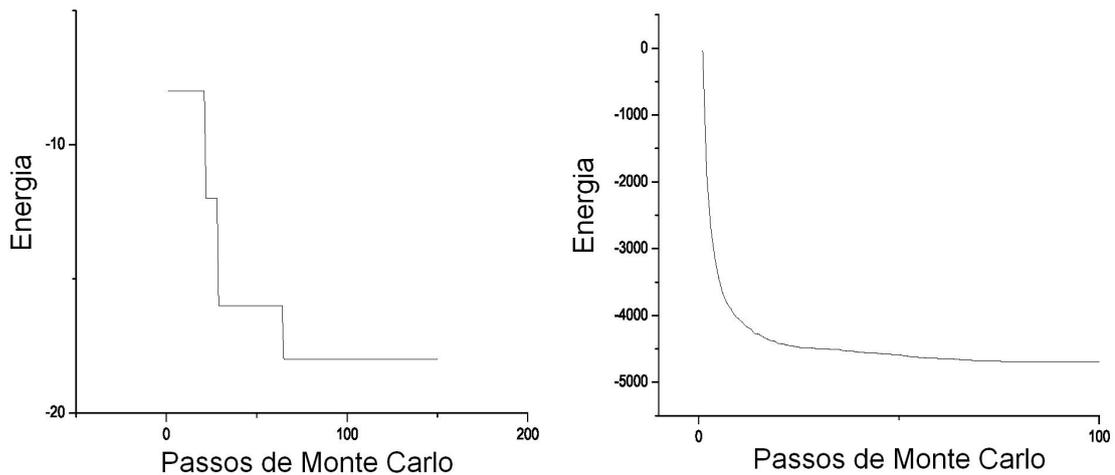


Figura 5.12: Gráfico de energia em função do número de passos Monte Carlo. A esquerda para a porta lógica NOR com 6 momentos e a direita com 2500 momentos.

5.4.1 Confiabilidade

Podemos calcular a confiabilidade das portas lógicas NAND e NOR apresentadas acima. Utilizando a equação 5.3 podemos realizar várias simulações com as mesmas condições iniciais e para uma mesma temperatura. Contamos quantas vezes a saída foi correta e quantas vezes foi errada. Podemos assim ter uma estimativa, ou seja, grau de confiança da porta lógica.

O procedimento é o mesmo realizado na seção 6.3. Utilizando as portas lógicas NAND ou NOR obtemos a figura 5.13.

Da figura 5.13 temos que a confiabilidade do gráfico a esquerda é menor que 1 para T pequeno. Mas o que se espera é o máximo de funcionamento para T pequeno, como mostrado no gráfico da direita. A diferença entre eles está no número de passos Monte Carlo dado para o sistema evoluir em direção ao mínimo de energia. Para o gráfico a esquerda esse tempo foi maior. Percebemos então que existe uma dependência da confiabilidade com o número de passos Monte Carlo.

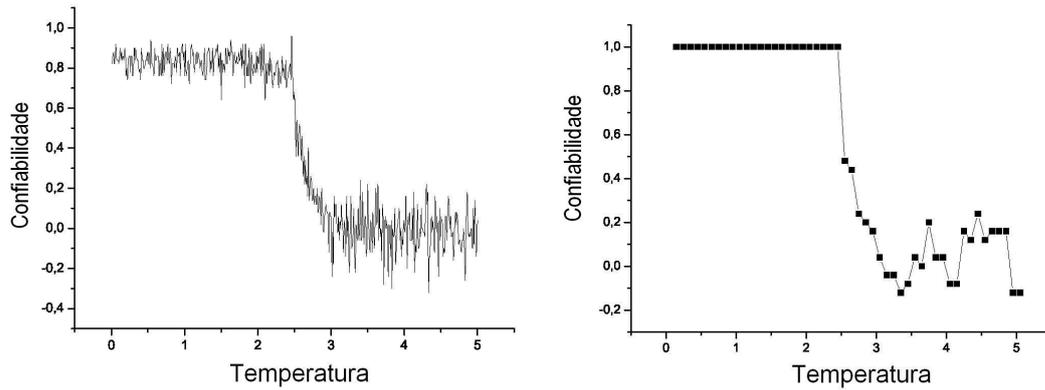


Figura 5.13: Os gráficos acima mostram a grau de confiança da porta NOR. A diferença entre eles é o número de passos Monte Carlo que para o gráfico da direita é maior.

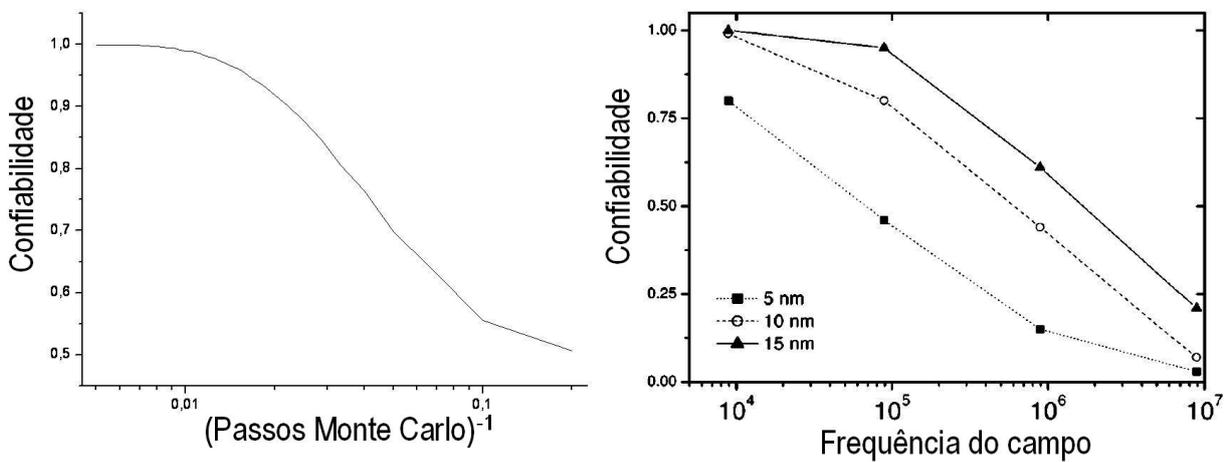


Figura 5.14: O gráfico de Média Confiabilidade por $(\text{Número de passos Monte Carlo})^{-1}$. O gráfico a esquerda é o resultado de nossas simulações. Direita mostramos um resultado encontrado na literatura (8).

Para cada tempo dado para o sistema evoluir em direção ao mínimo de energia tira-se uma média de confiabilidade no intervalo de temperatura (0,2). Onde o tempo é dado em ordem crescente. Na figura 5.13 a média é basicamente realizada antes da queda abrupta (próximo de 2.5) de confiabilidade. Assim, temos a figura 5.14.

Na figura 5.14 o número de vizinhos interagentes $k = 1$. Procedendo da mesma maneira para k 's diferentes temos a figura 5.15

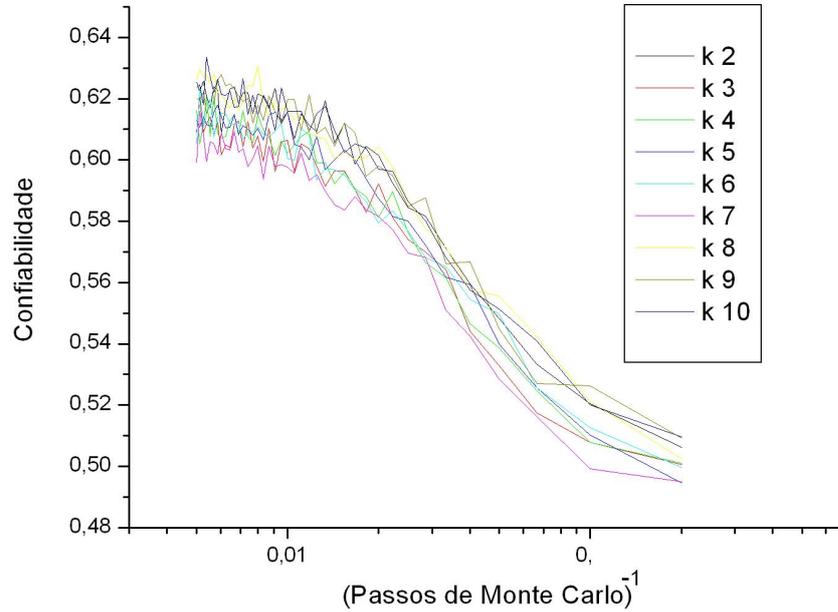


Figura 5.15: Gráfico de média Confiabilidade por $(\text{Passos de Monte Carlo})^{-1}$. K apresenta o número de vizinhos interagentes

5.5 Porta Lógica NOT

Nas seções anteriores apresentamos uma introdução de como contruir uma porta lógica utilizando a interação dipolar entre as partículas magnéticas. Explicamos alguns termos dele de maneira a favorecer a construção de uma porta lógica. Fizemos algumas simplificações e conseguimos construir as portas lógicas TRANSFER, NAND e NOR e apresentamos alguns resultados. Em TRANSFER a simulação se restringe ao modelo de Ising 1D ou o primeiro termo da energia magnetostática. Para NAND e NOR utilizamos o modelo de Ising 2D.

Vamos agora utilizar um outro sistema em que a interação é dada pelo hamiltoniano.

$$H_{total} = -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_k + \sum_{i,j} \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{r_{i,j}} - 3 \frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{i,j})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{i,j})}{r_{i,j}} \quad (5.4)$$

O primeiro termo para $J > 0$ estabelece um ordenamento paralelo já, o segundo termo

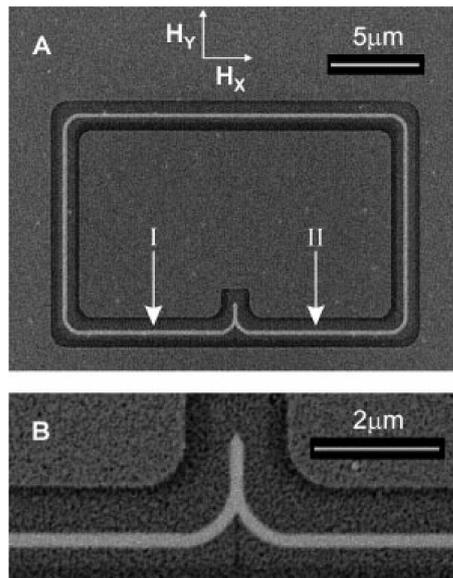


Figura 5.16: Esquema de uma porta lógica NOT. Figura A é a imagem de um anel magnético incluindo a junção NOT. H_x e H_y são as componentes do campo magnético utilizado para mover a parede de domínio (3).

produz um acoplamento anti-paralelo. O terceiro depende da forma pois há um produto escalar entre momento magnético e a distância entre os dois momentos. Baseado nos artigos (3) e (12) (veja figura 5.16 extraídas do primeiro referência) vemos que o terceiro termo da hamiltoniana torna-se importante (veja apêndice para mais detalhes do termo de que depende da forma). Realizamos a simulação da porta lógica NOT apresentado nessas referências. Utilizamos o modelo xy onde as componentes x e y dos momentos podem ser quaisquer (desde que o módulo do momento seja unitário).

O sistema é formado por 280 partículas com a interação dipolar restrita ao segundo vizinho. Veja figura 5.17 que mostra a porta lógica NOT com uma configuração qualquer de seus momentos. Escolhemos as três primeiras filas a esquerda como entrada da porta lógica. A evolução do sistema para um mínimo de energia é realizado utilizando novamente o Método Monte Carlo.

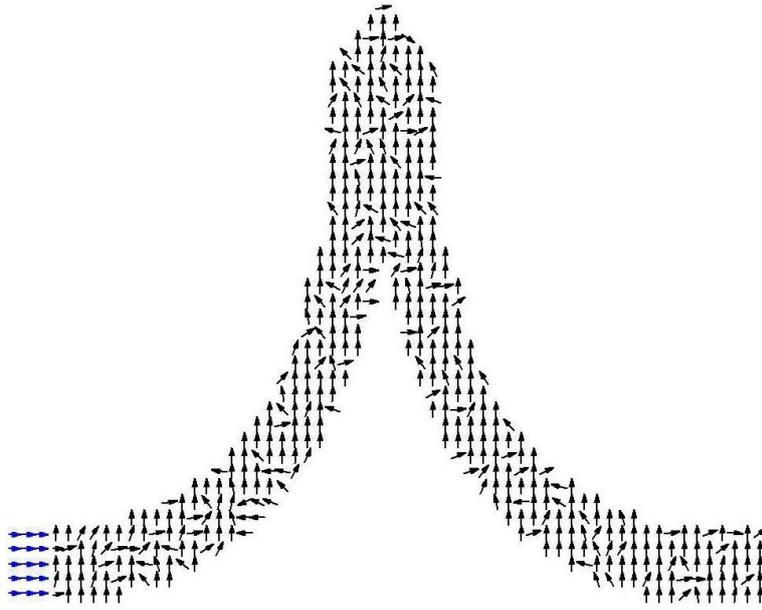


Figura 5.17: Estrutura da porta lógica NOT simulada. As três primeira filas a esquerda foram utilizadas como entrada.

Partindo de um configuração onde todos os momentos estão apontando para cima, vemos que após o sistema evoluir para um mínimo de energia encontramos uma parede de domínio, como podemos ver pela figura 5.18 b. Como foi feito nos artigos (3) e (12) um campo magnético é indispensável para o deslocamento da parede de domínio. Portanto o hamiltoniano 5.4 passa e ser,

$$H_{total} = -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_k + \sum_{i,j} \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{r_{i,j}} - 3 \frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{i,j})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{i,j})}{r_{i,j}^3} - \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{B}_{ex}, \quad (5.5)$$

onde \vec{B}_{ex} é o campo magnético externo.

Logo após o sistema entrar em equilíbrio, figura 5.18 b aplicamos o campo. Inicialmente aplicamos o campo apontando para esquerda e deixamos o sistema entrar em equilíbrio novamente, figura 5.19 b. Até aqui nós apenas preparamos o sistema.

Em seguida invertemos a magnetização da entrada, as três primeiras filas. Continuamos aplicando o campo para esquerda até chegarmos a um novo mimíno local, figura 5.20

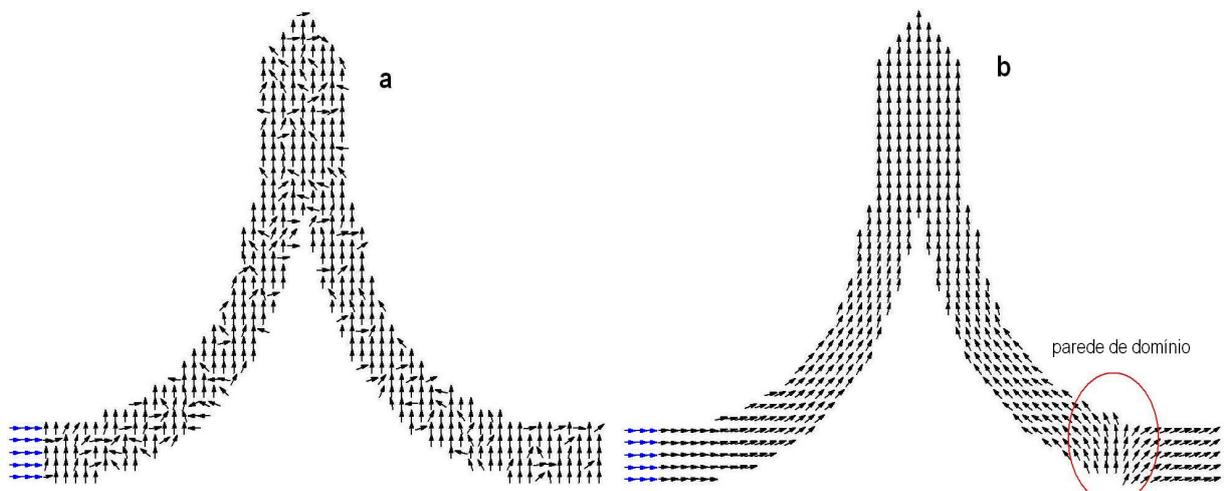


Figura 5.18: Figura mostrando porta lógica NOT. A esquerda temos a configuração inicial onde na média os momentos estão apontando para cima e a direita a configuração depois que o sistema alcançou o mínimo de energia.

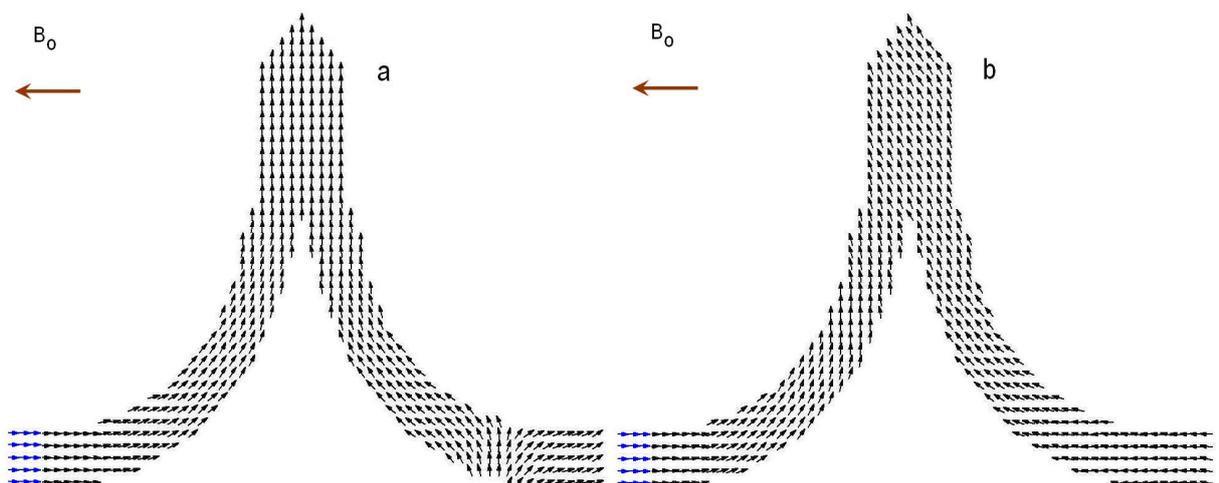


Figura 5.19: Início da simulação do função lógica NOT.

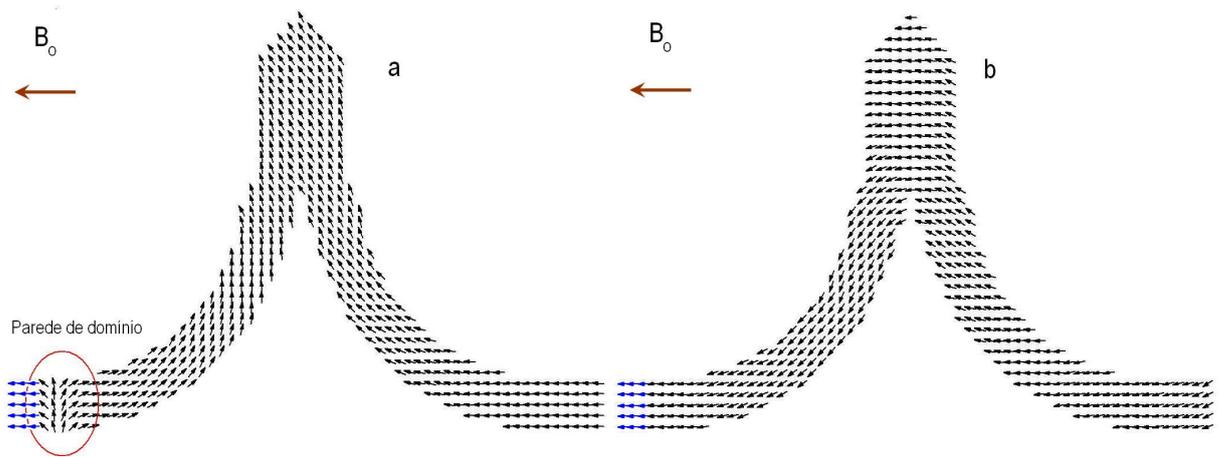


Figura 5.20: .

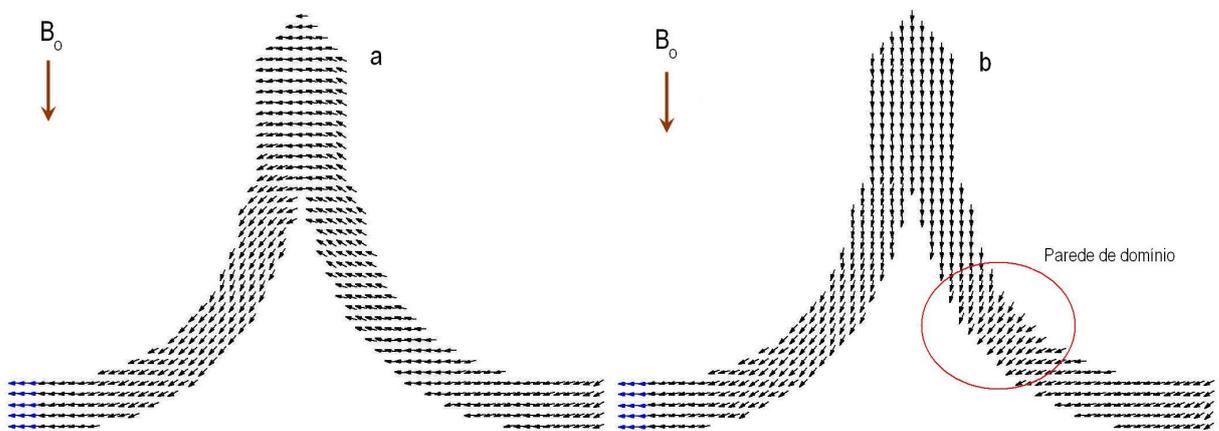


Figura 5.21: .

b. Em seguida aplicamos um campo orientado para baixo para que a parede de domínio possa continuar se movendo pela estrutura. 5.21 a.

Após o sistema entrar em equilíbrio com o campo orientado para baixo 5.21 b vemos que a configuração é semelhante a uma já alcança anteriormente, veja figura 5.18 b. Assim fechamos o ciclo, onde a entrada tinha a magnetização apontando para esquerda e após a evolução do sistema para o mínimo global de energia com a aplicação do campo ela passa a apontar para direita. Portanto o sinal é invertido o que é uma característica da porta lógica NOT.

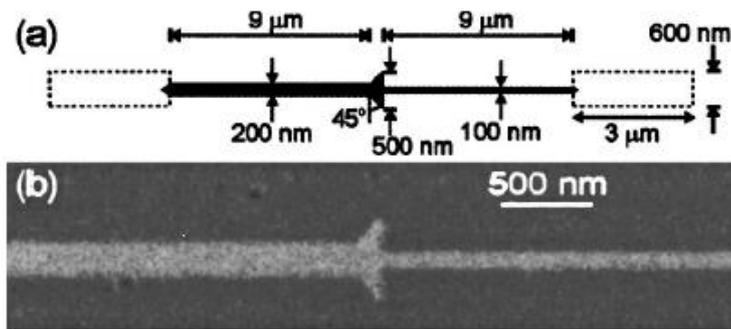


Figura 5.22: Figura retirada de um artigo(17) na qual baseamos nossa simulação do diodo de parede de domínio.

5.6 Diodo

Na seção anterior utilizamos a propagação de uma parede de domínio numa estrutura de constituída de momentos magnéticos para simular a porta lógica NOT.

Vamos novamente utilizar uma parede de domínio que se propaga numa estrutura de momentos magnéticos. Onde a propagação dessa parede se dá somente numa das direções dessa estrutura, ou seja, simularemos diodo de parede de domínio.

A simulação foi realizada baseado na figura 5.22 retirada de um artigo (17).

Inicialmente os momentos magnéticos apontam para direita, veja figura 5.23. Em seguida invertamos a direção das três primeiras fileiras, destacada em azul nessa figura. Isso cria uma parede de domínio.

Depois de criar a parede de domínio aplicamos um campo magnético em toda a estrutura afim de propagar essa parede de domínio. Veja figura 5.24. Ao final vemos que a configuração assumida pelo sistema é uma configuração de mínimo de energia. Vemos assim que a parede de domínio propagou em toda a estrutura.

No processo contrário, ou seja, propagar a parede da esquerda para direita vemos que isso não ocorre.

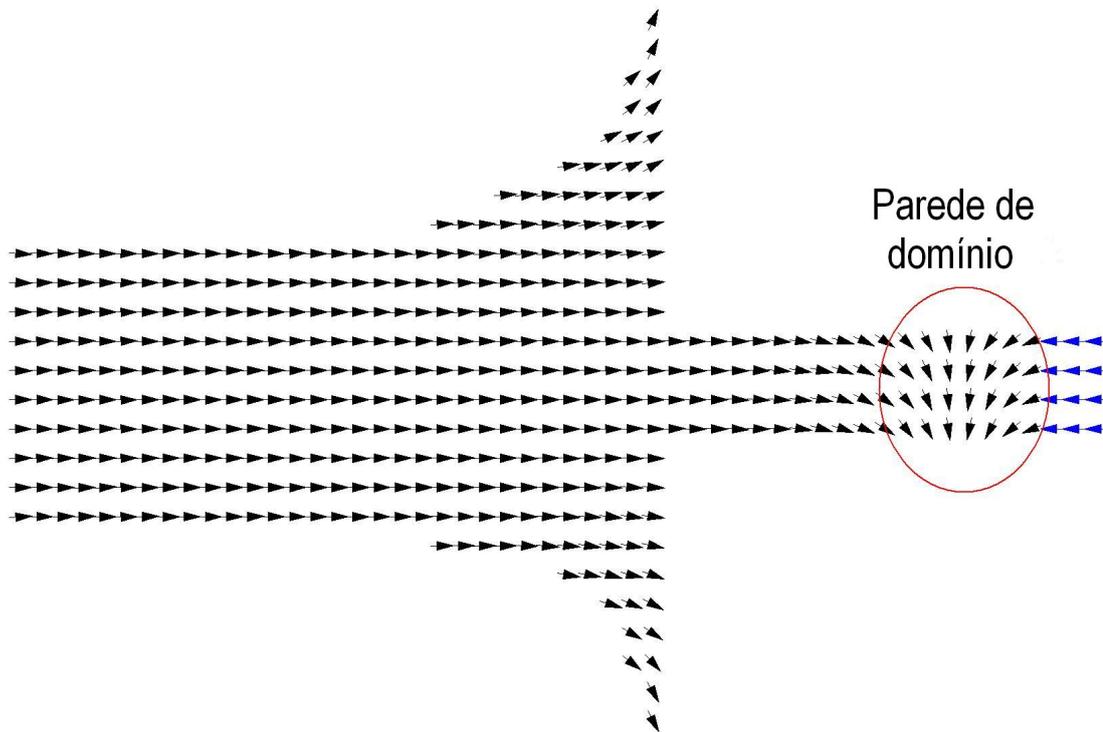


Figura 5.23: Figura representando um diodo de parede de domínio. A estrutura está inicialmente com os momentos apontando para direita, em seguida as três fila de momentos são invertidas. Isso cria um parede de domínio.

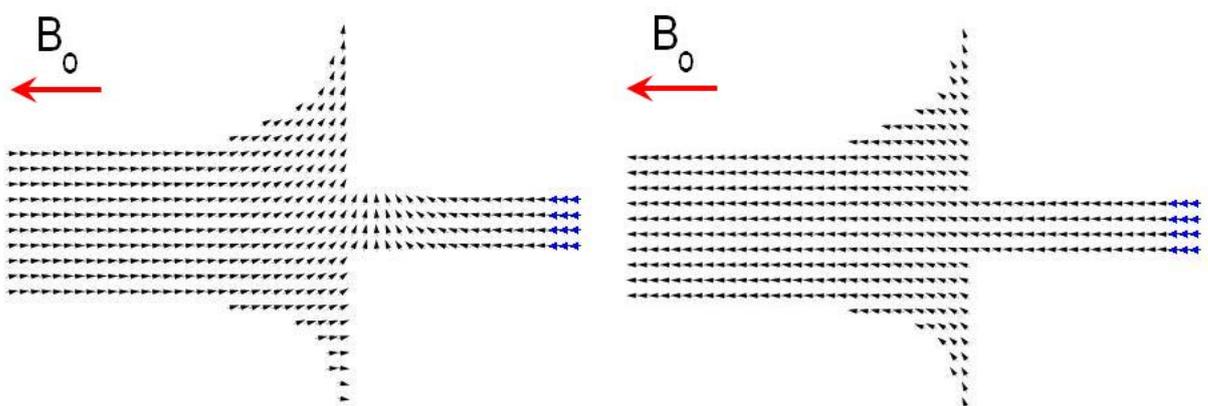
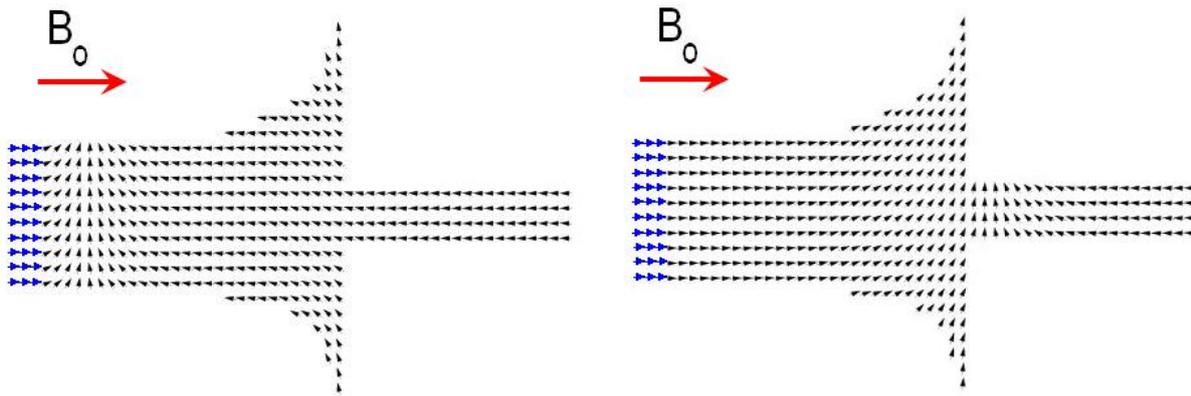


Figura 5.24: A figura a esquerda mostra uma configuração do sistema antes dele assumir um mínimo de energia. A direita mostra o sistema nessa mínimo. Vemos que a parede de domínio propagou em todo a estrutura.



Inicialmente temos o sistema onde todos os momentos apontam para esquerda, em seguida invertemos a direção das três primeira filas. Isso cria novamente uma parede de domínio. Depois aplicamos um campo magnético e deixamos o sistema evoluir para um mínimo de energia. Veja figura 5.6. A garantia que a parede de domínio não propaga da esquerda para direita pode ser vista pelo gráfica de energia, figura 5.6, onde a configuração de da figura 5.6 b é a configuração do sistema quando está na estabilidade mostrada pela figura 5.6

5.7 Outras Portas

Na seção 6.4 apresentamos nossas simulações para a porta lógica universal. Pela figura 5.10 temos que o número de momentos das entradas B e C são iguais. A questão é: se quebrássemos essa simetria a estrutura ainda teria uma função lógica associada?

Ao fazermos isso temos que a estrutura ainda apresenta uma função lógica como podemos ver pelas figuras 5.25 e 5.26. Em ambas as portas as entradas A, B e C estão fixas durante a evolução do sistema para um mínimo de energia. A diferença entre elas está na direção de A.

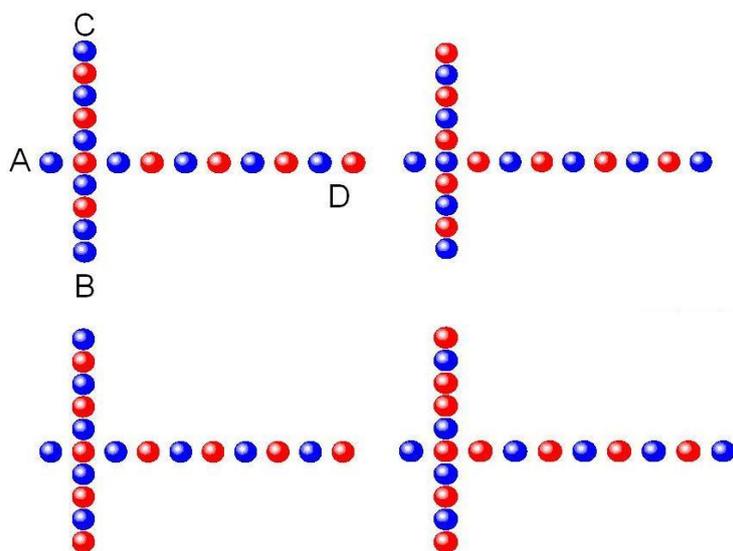
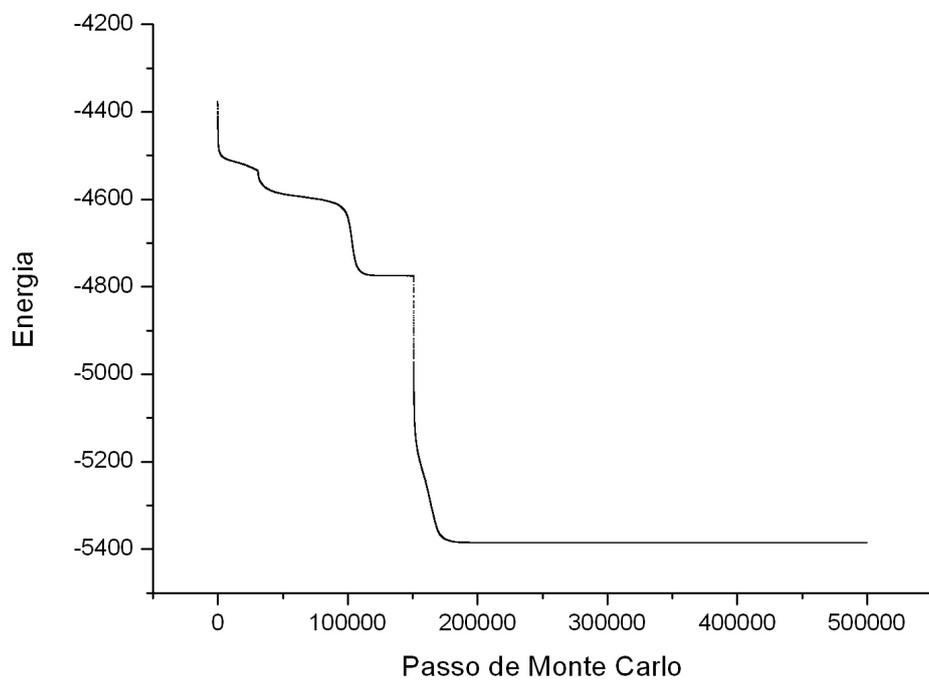


Figura 5.25: Complemento se a saída, D, for o último elemento. Transfer se a saída, D, for o penúltimo elemento.

A	B	C	Saída	
1	1	1	0	1
1	1	0	1	0
1	0	1	0	1
1	0	0	1	0

Tabela 5.2: Tabela da Verdade "Complement" e "Transfer".

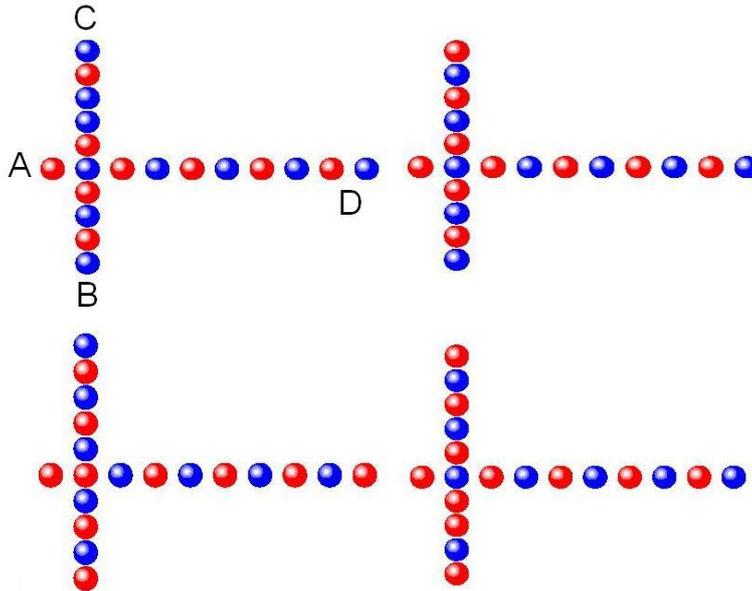


Figura 5.26: Implication se a saída, D, for o último elemento. Inhibition se a saída, D, for o penúltimo elemento.

5.8 Sumário

Apresentamos no presente capítulo uma ideia de como utilizar o hamiltoniano,

$$H_{total} = H_{Zeeman} + H_{Magn.} + H_{Troca} + H_{Anis.cris.} \quad (5.6)$$

para a construção de portas lógicas, onde nós utilizamos somente os três primeiros termos dele. A energia magnetostática apresenta um termo dependente da forma e isso abre possibilidade para criação de novas estruturas, como o diodo por exemplo.

Assim mostramos algumas portas, tais com AND, OR, NOT, TRANSFER e etc. Além de algumas propriedades, tais com confiabilidade e sua dependência com a temperatura

A	B	C	Saída
0	1	1	0
0	1	0	0
0	0	1	1
0	0	0	0

Tabela 5.3: Tabela da Verdade "Implication" e "Inhibitin".

e etc. Mas o termo de anisotropia ainda não foi explorado o que torna possível explorar mais estruturas com alguma aplicação computacional.

Capítulo 6

6.1 Conclusão

Como sabemos o uso de materiais magnéticos para armazenamento de informação é amplamente utilizado, por exemplo, em disquetes, CDs, HDs, etc. Recentemente pesquisadores de várias partes do mundo estão tentando utilizar materiais magnéticos para construir portas lógicas.

Este trabalho de Mestrado tem como objetivo estudar estas formas alternativas de computação, ou seja, formas alternativas de portas lógicas e estruturas computacionais que utilizam propriedades magnéticas. Mas ao deixar de usar a propriedade de carga do elétron a estrutura que desempenhará a função lógica também mudará, e mudará drasticamente. Recentemente trabalhos interessantes apresentando formas alternativas de portas lógicas magnéticas têm sido propostos [R. P. Cowburn et al., *Science* 287, 1466 (2000), e *Science*, 311, 183, (2006), e A. Imre et al., *Science*, 311, 205, (2006)].

Estudamos a teoria envolvida nas interações de nanopartículas e o Método Monte Carlo, o que deu suporte teórico para podermos desenvolver nosso programa que simula portas lógicas e dispositivos computacionais. Após esse estudo, fizemos um revisão do que

se tem feito e trabalhado sobre formas alternativas de computação utilizando magnetismo. Um dos resultados mais impressionante é, como foi mostrado nesta tese, a possibilidade de manipular as portas lógicas AND, OR e NOT que são as funções básicas em computação.

Inspirados em nosso estudo de nanomagnetismo, do Método Monte Carlo e da resisção dos trabalhos já realizados, estudamos a construção de portas lógicas com uso de pequenos elementos magnéticos. Construímos as portas lógicas AND, OR, NOT. As duas primeiras foram simuladas utilizando o modelo de Ising, onde momentos magnéticos são arranjados de uma maneira específica para que a estrutura apresente as funções lógicas. A evolução do sistema para o mínimo de energia foi obtida utilizando o Método Monte Carlo. Para simular a função lógica NOT o hamiltoniano das interações magnéticas é composto das energias troca, magnetostática e Zeeman. Na energia de troca o modelo XY foi utilizado. E novamente o Método Monte Carlo foi utilizado para minimizar a energia. Uma particular configuração de uma fita magnética possibilitou a simulação da função lógica NOT. Obtivemos alguns resultados associados às portas simuladas, tais como confiabilidade e sua dependência com a temperatura e o número de passos Monte Carlo.

Apêndice A

Neste apêndice apresentamos um pouco mais detalhados os conceitos e expressões matemáticas que foram utilizados nesta tese. Nas seções finais foram realizados os cálculos das diferenças de energia associada à alguma mudança. Tal seção foi útil no desenvolvimento do programa para simulação das portas lógicas.

A.1 Interação Dipolo Magnético Campo Magnético

No capítulo 2 dizemos que a entidade básica no estudo de magnetostática era o dipolo magnético. Se esse momento está na presença de um campo magnético ele se alinha em uma certa direção. A direção desse alinhamento é por definição a direção do campo aplicado. Uma analogia pode ajudar a entender como isso ocorre.

Um material (bandeira) preso em uma aste. Quando um fluxo de água ou ar atinge-a, ela gira de modo a se alinhar com o fluxo. Veja figura [A.1](#) abaixo.

Analogamente ocorre com o momento magnético na presença de campo magnético.

Quando o fluxo da ar é retirado a bandeira volta para seu estado inicial de menor energia¹ O mesma acontece quando um campo magnético é retirado. O dipolo magnético

¹A estado de menor energia é alcançado pois a bandeira não tem estabilidade pra manter o estado de máxima energia. Se a bandeira fosse um objeto rígido e se houvesse uma perturbação, mesmo que mínima, mas maior que o atrito do eixo de rotação a bandeira voltaria para o estado de menor energia.

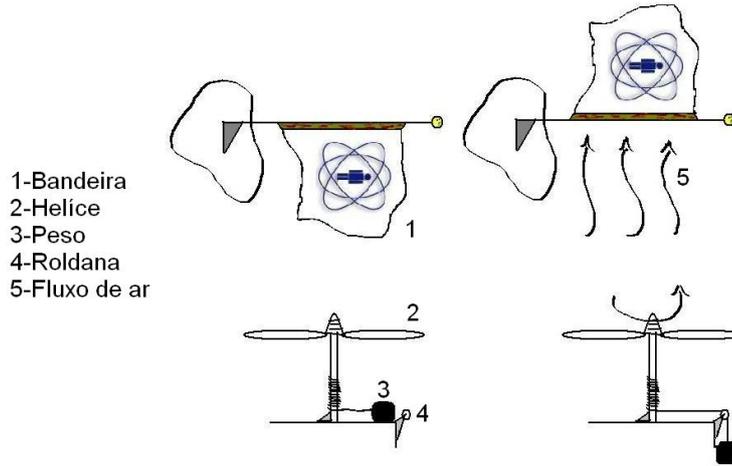


Figura A.1: Figura exemplificando o alinhamento do dipolo magnético

perderá a energia associada a sua torção².

Para obter a expressão da interação do dipolo magnético com um campo magnético externo vamos fazer uma expansão em série de Taylor do campo magnético externo. A expansão de uma função de três variáveis em série de Taylor é,

$$f(x_1 + a_1, x_2 + a_2, x_3 + a_3) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \left(a_1 \frac{\partial}{\partial x'_1} + a_2 \frac{\partial}{\partial x'_2} + a_3 \frac{\partial}{\partial x'_3} \right)^j f(x'_1, x'_2, x'_3) \Big|_{x'_i = x_i} \quad (\text{A.1})$$

Escrevendo na forma vetorial temos,

$$f(\vec{r} + \vec{a}) = \sum_{j=0}^{\infty} \left[\frac{1}{j!} (\vec{a} \cdot \nabla')^j f(\vec{r}') \right]_{\vec{r}' = \vec{r}} \quad (\text{A.2})$$

O campo magnético é uma função vetorial, $B_i(\vec{r})$. Utilizando a equação acima e realizando a expansão em 0 (zero) temos,

$$B_i(\vec{r}) = B_0 + \vec{r} \cdot \nabla B_0 \Big|_{\vec{r}=0} + \dots \quad (\text{A.3})$$

A lei de força elementar para uma densidade de corrente $\vec{J}(\vec{x})$ presente numa região

²Da mesma maneira que a bandeira poderia não voltar para seu estado inicial, por exemplo o atrito no eixo de rotação seria maior que a força gravitacional, o dipolo magnético também não poderia voltar. Isso depende de vários fatores e estão associados as interações que o dipolo faz com a sua vizinhança.

de fluxo magnético é dado por,

$$\vec{F} = \frac{1}{c} \int \vec{J}(\vec{r}) \times \vec{B}(\vec{r}) dv \quad (\text{A.4})$$

onde c é a velocidade da luz no vácuo e a integração é realizada em todo espaço. Substituindo a equação A.3 na equação de força,

$$\vec{F} = -\frac{1}{c} \vec{B}(0) \times \int \vec{J}(\vec{x}') dv' + \frac{1}{c} \int \vec{J}(\vec{x}') \times [(\vec{x}' \cdot \nabla) \vec{B}(0)] dv' + \dots \quad (\text{A.5})$$

Para um densidade de corrente $\vec{J}(\vec{r})$ estacionária o primeiro termo da equação acima é zero. Da igualdade,

$$\vec{J} \times [(\vec{r}' \cdot \nabla) \vec{B}] = \vec{J} \times \nabla(\vec{r}' \cdot \vec{B}) = -\nabla \times [\vec{J}(\vec{r}' \cdot \vec{B})].$$

Assim a força pode ser escrita como,

$$\vec{F} = \frac{1}{c} \nabla \times \int \vec{J}(\vec{r}' \cdot \vec{B}) dv' \quad (\text{A.6})$$

utilizando a identidade matemática e pela definição de momento magnético,

$$\int (\vec{x} \cdot \vec{x}') \vec{A}(\vec{x}') dv' = -\frac{1}{2} \vec{x} \times \int \vec{x}' \times \vec{A}(\vec{x}') dv' \quad (\text{A.7})$$

$$\vec{m} = \frac{1}{2c} \int \vec{r} \times \vec{J}(\vec{r}) dv \quad (\text{A.8})$$

onde $\vec{B} = \vec{x}$ podemos escrever a força como,

$$\vec{F} = \nabla \times (\vec{B} \times \vec{m}) = (\vec{m} \cdot \nabla) \vec{B} = \nabla(\vec{m} \cdot \vec{B}) \quad (\text{A.9})$$

utilizando agora as identidades vetoriais para obter o segundo e terceiro termo respectivamente,

$$\nabla \times (\vec{A} \times \vec{B}) = \vec{A}(\nabla \cdot \vec{B}) - \vec{B}(\nabla \cdot \vec{A}) + (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{A} - (\vec{A} \cdot \nabla) \vec{B}$$

$$\vec{A} \times (\nabla \times \vec{B}) = (\nabla \vec{B} \cdot \vec{A} - (\vec{A} \cdot \nabla) \vec{B})$$

Assim uma distribuição de corrente na presença de um fluxo magnético sofre uma força dada pela equação A.9.

Da equação A.9 podemos obter a energia potencial de um momento magnético na presença de um campo magnético. Identificando a força como o gradiente negativo da energia potencial nos temos,

$$U = -\vec{m} \cdot \vec{B} \quad (\text{A.10})$$

A.2 Campo Magnético de um Dipolo

Das equações de Maxwell temos que $\nabla \cdot \vec{B} = 0$. Assim \vec{B} pode ser escrito como um rotacional de um vetor,

$$\vec{B}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) \quad (\text{A.11})$$

Obtemos nas seções anterior que o potencial vetor \vec{A} poderia ser escrito como

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\vec{m} \times \vec{r}}{|\vec{r}|^3} \quad (\text{A.12})$$

Temos então,

$$\begin{cases} A_x = \frac{m_y z - m_z y}{|\vec{r}|^3}; & B_x = d_y A_z - d_z A_y, \\ A_y = \frac{m_z x - m_x z}{|\vec{r}|^3}; & B_y = d_z A_x - d_x A_z, \\ A_z = \frac{m_x y - m_y x}{|\vec{r}|^3}; & B_z = d_x A_y - d_y A_x. \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

- $\partial_y A_z = \partial_y \left(\frac{m_x y - m_y x}{|\vec{r}|^3} \right) \Rightarrow + \frac{m_x}{|\vec{r}|^3} - \frac{3}{2} (m_x y - m_y x) \frac{2y}{|\vec{r}|^5}$
- $\partial_z A_y = \partial_z \left(\frac{m_z x - m_x z}{|\vec{r}|^3} \right) \Rightarrow - \frac{m_x}{|\vec{r}|^3} - \frac{3}{2} (m_z x - m_x z) \frac{2z}{|\vec{r}|^5}$
- $\partial_z A_x = \partial_z \left(\frac{m_y z - m_z y}{|\vec{r}|^3} \right) \Rightarrow + \frac{m_y}{|\vec{r}|^3} - \frac{3}{2} (m_y x - m_z y) \frac{2z}{|\vec{r}|^5}$
- $\partial_x A_z = \partial_x \left(\frac{m_x y - m_y x}{|\vec{r}|^3} \right) \Rightarrow - \frac{m_y}{|\vec{r}|^3} - \frac{3}{2} (m_x y - m_y x) \frac{2x}{|\vec{r}|^5}$
- $\partial_x A_y = \partial_x \left(\frac{m_z x - m_x z}{|\vec{r}|^3} \right) \Rightarrow + \frac{m_z}{|\vec{r}|^3} - \frac{3}{2} (m_z x - m_x z) \frac{2x}{|\vec{r}|^5}$

- $\partial_y A_x = \partial_y \left(\frac{m_y z - m_z y}{|\vec{r}|^3} \right) \Rightarrow -\frac{m_z}{|\vec{r}|^3} - \frac{3}{2}(m_y z - m_z y) \frac{2y}{|\vec{r}|^5}.$

Assim,

- $\partial_y A_z - \partial_z A_y = 2\frac{m_x}{|\vec{r}|^3} - \frac{3y}{|\vec{r}|^5}(m_x y - m_y x) + \frac{3z}{|\vec{r}|^5}(m_z x - m_x z) = B_x$

- $\partial_z A_x - \partial_x A_z = 2\frac{m_y}{|\vec{r}|^3} - \frac{3z}{|\vec{r}|^5}(m_y z - m_z y) + \frac{3x}{|\vec{r}|^5}(m_x y - m_y x) = B_y$

- $\partial_x A_y - \partial_y A_x = 2\frac{m_z}{|\vec{r}|^3} - \frac{3x}{|\vec{r}|^5}(m_z x - m_x z) + \frac{3y}{|\vec{r}|^5}(m_y z - m_z y) = B_z.$

Isolando m_i e x_i do segundo e terceiro termo da equação de B_i teremos,

- $B_x = \frac{2m_x}{|\vec{r}|^3}(y^2 + z^2) + \frac{3x}{|\vec{r}|^5}(m_y y + m_z z)$

- $B_y = \frac{2m_y}{|\vec{r}|^3}(x^2 + z^2) + \frac{3y}{|\vec{r}|^5}(m_x x + m_z z)$

- $B_z = \frac{2m_z}{|\vec{r}|^3}(x^2 + y^2) + \frac{3z}{|\vec{r}|^5}(m_x x + m_y y).$

Somando e subtraindo $-\frac{3m_i^2}{|\vec{r}|^5}$ da componente B_i ,

- $B_x = \frac{2m_x}{|\vec{r}|^3}(x^2 + y^2 + z^2) + \frac{3x}{|\vec{r}|^5}(m_x x + m_y y + m_z z)$

- $B_y = \frac{2m_y}{|\vec{r}|^3}(x^2 + y^2 + z^2) + \frac{3y}{|\vec{r}|^5}(m_x x + m_y y + m_z z)$

- $B_z = \frac{2m_z}{|\vec{r}|^3}(x^2 + y^2 + z^2) + \frac{3z}{|\vec{r}|^5}(m_x x + m_y y + m_z z)$

Assim obtemos as componentes do campo magético de um dipolo,

$$B_x = -\frac{m_x}{|\vec{r}|^3} - \frac{3x}{|\vec{r}|^5} \vec{m} \cdot \mathbf{r},$$

$$B_y = -\frac{m_y}{|\vec{r}|^3} - \frac{3y}{|\vec{r}|^5} \vec{m} \cdot \mathbf{r},$$

$$B_z = -\frac{m_z}{|\vec{r}|^3} - \frac{3z}{|\vec{r}|^5} \vec{m} \cdot \mathbf{r}.$$

O campo fica então,

$$\vec{B}(\vec{r}) = -\frac{\vec{m}}{|\vec{r}|^3} + \frac{3\vec{r}}{|\vec{r}|^5} \vec{m} \cdot \vec{r}. \quad (\text{A.14})$$

A.3 Interação Dipolo-Dipolo

Da equação A.4 obtida na seção anterior podemos calcular a energia potencial associada a interação de um dipolo com outro.

Obtivemos na seção A.1 que a energia potencial de um dipolo magnético na presença de um campo magnético externo era,

$$U = -\vec{m} \cdot \vec{B}_{ex} \quad (\text{A.15})$$

Nada foi dito a respeito de qual campo magnético era aplicado no momento. Assim o campo externo pode ser o campo criado por um outro momento de dipolo magnético, o que foi obtido na seção anterior. Assim,

$$U = \vec{m}_i \cdot \left[-\frac{\vec{m}_j}{|\vec{r}|^3} + \frac{3\vec{r}}{|\vec{r}|^5} \vec{m}_j \cdot \vec{r} \right] \Rightarrow -\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j + 3 \frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{r})(\vec{m}_j \cdot \vec{r})}{|\vec{r}|^5}$$

onde $\vec{r} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$

Para um sistema constituído de muitos momentos magnéticos m_i que interagem entre si a energia potencial total é,

$$U = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{|\vec{r}_{i,j}|^3} - 3 \frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{i,j})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{i,j})}{|\vec{r}_{i,j}|^5} \quad (\text{A.16})$$

onde a soma teve ser realizado em todos os momentos do sistema. A divisão por 2 acontece quando a soma dupla é realizada. Isso é devido a igualdade da energia na interação de dois momento, ou seja, $E_{i,i} = E_{j,i}$. Portanto basta dividir a energia total por 2.

Na equação A.16 temos um termo que apresenta um produto escalar entre momento magnético e a distância entre eles. Assim a magnetização resultante depende da forma do material estudado. Veja a figura A.2. O ângulo entre o momento e a distância entre dois momentos (m_i e $r_{i,j}$) que minimizam a energia é 0° . Além disso o produto escalar entre

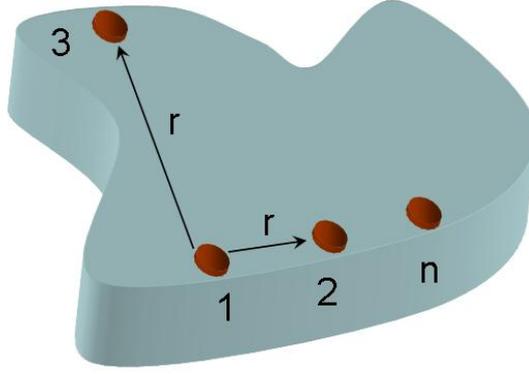


Figura A.2: Representação de um material magnético. Os números 1, 2, 3 e n representam momentos magnéticos desse material e r' e r'' são as distâncias entre os momentos 1 e 2 e 1 e 3 respectivamente.

a partícula 1 e 2 é menos energético que o produto entre 1 e 3 pois a distância entre eles é maior. Assim se o material representado nessa figura tivesse mais partículas alinhadas com 1 e 2 do que 3 a magnetização resultante teria a direção do primeiro alinhamento.

Por isso que o materiais magnético alongados apresentados no capítulo 2 seção 2.6, capítulo 4 seção 4.5 e na introdução do capítulo 6 têm suas magnetizações na direção do seus eixos maiores.

A.3.1 $\Delta E_{dipolo\ dipolo}$

Para um sistema constituído de vários dipolos magnéticos temos que a energia potencial associada a interação entre eles é dada pela equação A.16. No método Monte Carlo temos que em algum momento da evolução do sistema em direção ao mínimo de energia um momento magnético é modificado e assim calcula-se a diferença de energia associada a essa mudança. Assim temos,

$$E_{di-di} = E_{i,j} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\vec{m}_k \cdot \vec{m}_j}{|\vec{r}_{k,j}|^3} - 3 \frac{(\vec{m}_k \cdot \vec{r}_{k,j})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{k,j})}{|\vec{r}_{k,j}|^5} \quad (A.17)$$

$$E'_{di-di} = E_{i,j} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\vec{m}'_k \cdot \vec{m}_j}{|\vec{r}_{k,j}|^3} - 3 \frac{(\vec{m}'_k \cdot \vec{r}_{k,j})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{k,j})}{|\vec{r}_{k,j}|^5} \quad (A.18)$$

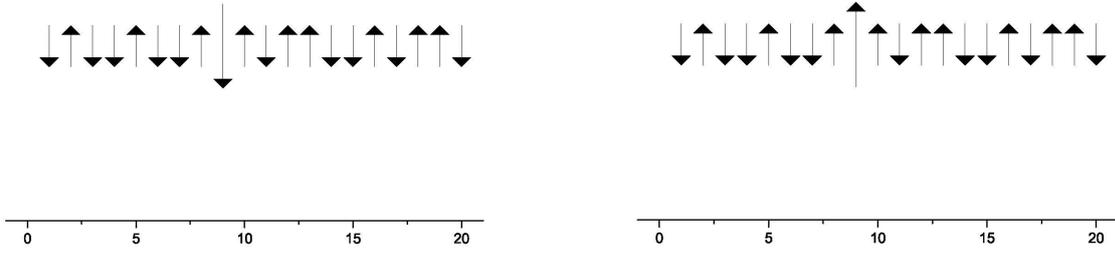


Figura A.3: Rede de spin unidimensional. O spin maior será modificado gerando uma variação na energia do sistema.

Onde os primeiros termo nas equações acima são iguais e a soma é realizado para todos os momentos magnético menos o momento modificado no passo Monte Carlo. O segundo e terceiro termo nas equações acima descrevem a interação do momento que irá ser modificado com seus vizinhos. Mantendo a interação com todos os vizinhos temos a seguinte diferença de energia,

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{di-di} &= \sum_j \frac{3}{|\vec{r}_{k,j}^5} \left[-(\vec{m}'_k \cdot \vec{r}_{k,j})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{k,j}) + (\vec{m}_k \cdot \vec{r}_{k,j})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{k,j}) \right] \\
 &= \sum_j \frac{3}{|\vec{r}_{k,j}^5} (\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{k,j}) (-\vec{m}'_k \cdot \vec{r}_{k,j} + \vec{m}_k \cdot \vec{r}_{k,j}) \\
 \\
 \Delta E_{di-di} &= \sum_j \frac{3}{|\vec{r}_{k,j}^5} (\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{k,j}) \left[(\vec{m}_k - \vec{m}'_k) \cdot \vec{r}_{k,j} \right] \tag{A.19}
 \end{aligned}$$

A.4 Interação de Troca

A.4.1 ΔE_{troca}

Apresentamos aqui o calculo de ΔE para o Modelo de Ising 1D, 2D e modelo planar, onde um spin aleatório da rede foi invertido.

1D

O spin com a seta maior na figura A.3 indica o spin que será invertido no passo Monte Carlo. O hamiltoniano de que define o Modelo de Ising é,

$$H = -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (\text{A.20})$$

Para interações de primeiro vizinho e condições de contorno não periódicas, que se justificam pelo simples fato de querermos transportar informação, assim a entrada não pode "ver" a saída.

$$2H = -J\vec{S}_1 \cdot (\vec{S}_e^1 + \vec{S}_d^1) - \dots - JS_N \cdot (\vec{S}_e^N + \vec{S}_d^N) + J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_e^1 + JS_1 \cdot \vec{S}_e^N,$$

onde \vec{S}_e^k e \vec{S}_d^k corresponde aos primeiros vizinhos do spin de \vec{S}_k da rede de N spin,

$$2H = -JS_1(2) - \dots - JS_N(2) + 2J,$$

$$2H = -2JN + 2J,$$

onde a equação de H é para condições iniciais em que os spins estão todos alinhados.

Para condições iniciais aleatórias temos,

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - J\vec{S}_k \cdot (\vec{S}_e^k + \vec{S}_d^k) \\ H' &= -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - J\vec{S}'_k \cdot (\vec{S}_e^k + \vec{S}_d^k) \end{aligned}$$

subtraindo as equações acima temos,

$$\Delta H = -J\vec{S}_k \cdot (\vec{S}_e^k + \vec{S}_d^k) + J\vec{S}'_k \cdot (\vec{S}_e^k + \vec{S}_d^k)$$

como $\vec{S}_k = -\vec{S}'_k$

$$\Delta H = 2J\vec{S}'_k \cdot (\vec{S}_e^k + \vec{S}_d^k) \quad (\text{A.21})$$

Para interações com l vizinhos temos que na equação [A.21](#) a soma é estendida até l vizinhos. Assim

$$\Delta H = 2J\vec{S}'_k \cdot \sum_j^l \vec{S}_j \quad (\text{A.22})$$

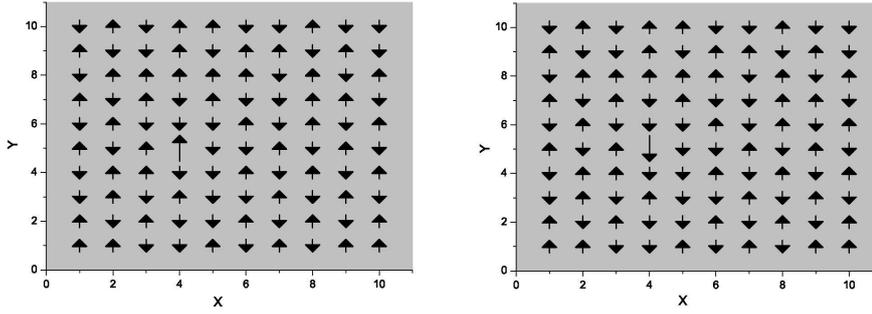


Figura A.4: Rede de 100 spins. O spin maior será modificado na evolução do sistema para uma mínimo de energia utilizando o metodo de Monte Carlo.

2D

Semelhante ao que foi apresentado na subseção, apresentamos aqui o cálculo da diferença de energia associada a mudança aleatória de um spins aleatório da rede bidimensional.

Onde o spin com a seta maior indica o spin que foi invertido num passo de Monte Carlo. O hamiltoniano de uma rede de spin é, definido como,

$$H = -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (\text{A.23})$$

Para interações de primeiro vizinho e condições de contorno não periódicas temos,

$$H = -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - JS_k \cdot (\vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3 + \vec{S}_4). \quad (\text{A.24})$$

$$H' = -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - JS'_k \cdot (\vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3 + \vec{S}_4). \quad (\text{A.25})$$

$$\Delta H = -JS'_k \cdot (\vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3 + \vec{S}_4) - JS_k \cdot (\vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3 + \vec{S}_4).$$

Como $S_k = -S'_k$,

$$\Delta H = 4JS'_k \cdot (\vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3 + \vec{S}_4) \Rightarrow \Delta H = 2JS'_k \cdot \vec{\Lambda}.$$

$$\Delta H = 2JS'_k \cdot \vec{\Lambda}. \quad (\text{A.26})$$

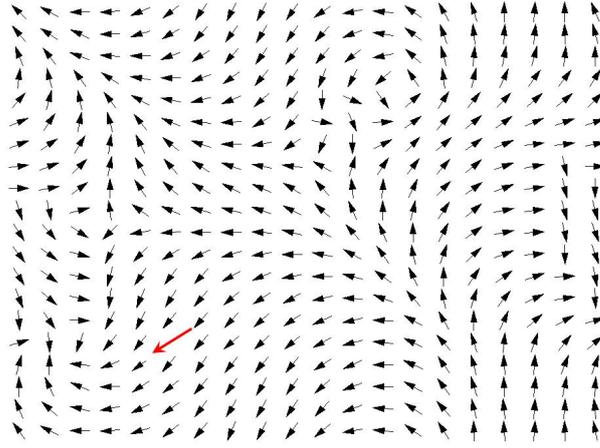


Figura A.5: Rede de 400 spins. O spin em vermelho indica o spin que será modificado no passo de Monte Carlo. A energia do sistema é dada pelo hamiltoniano do modelo XY.

Onde definimos $\Lambda = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3 + \vec{S}_4$.

Da mesma maneira que foi feita para 1D podemos estender a interação, não se restringindo aos primeiros vizinhos. Com isso a equação A.26 Λ torna-se uma soma para l vizinhos,

$$\Delta H = 2J\vec{S}_k \cdot \sum_j^l \vec{S}_j \quad (\text{A.27})$$

Modelo Planar

A energia ou hamiltonian do modelo planar é similar ao modelo de Ising, mas no planar, ou XY, os spins podem apontar para qualquer direção no plano em que eles estão.

$$H_{xy} = -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (\text{A.28})$$

Ao realizar uma pequena mudança na direção de algum spin da rede, por exemplo o spin em vermelho na figura A.5 a energia do sistema muda. Assim temos as energia iniciais e final respectivamente,

$$E_{xy} = -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - J\vec{S}_k \cdot \sum_j^l \vec{S}_j$$

$$E'_{xy} = -J \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - J \vec{S}'_k \cdot \sum_j^l \vec{S}_j$$

onde S_k indica o spin que irá mudar de direção. A interação aqui está estendida para l vizinhos. A diferença de energia é,

$$\Delta E_{xy} = -J \vec{S}'_k \cdot \sum_j^l \vec{S}_j + -J \vec{S}_k \cdot \sum_j^l \vec{S}_j$$

$$\Delta E_{xy} = J(\vec{S}_k - \vec{S}'_k) \cdot \sum_j^l \vec{S}_j \quad (\text{A.29})$$

onde \vec{S}'_k indica o spin com a direção modificada. A equação acima é igual as equações de ΔE obtidas para o modelo de Ising 1D e 2D se $\vec{S}'_k = -\vec{S}_k$.

Bibliografía

- [1] Modern Magnetic Materials, Robert C. O'Handley
- [2] Física de los materiales magnéticos, Antonio Hernando e Juan M. Rojo
- [3] D. A. Allwood et al, Science 296, 2003 (2002)
- [4] D. A. Allwood et al, Journal of Applied Physics 95, 12 (8264)
- [5] D. A. Allwood et al, Science 309, 1688 (2005)
- [6] R. P. Cowburn, M. E. Welland, Science 287, 1466 (2000)
- [7] R. P. Cowburn, JMMM, 242, 505 (2002)
- [8] M. C. B. Parish and M. Forshaw, APL, 83, 10, 2046
- [9] G. H. Bernstein et al, Microelectronics Journal, 36 (2005) 619-624
- [10] A. Imre et al, Superlattices Microstructures, 34 (2003) 513-518
- [11] S. Anisul et al, JMMM, 282, 380 (2004)
- [12] R. P. Cowburn, Science, 311, 183, (2006)
- [13] A. Imre et al, Science, 311, 205, (2006)

- [14] G. Csaba et al, Journal of Computational Electronics 4, 105-110, 2005
- [15] R. P. Cowburn, et all, Phys. Rev. Lett. 83, 1042(1999)
- [16] C. S. Lent, P. D. Tougaw, W. Porod e G. H. Bernstein, "Quantum Cellular Automata", Nanotechnology 1993 4 49-57.
- [17] D. A. Allwood, Gang Xiong e R. P. Cowburn, Applied Phisics Letters, 85, 14, 2848(2004)