

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO SUDOESTE DA BAHIA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA E EXATAS
COLEGIADO DE MATEMÁTICA COM ENFOQUE EM INFORMÁTICA

LUIZ FERNANDO SILVA FERREIRA

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE NANODISCOS MAGNÉTICOS

JEQUIÉ – BA

2012

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO SUDOESTE DA BAHIA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA E EXATAS

LUIZ FERNANDO SILVA FERREIRA

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE NANODISCOS MAGNÉTICOS

Monografia apresentada ao Departamento de Química e Exatas da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia como requisito parcial para a obtenção do título de Licenciado em Matemática com Enfoque em Informática.

Área de Concentração: Ciências Exatas e da Terra

Orientador: Prof. Dr. Nemésio Matos de Oliveira Neto

JEQUIÉ – BA

2012

LUIZ FERNANDO SILVA FERREIRA

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE NANODISCOS MAGNÉTICOS

Monografia apresentada ao Departamento de Química e Exatas da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia como requisito parcial para a obtenção do título de Licenciado em Matemática com Enfoque em Informática.

Aprovada por:

Nemésio Matos de Oliveira Neto

Luizdarcy de Matos Castro

Ademakson Souza Araújo

JEQUIÉ – BA

04 de Maio de 2012

AGRADECIMENTOS

À minha família por sempre estar do meu lado apoiando e aconselhando.

Ao meu orientador *Nemésio*, pela persistência em tentar me fazer enxergar mais longe.

À minha querida avó, *Flor (in memorian)*, por lutar com todas as forças para que eu nunca desistisse.

À minha noiva, *Mada*, pela ajuda e paciência nessa jornada.

Ao meus amigos pelo incentivo, especialmente *Rodrigo Rocha*, que sempre foi como um irmão mais velho.

Aos meus professores que sempre desafiaram minha inteligência e ajudaram a melhorar minha formação acadêmica, a exemplo de *Vagner Couto*, *Emiraldo Pinheiro*, *Márcio Bortoloti* e muitos outros que não conseguiria citar aqui.

Aos meus colegas de curso, pelo companheirismo, e a *Sara Bartira* pela amizade incondicional.

Aos membros da banca examinadora, pela disposição em avaliar este humilde trabalho.

RESUMO

Devido ao impacto dos materiais magnéticos na economia moderna, torna-se natural a busca da compreensão dos mecanismos fundamentais que confere a tais materiais suas propriedades magnéticas e sua potencialidade tecnológica.

Uma das formas possíveis de compreender a estrutura de materiais magnéticos está numa análise teórica de tais elementos, utilizando cálculos analíticos e, principalmente, simulações computacionais utilizando diversos modelos em superfícies curvas e planas.

Neste projeto, objetivamos introduzir alguns conceitos básicos sobre nanomagnetismo e estudar qualitativa e quantitativamente algumas propriedades estáticas de sistemas magnéticos, mais especificamente nanodiscos magnéticos, comparando os resultados com os da literatura.

No texto subsequente, analisamos o efeito da espessura da borda, temperatura e da constante de borda nas propriedades físicas do sistema em questão, tais como perfil de *spins* na rede, curva de histerese magnetostática, etc.

Dessa forma, conseguimos obter os resultados reportados em níveis teóricos e experimentais.

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO GERAL.....	1
CAPÍTULO 1.....	3
Conceitos Fundamentais sobre Magnetismo.....	3
Nanomagnetismo.....	5
Defeitos Topológicos em Nanodiscos.....	6
Interações Magnéticas.....	7
Magnetismo Coletivo.....	8
O Modelo de Heisenberg.....	8
Anisotropia.....	10
CAPÍTULO 2.....	11
Método de Monte Carlo (MMC).....	11
O Nanodisco Magnético.....	13
O Nanomagnetismo Elíptico	14
CAPÍTULO 3.....	15
Metodologia.....	15
CAPÍTULO 4.....	16

Resultados e Discussões.....	16
CAPÍTULO 5.....	21
Conclusões e perspectivas.....	21
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	22
ANEXOS.....	24
Anexo I – Cálculo do Vetor Perpendicular à Borda da Elipse.....	25

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Vórtice.....	16
Figura 2 - Meio Vórtice.....	16
Figura 5 - Configuração de spins, Espessura da Borda =4a e B = -1.....	17
Figura 4 - Configuração de spins, Espessura da Borda =4a e B = 0.....	17
Figura 3 - Configuração de spins, Espessura da Borda =4a e B = 1.....	17
Figura 8 - Configuração de spins, Espessura da Borda =7a e B = -1.....	17
Figura 7 - Configuração de spins, Espessura da Borda =7a e B = 0.....	17
Figura 6 - Configuração de spins, Espessura da Borda =7a e B = 1.....	17
Figura 9 - Curva de Histerese, $C_b=2.0$ e $T=0.1$	18
Figura 10 - Curva de Histerese, $C_b=10.0$ e $T=0.1$	19
Figura 11 - Curva de Histerese, $C_b=10.0$ e $T=0.45$	20
Figura I.1 - Elipse.....	25
Figura I.2 - Cálculo do Vetor Tangente a Borda da Elipse.....	25

INTRODUÇÃO GERAL

A palavra magnetismo é originada da cidade Magnésia, rica em ferro. Surgida na Antiguidade, a palavra associa-se a capacidade de fragmentos de ferro serem atraídos pela magnetita, material encontrado na natureza. Os primeiros relatos dessas propriedades datam de 800 a.C.

Mesmo tendo sido descoberto muito cedo, o estudo do magnetismo só se tornou mais orientado e sistemático no século XVII, com o médico William Gilbert. Recentemente com o descobrimento da Mecânica Quântica pôde-se explicar a origem do magnetismo e suas diversas propriedades. Sendo tema de muitos estudiosos hoje em dia, o que mais se busca é a compreensão das origens microscópicas das propriedades magnéticas dos materiais e a descoberta de novos materiais e fenômenos^[6].

O nanomagnetismo é uma área da Física que trata das propriedades magnéticas dos materiais em escala nanoscópica e mesoscópica. Engloba o estudo das aplicações do magnetismo de nanopartículas isoladas, nanofios, filmes finos e multicamadas. Existem muitas aplicações práticas para estes conhecimentos, desde a geologia à gravação magnética, passando pelo transporte de drogas que podem ser direcionadas a órgãos ou tecidos específicos. Alguns seres utilizam-se de estruturas nanomagnéticas para se locomoverem, graças a grãos de dimensões nanométricas, como a magnetita. ^[7]

Nos últimos anos, grandes avanços na habilidade de fabricação de objetos em nano escala foram obtidos com as mais diversas técnicas, bem como o aproveitamento das potencialidades de tais materiais. É sabido que um mesmo material, com uma estruturação diferenciada em pequena escala, apresenta as mais distintas propriedades físicas. Essas diferenças podem ser explicadas pela grande concentração de átomos nas superfícies e interfaces destes materiais, pois os mesmos interagem de forma mais direta nas interações

químicas e físicas^[17, 7].

No Capítulo 1, vamos introduzir alguns conceitos básicos sobre magnetismo e seu comportamento em escalas nanométricas. No Capítulo 2, falaremos do Método de Monte Carlo, bem como sua utilização na simulação computacional como ferramenta de estudo de sistemas magnéticos em nanodiscos. No Capítulo 3, definiremos a metodologia utilizada no trabalho. E finalmente faremos uma análise dos resultados no Capítulo 4.

CAPÍTULO 1

Conceitos Fundamentais sobre Magnetismo

Três elementos são importantes para a descrição do magnetismo na matéria: o campo magnético externo \vec{H} , a indução magnética \vec{B} proveniente da própria magnetização do material juntamente com o campo externo aplicado e a magnetização \vec{M} , que é o momento magnético por unidade de volume. No vácuo, o campo magnético é diretamente proporcional ao campo \vec{H} , a relação entre os campos \vec{B} , \vec{H} e \vec{M} é dada por:

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

sendo μ_0 a permeabilidade magnética do vácuo^[16, 1].

As quantidades \vec{B} e \vec{H} estão relacionados com a densidade de corrente elétrica \vec{J} , a expressão de *Biot-Savart* determina as intensidades destes campos da seguinte maneira:

$$\vec{B}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\vec{J}(\vec{x}') \times (\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} d^3x' \quad (2)$$

onde \vec{x} e \vec{x}' são os vetores posição dos dipolos que estão interagindo e a integração é feita sobre toda a região da corrente^[16].

Na presença de um meio magnético, a equação (2) não será suficiente para descrever o comportamento do magnetismo, pois haverá a influência de um campo com magnetização \vec{M} no meio, que interagirá com \vec{B} e \vec{H} simultaneamente.

Em pequena escala, as propriedades magnéticas adquiridas por um corpo podem ser explicadas pela existência de elétrons que giram em torno dos átomos e pelo momento angular intrínseco dos elétrons (*spins*). A magnetização surge do ordenamento dos momentos magnéticos atômicos, e é definida como a quantidade de momentos magnéticos por unidade de volume do material^[16].

O momento magnético de um átomo é originado do spin, dos momentos angulares orbitais e a mudança no momento induzido por um campo magnético aplicado^[8]. O momento magnético e o momento angular orbital \vec{L} são dados por

$$\vec{\mu}_l = -g_l \frac{e}{2m} \vec{L}, \quad (3)$$

analogamente, entre o momento magnético intrínseco $\vec{\mu}_s$ e o spin \vec{S} é

$$\vec{\mu}_s = -g_s \frac{e}{2m} \vec{S} \quad (4)$$

sendo e a carga do elétron, $g_l=1$ o fator orbital, $g_s \approx 2$ o fator de spins e m é a massa do elétron.

Os momentos magnéticos interagem entre si e também com campos magnéticos externos. Em mecânica quântica o momento magnético $\vec{\mu}$ de um átomo é o seu momento angular total^[16]

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s. \quad (5)$$

A classificação dos materiais magnéticos se dá pela resposta dos mesmos à aplicação de campos magnéticos, por exemplo o campo externo \vec{H} , resposta essa que pode ser quantificada pela suscetibilidade magnética, definida por

$$\chi = \frac{\mu_0 |\vec{M}|}{|\vec{B}|} \quad (6)$$

sendo μ_0 a permeabilidade magnética no vácuo, $|\vec{M}|$ e $|\vec{B}|$ os valores da intensidade da magnetização e do campo magnético, respectivamente.

Os tipos de materiais mais conhecidos são os Diamagnéticos, cuja suscetibilidade tem valor pequeno e é negativa. Paramagnéticos, são caracterizados por uma suscetibilidade positiva que varia linearmente com o inverso da temperatura para campos relativamente fracos. Ferromagnéticos, que têm uma ordem magnética espontânea abaixo de uma determinada temperatura crítica e também têm uma dependência linear de χ com $1/T$ acima dessa temperatura. Ferrimagnéticos, que embora apresentem uma magnetização espontânea não são classificados como Ferromagnetos. Em temperaturas suficientemente altas eles tornam-se paramagnéticos. Antiferromagnéticos, que são definidos pela ausência de magnetização espontânea^[1].

Nanomagnetismo

Com a evolução das pesquisas em nanociência nos últimos anos, tornou-se possível perceber alterações nas propriedades dos materiais que em pequena escala possuem comportamentos diferenciados, o que proporciona a possibilidade de utilização de materiais conhecidos de maneiras inovadoras. Essas alterações ocorrem pelo efeito diferenciado da interação dos átomos em pequena escala. Tais objetos podem ser encontrados na natureza e fabricados artificialmente, modeladas em várias formas diferentes^[17].

Esses materiais possuem um potencial de funcionarem como mídias removíveis, ampliando a capacidade de armazenamento em alta velocidade e densidade, desde que possuam certa configuração. Além da possibilidade de funcionarem como portas lógicas magnéticas e da fabricação de materiais híbridos ferromagnético/semicondutor. Utilizando simulações de Monte Carlo, viu-se a possibilidade de existência de cargas elétricas isoladas, o que pode revolucionar as áreas tecnológicas e de transmissão de dados^[17].

As técnicas recentes de litografia tornaram o estudo destes materiais possível, como EBL, XLR e INL. Cada uma destas técnicas é mais indicada dependendo do tamanho da superfície entre outras peculiaridades e também, podem ser utilizadas em conjunto. Outra importante forma de estudo dos materiais citados são as simulações computacionais, através de microssimulação magnética ou de dinâmica de spins^[18].

Defeitos Topológicos em Nanodiscos

O conceito de defeito topológico relaciona-se com o de *meio ordenado*, definida por uma região do espaço descrita por função, $f(\vec{r})$, que associa a cada ponto da região um parâmetro de ordem, cujos possíveis valores constituem o *espaço interno*. Se f é constante, o meio é *uniforme*. O maior interesse está nas situações onde o parâmetro de ordem varia continuamente através do espaço, exceto às vezes em pontos isolados, linhas ou superfícies. Essas regiões constituem os *defeitos* a serem investigados. Os *spins planares*, *spins ordinários* e o *hélio-3 superfluido* são alguns exemplos de meios ordenados.

Um defeito topológico é uma sub-região do núcleo onde a ordem é destruída. O parâmetro de ordem não é mais definida no núcleo, onde há uma divergência. Fora dessa região o parâmetro muda lentamente. Em alguns modelos como no Modelo XY e no Rotor Planar, defeitos topológicos são chamados de vórtices^[16].

Excitações topológicas são importantes tanto na descrição dos sistemas físicos quanto em potenciais aplicações tecnológicas. Podemos citar a existência de domínios magnéticos, que por sua vez são separados pelas paredes de domínio, estes sendo utilizados como elementos de gravação magnética. Os vórtices que estão associados à transição de fase topológica quando pares se dissociam. Excitações topológicas são de grande valia na compreensão dos mecanismos de gravação e lógica em escala nanomagnética, além da polarização e a quiralidade supostamente poderem armazenar informação.

Os tipos de domínios magnéticos em nanomagnetos leves dependem apenas de sua forma e dimensão. Sabe-se que a energia de um sistema aumenta à medida que a distribuição de magnetização deixa de ser uniforme. Neste regime de baixa dimensionalidade e de comprimentos característicos da ordem de poucos nanômetros, estas energias dependentes da distribuição de magnetização possuem magnitudes similares, assim sendo, qualquer variação na forma ou tamanho pode favorecer energeticamente a formação de domínios magnéticos. Em filmes nanomagnéticos com dimensões de poucas dezenas de nanômetros, a energia de troca é dominante (domínio simples), com todos os momentos alinhados paralelamente. Em nanomagnetos maiores, o domínio simples é trocado por outras configurações que dependem fortemente da forma do magneto^[16].

As características estruturais dos vórtices e sua dinâmica são bastante interessantes e de grande apelo tecnológico. Os vórtices são estruturas tridimensionais de spins que possuem

quiralidade, fator determinante do fluxo de momentos magnéticos, que podem estar no sentido horário (SH) ou anti-horário (SAH). Esta estrutura possui polaridade, fator que alinha perpendicularmente ao plano do disco, os momentos magnéticos próximos ao centro do vórtice, onde a densidade de energia de troca tende a ficar grande. No núcleo do vórtice, a anisotropia de forma, que depende principalmente de características externas do material, é incapaz de manter os momentos magnéticos paralelos ao plano do disco.

Em nanodiscos paralelos ao plano xy , pode-se classificar a polaridade da seguinte forma: polaridade “up” ($p=1$), para os spins no sentido $+\vec{z}$, e “down” ($p=-1$), para o sentido $-\vec{z}$.

Interações Magnéticas

As partículas nanomagnéticas de um conjunto podem interagir de diferentes maneiras, de acordo com a distância entre elas. A exemplo temos a interação dipolar, a interação de troca e a interação RKKY^[7]. Em nosso trabalho daremos enfoque as interações dipolar e de troca.

Considerando a interação entre dois dipolos magnéticos simples, $\vec{\mu}_1$ e $\vec{\mu}_2$, separados pelo vetor \vec{r} , a energia da configuração é dada pela equação:

$$E = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left(\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2 - \frac{3}{r^2} (\vec{\mu}_1 \cdot \vec{r})(\vec{\mu}_2 \cdot \vec{r}) \right), \quad (7)$$

onde $\vec{\mu}_0$ é a permeabilidade magnética^[17]. Nota-se que a energia depende da distância e da orientação relativa entre os dipolos.

As propriedades magnéticas dos materiais com momentos magnéticos localizados se deve principalmente à interação de troca. Sabe-se que a interação dipolar não é suficiente para produzir ordenamento magnético à temperatura ambiente, isso só seria possível a temperaturas muito baixas^[10].

Para a interação de troca, consideraremos um modelo constituído de dois elétrons indistinguíveis. Conforme as referências [2, 10], consideraremos apenas o aspecto mais simples da interação de troca entre os elétrons. Existem dois tipos de interação de troca, a interação de troca direta, onde o estudo da interação entre dois elétrons é relativamente

simples, o que não acontece na prática com um sistema constituído de inúmeros átomos e, lógico, mais elétrons. Porém a interação de troca realmente significativa ocorre entre átomos mais próximos, o que nos leva ao modelo de Heisenberg^[17]:

$$H_{spin} = - \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j . \quad (8)$$

sendo J_{ij} a constante de troca entre os *spins* nos sítios i e j . Em geral J é positivo quando os elétrons pertencem ao mesmo átomo, e negativo para elétrons de átomos distintos.

Por outro lado, os tipos de interação de troca indireta basicamente depende significativamente do tipo de material magnético, podem ser classificadas como interação de supertroca, de troca e de troca dupla. Sendo que a de supertroca ocorre em sólidos iônicos e a interação de troca ocorre em metais como momentos magnéticos localizados^[17].

Magnetismo Coletivo

Os tipos de interações de troca descritos na seção anterior, tratando de momentos magnéticos não localizados, levam a diferentes estados magnéticos fundamentais, o que provoca um magnetismo coletivo. Se tivermos os momentos magnéticos alinhados paralelamente, temos o estado ferromagnético, se antiparalelo temos o estado antiferromagnético, se estiverem congelados com suas direções distribuídas abaixo de uma temperatura crítica, tem-se os vidros de spins.

As configurações helicoidal e espiral ocorrem quando os momentos magnéticos estão paralelos a um plano, as direções variam de acordo com estes planos. A interação dipolar não é capaz de produzir este ordenamento a temperatura ambiente, o que fica a cargo da interação de troca.

O Modelo de Heisenberg

Como forma de modelar a dinâmica entre os spins em sistemas magnéticos, utilizamos o modelo de Heisenberg, que simula estas interações no sistema físico com boa aproximação

experimental. Uma vez que para uma grande quantidade de átomos não existe um modelo que represente o sistema de forma exata, faz-se necessário o emprego de algumas aproximações e simplificações^[10].

Pode-se mostrar que a interação de troca entre íons magnéticos de sítios vizinhos é do tipo $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$, onde \vec{S}_i é o spin do íon localizado no sítio i , o que nos fornece o modelo de Heisenberg expresso pela hamiltoniana^[10]:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (9)$$

a soma é feita sobre os vizinhos mais próximos, J é o acoplamento entre os íons vizinhos, se $J > 0$ a configuração é ferromagnética, uma vez que a hamiltoniana se torna positiva, se $J < 0$ a mesma é antiferromagnética. Note que a energia só depende da orientação relativa de spins vizinhos e portanto é espacialmente isotrópico^[13].

O modelo de Heisenberg é isotrópico, o que pode ser alterado inserindo-se um termo de anisotropia na hamiltoniana, por exemplo:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \lambda S_i^z S_j^z), \quad (10)$$

fazendo $\lambda = 1$, para recuperar o modelo de Heisenberg isotrópico, teremos:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y). \quad (11)$$

Por outro lado, para valores no intervalo $0 < \lambda < 1$ temos o modelo de Heisenberg de plano fácil, onde os spins tendem a se alinhar paralelamente ao plano considerado. Se $\lambda < 0$, temos o modelo de Heisenberg de eixo fácil, e os spins tenderão a se alinhar ao eixo perpendicular ao plano^[10].

Essa hamiltoniana descreve dois modelos distintos (i) no caso de o spin ser considerado um vetor tridimensional $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 1$, o modelo XY, (ii) spin bidimensional, $S^2 = S_x^2 + S_y^2 = 1$, o modelo Rotor Planar.

Devido a grande quantidade de átomos em sistemas macroscópicos, $\sim 10^{23}$, o tratamento matemático destes modelos é inviável, porém podemos recorrer a técnicas aproximadas para o tratamento dos mesmos, como campo médio, grupos de renormalização,

método computacional de Monte Carlo, etc.

Anisotropia

Nos materiais magnéticos existem interações que selecionam uma direção particular, chamada de eixo fácil, ao longo do qual existe uma tendência para o momento magnético direcionar-se. Estas interações são conhecidas como energia de anisotropia ou simplesmente anisotropia^[16]. Existem duas fontes principais de anisotropia; a interação spin-órbita dos elétrons com a estrutura cristalográfica do material, resultando na anisotropia magnetocristalina e a interação dipolar entre os momentos magnéticos atômicos, que cai com a distância entre dipolos vizinhos elevado ao cubo. A anisotropia em nossas simulações deverão surgir naturalmente devido a interação dos spins com seus vizinhos.

CAPÍTULO 2

Método de Monte Carlo (MMC)

Os sistemas macroscópicos são de difícil tratamento matemático, uma vez que a quantidade de átomos é da ordem de $\sim 10^{23}$, dessa maneira, utiliza-se métodos numéricos e/ou computacionais para o estudo da dinâmica desses sistemas, um destes métodos é o Método de Monte Carlo (MMC).

O MMC é uma técnica de simulação computacional com muitas aplicações em física, tem como princípio a geração de números “aleatórios” para simular flutuações estatísticas, gerando assim, distribuições de probabilidade numéricas^[11]. Esses números “aleatórios”, na verdade possuem um período de repetição, recebendo o nome de sequência pseudo-aleatória.

As sequências pseudo-aleatórias são eficazes quando a periodicidade da sequência gerada é maior que o número de elementos presentes no conjunto de todos os possíveis estados que o sistema pode assumir, do contrário, não se pode garantir que o resultado obtido esteja num percentual de erro considerável^[3].

Para calcular a média de alguma propriedade num sistema físico, é necessário realizar uma média dos valores que esta propriedade assume considerando todos os estados que compõem o estado de fases do sistema.

Quando o sistema possui poucos graus de liberdade, o número de estados possíveis é relativamente pequeno e possibilita o cálculo do valor médio considerando todos os estados acessíveis, o que já não acontece quando o sistema é grande, ou seja, com muitos graus de liberdade. Neste caso, calcula-se a média considerando alguns subconjuntos dos estados acessíveis. É neste momento que percebemos a importância do MMC, que escolhe aleatoriamente os estados que irão compor o subconjunto escolhido, respeitando uma distribuição de probabilidade P_{μ} previamente especificada^[3].

Utiliza-se uma técnica de amostragem por importância (*importance sampling*) com o intuito de auxiliar na escolha de estados que contribuam significativamente para o cálculo da quantidade interessada, uma vez que apenas a escolha aleatória de alguns estados acessíveis não é suficiente para garantir que a média calculada esteja próxima do seu valor de equilíbrio. Antes de calcular qualquer média, devemos gerar várias configurações. No final obteremos um sistema termalizado, i.e, as configurações corresponderão ao equilíbrio termodinâmico naquela temperatura ^[11].

No MMC, o sistema pode fazer transições de uma configuração para outra, de maneira probabilística. Em cada instante de tempo conhecido como passo de Monte Carlo (t_{MC}), o sistema passa para uma nova configuração que pode ser igual ou não à anterior.

O valor esperado de uma grandeza termodinâmica A , no equilíbrio é dado por

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i A_i e^{\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right)}, \quad (12)$$

onde Z é a função de partição canônica e A_i o valor de A no estado de energia E_i . O somatório em i é efetuado sobre todos os microestados acessíveis ao sistema. Como vimos anteriormente, esta soma se torna inviável, então o MMC escolhe as M configurações mais importantes de cada temperatura e calcula as quantidades físicas por meio da média:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_i^M A_i \quad (13)$$

obtida em simulações.

As configurações são obtidas por uma cadeia de Markov. A probabilidade de transição entre as configurações é dada por

$$W = e^{-\left(\frac{E'_i - E_i}{k_B T}\right)} \quad (14)$$

onde W é a probabilidade de transição entre as configurações de energia E_i e E'_i , k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura ^[11].

Com o intuito de realizar a amostragem por importância, utilizaremos o algoritmo de Metrópolis, que consiste na aceitação, ou não, de um estado acessível, de forma a equilibrar o sistema após vários testes de configurações, para que a “melhor” configuração seja aquela prevista pela distribuição de probabilidade de Boltzmann^[8].

Isso é possível quando se segue uma probabilidade relacionada com o estado anterior e do possível novo estado. Isso significa que a configuração do novo estado depende do estado atual. Esse tipo de processo é conhecido como processo Markoviano (ou cadeia de Markov), que é um processo estocástico. Este processo Markoviano deve garantir que um estado do sistema pode ser atingido por qualquer outro (ergodicidade)^[8].

O algoritmo de Metrópolis tende a representar uma minimização da perda de energia de um sistema da seguinte forma:

1. Inicia-se o sistema com uma configuração de spin aleatória.
2. Seleciona-se aleatoriamente um sítio i da rede, e sorteia-se um novo spin \vec{S}' .
3. Calcula-se a variação de energia, $\Delta E = E(\vec{S}') - E(\vec{S})$.
4. Sorteia-se um número aleatório z no intervalo $[0,1]$.
5. Se $z < W$, sendo W a probabilidade de transição, troca-se \vec{S} por \vec{S}' . Caso contrário, mantém-se a configuração anterior.
6. Retorna ao passo 2.

Gera-se assim uma sequência de configurações. Porém deve-se executar estes passos várias vezes para se obter a configuração de equilíbrio na temperatura de interesse.

O Nanodisco Magnético

Ao se definir um nanodisco, recortamos um disco fino de raio R dentro de uma região quadrada de tamanho linear L . O espaçamento entre os sítios são considerados uma unidade, i.e. $a=1$. A interação magnetostática é substituída por potenciais locais que simulam as interações entre os vetores em um nanodisco real, que pode ser descrito pela Hamiltoniana:

$$H = - \sum_{i,j} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_k C_{Borda} (\vec{S}_k \cdot \hat{n}_k)^2 - \sum_i \vec{h}_{ext} \cdot \vec{S}_i + \lambda \sum_{i,j} (\vec{S}_i \cdot \hat{n}_t)^2, \quad (15)$$

onde o primeiro termo a direita da igualdade identifica o modelo de Heisenberg isotrópico

ferromagnético ($J_{ij} > 0$), \vec{S}_i é o vetor magnetização no sítio i , o segundo termo diz respeito a interação entre os spins da borda, C_{Borda} é a constante que representa a tendência de os vetores pertencentes a “espessura” se manterem alinhados aos vetores \hat{n}_k tangentes a borda do disco, o vetor perpendicular a borda do disco \hat{n}_k pode ser facilmente encontrado pois o mesmo é radial, ou seja, seu prolongamento sempre passa pelo centro do disco. O terceiro termo representa a interação do sistema com um campo magnético externo que pode ser estático ($\vec{h}_{ext} = \vec{h}_0$), ou oscilante ($\vec{h}_{ext} = \vec{h}_1 \sin(\omega t)$). O quarto e último termo é o de anisotropia, sendo λ a constante de anisotropia e \hat{n}_t o vetor perpendicular a “tampa” do disco, ou seja, perpendicular ao plano onde se encontram os spins.

O caso em que o campo externo é oscilante é mais indicado quando se usa a dinâmica de spin, uma poderosa ferramenta na investigação da evolução temporal da magnetização em sistemas magnéticos. Existem também os casos em que o campo ora é estático, ora oscilante.

Neste trabalho simulamos dinâmicas apenas com campo estático, aplicados na direção do eixo z , e invertendo o sentido do mesmo gradativamente.

O Nanomagnetismo Elíptico

Para definirmos a nanomagnetismo elíptico, consideraremos os pontos interiores a elipse definida pelos eixos maior e menor respectivamente iguais a $2a$ e $2b$. Todos os pontos internos a elipse constituem uma região do nosso nanomagnetismo elíptico. Neste caso os spins do sistema são distribuídos nesse nanomagnetismo elíptico, com a distância entre os spins igual a 1.

A Hamiltoniana que descreve a interação magnetostática é a mesma do exemplo do nanodisco, porém o vetor \hat{n} perpendicular a borda do nanomagnetismo elíptico, é definido de forma diferente, baseando-se nas posições dos focos e dos pontos na borda da elipse. O cálculo do vetor para o caso citado é descrito no Anexo I.

CAPÍTULO 3

Metodologia

Foram utilizados nesse trabalho, softwares de código aberto, como o *Sistema Operacional Linux Ubuntu*, *Intel(R) Fortran Compiler XE 12.1* para a compilação do código fonte, *GEOGEBRA*, *XMGRACE* e *GNUPLOT* para geração das figuras e gráficos. As simulações foram realizadas em um computador portátil com processador *Intel Core i7-2630QM de quatro núcleos CPU 2.0GHz* e 4 GB de memória RAM.

Para se obter as propriedades estáticas de sistemas magnéticos, utilizamos principalmente as simulações computacionais, nesse caso, implementamos a técnica de Monte Carlo, utilizando a dinâmica de Metrópolis (atualização de um único spin).

Com esses métodos utilizados, calculamos grandezas termodinâmicas de equilíbrio, como por exemplo, magnetização e energia.

Utilizaremos a análise das curvas de histerese para obter informações detalhadas sobre o estado remanescente de magnetização dos nanodiscos em campo externo nulo e sobre o mecanismo pelo qual a magnetização reage a aplicação de campo externo. Estas curvas são importantes por mostrarem o comportamento da magnetização de modelos não teóricos, uma vez que os modelos teóricos teriam a mesma evolução em qualquer ordem de inversão dos campos. Com a utilização de modelos computacionais experimentais a ordem de inversão do campo nos mostram curvas diferentes para cada caso, conforme podem ser observados nos resultados apresentados no Capítulo 4.

CAPÍTULO 4

Resultados e Discussões

Nos resultados que se seguem, foram utilizados discos de raio $R=10a$ (a espaçamento de rede). As médias foram calculadas depois de descartar as 10^6 configurações geradas a partir de configurações iniciais aleatórias e as médias foram calculadas sobre 100 independentes realizações, uma vez que esses valores nos permitiram uma simulação relativamente razoável para obter resultados com a potência computacional no tempo disponível. O valor do parâmetro de anisotropia $\lambda=0.15$, foi o mesmo utilizado na referência [17], obtidas de acordo com os parâmetros experimentais para nanodiscos feitos de Permalloy.

Uma primeira análise realizada foi feita plotando as configurações dos spins do nanodisco magnético. As figuras são geradas pelo *GNU PLOT*^[4], para estudar os perfis dos spins na rede. Como podemos observar nas Figuras 1 e 2, essas são as duas configurações de ocorrência mais frequente: vórtice (Figura 1) e Meio Vórtice (Figura 2).

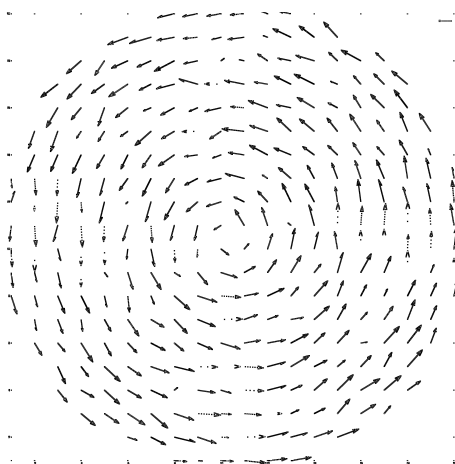


Figura 1 - Vórtice

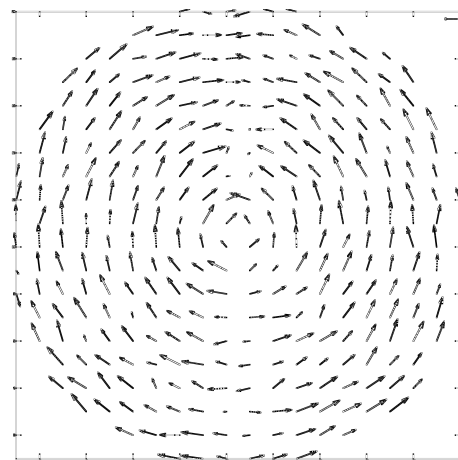


Figura 2 - Meio Vórtice

O comportamento dos spins na rede também depende do estado de magnetização da

mesma, em todas as nossas simulações a direção do campo é na direção do eixo Y (verticalmente), onde seu sentido acaba sendo invertido durante as simulações. Para a constante de borda (C_b) igual a 6, espessura da borda $4a$ e $T=0.25$, consideremos as configurações formadas para campos iguais a $B=1, 0, -1$, respectivamente nas Figuras 3, 4 e 5:

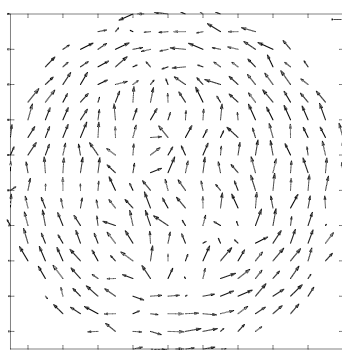


Figura 3 - Configuração de spins, Espessura da Borda = $4a$ e $B = 1$.

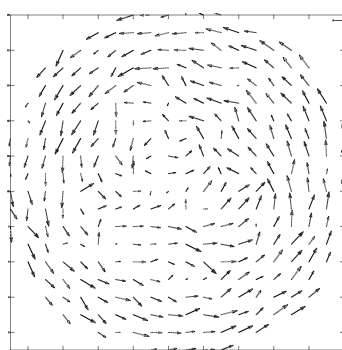


Figura 4 - Configuração de spins, Espessura da Borda = $4a$ e $B = 0$

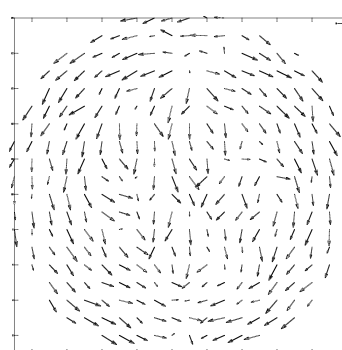


Figura 5 - Configuração de spins, Espessura da Borda = $4a$ e $B = -1$

Mantendo os mesmos parâmetros anteriores e alterando a espessura da borda para $7a$, para os valores de campo $B=1, 0, -1$, obtemos:

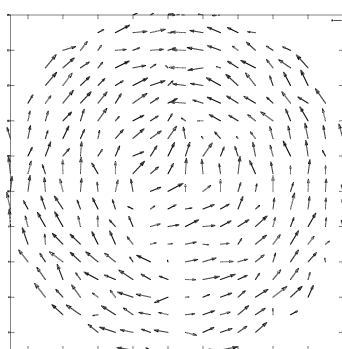


Figura 6 - Configuração de spins, Espessura da Borda = $7a$ e $B = 1$.

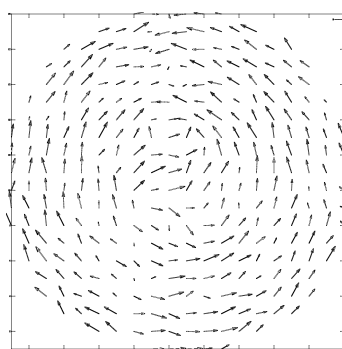


Figura 7 - Configuração de spins, Espessura da Borda = $7a$ e $B = 0$.

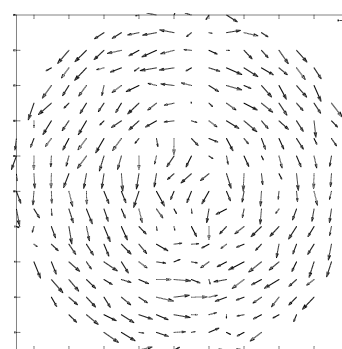


Figura 8 - Configuração de spins, Espessura da Borda = $7a$ e $B = -1$.

Os spins tendem a adquirir a mesma direção e sentido do campo aplicado na configuração meio vórtice, exceto a campo nulo onde se caracteriza uma configuração de vórtice, onde não se preserva nenhuma direção preferencial. É razoável inferir que, a temperaturas relativamente baixas, a espessura da borda influencia no perfil de spins favorecendo a formação de vórtices e meios vórtices, conforme a literatura^[9].

Por outro lado, como forma de analisar a formação de vórtices e meios vórtices, utilizaremos a curva de histerese, que mostra informações sobre o estado remanescente de magnetização e a maneira como a magnetização reage ao campo externo, conforme descrito no Capítulo 3.

Um fator importante é o que chamamos aqui de constante de borda (C_b), que está relacionada diretamente com a energia magnetostática dos spins borda, conforme a hamiltoniana que modela nossas simulações.

Inicialmente verificaremos a curva de histerese gerada para um nanodisco com as características descritas no primeiro parágrafo, $C_b=2$ e $T=0.1$ para três tamanhos distintos de espessura da borda ($4a$, $7a$ e $10a$):

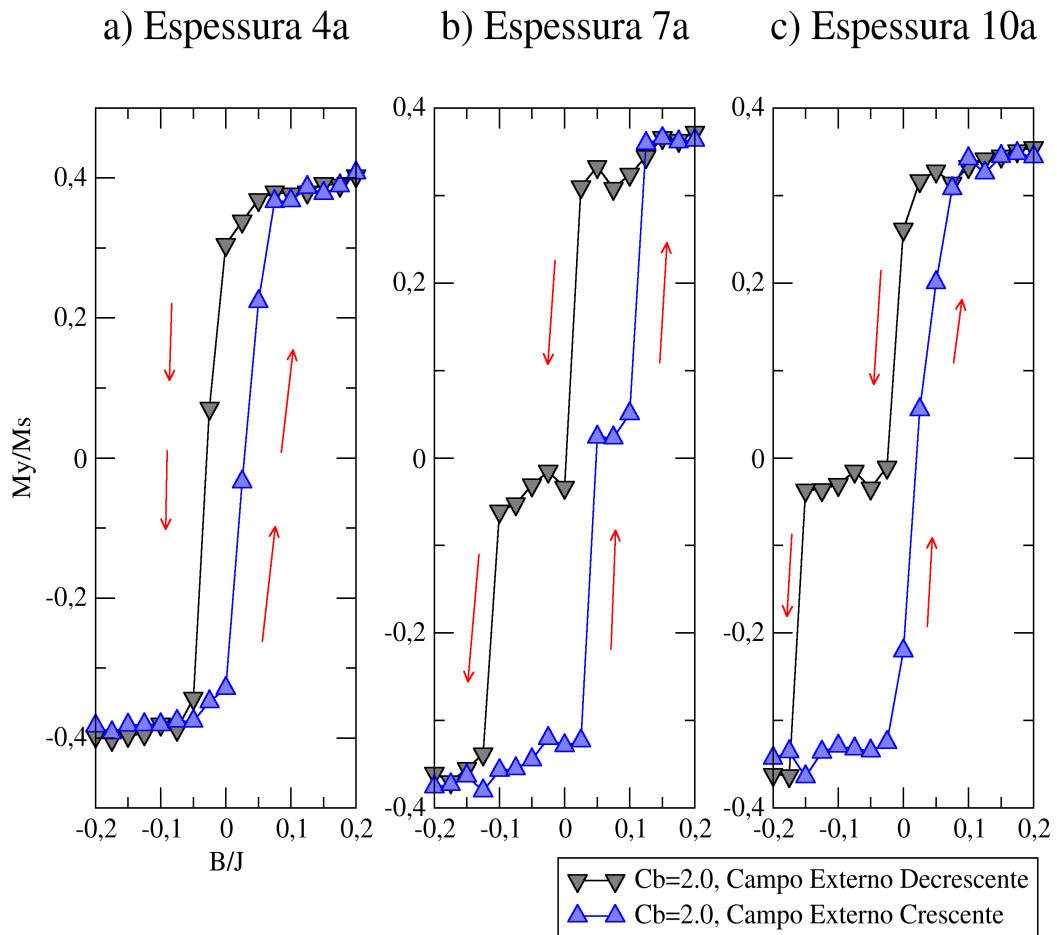


Figura 9 - Curva de Histerese, $C_b=2.0$ e $T=0.1$

Observa-se que a espessura da borda tem uma importância crucial na formação de configurações de tipos vórtice ou meio vórtice, pelo menos para o caso do campo externo crescente, considerando uma temperatura e uma C_b relativamente baixas ($C_b=2$ e $T=0.1$). Em simulações não mostradas no gráfico acima, observa-se a maior incidência de formação de vórtices em espessuras maiores que $5a$, por exemplo, para o caso do disco de raio

$R=10a$.

Repetiremos o mesmo teste anterior variando apenas o parâmetro $C_b=10$, para os mesmos valores de espessuras:

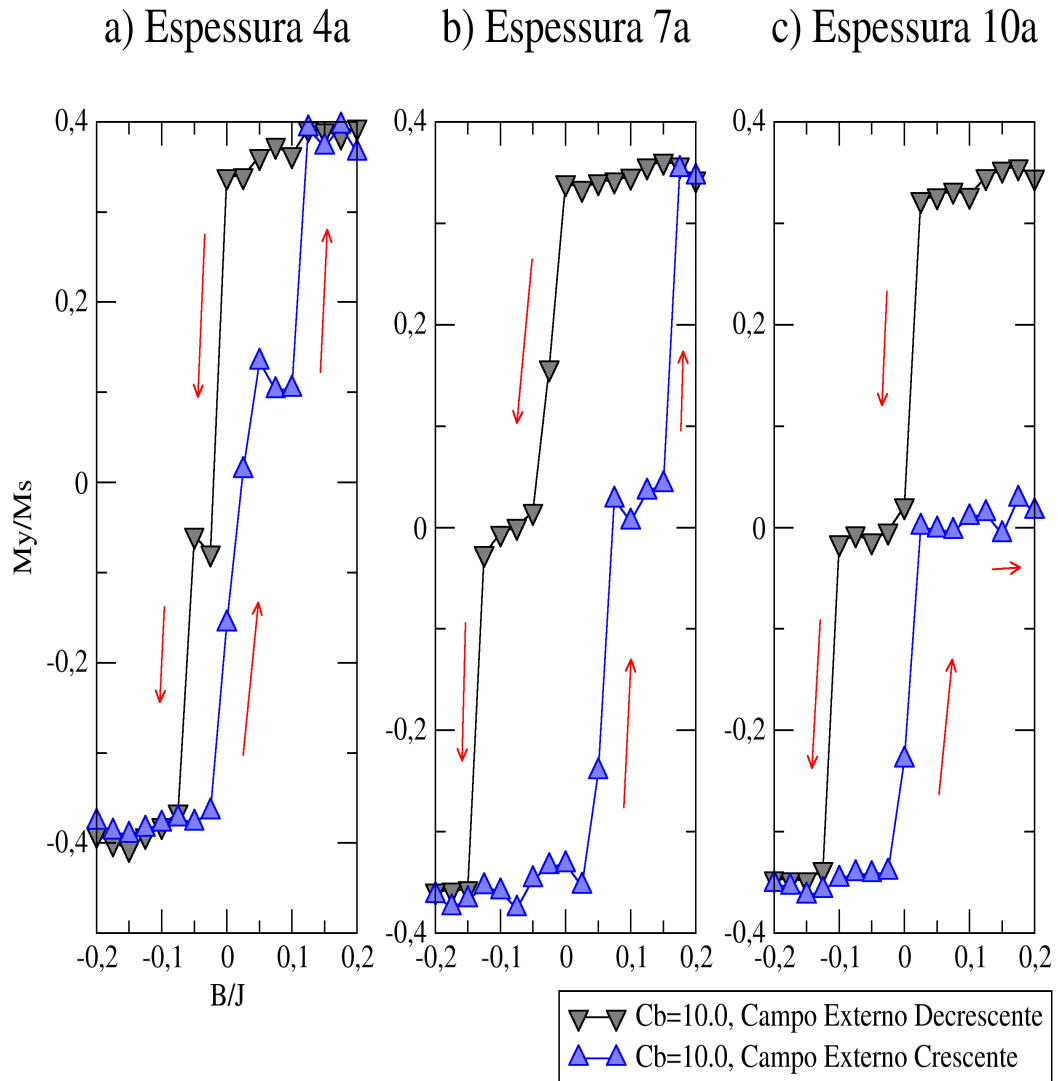


Figura 10 - Curva de Histerese, $C_b=10.0$ e $T=0.1$

Vemos que o valor de C_b está diretamente ligado a frequência da ocorrência de configuração de equilíbrio tipo vórtice e meio vórtice. Esses resultados também reforçam o que foi verificado anteriormente quanto a formação de vórtices serem mais raras para espessuras de borda menores, a configuração meio vórtice nesses casos é mais comum a campo externo próximo de zero.

A temperatura do sistema também foi modificada em nossas simulações, a Figura 11 mostra alguns resultados obtidos para $C_b=10$ e $T=0.45$, com as espessuras de $4a$ e $7a$, respectivamente:

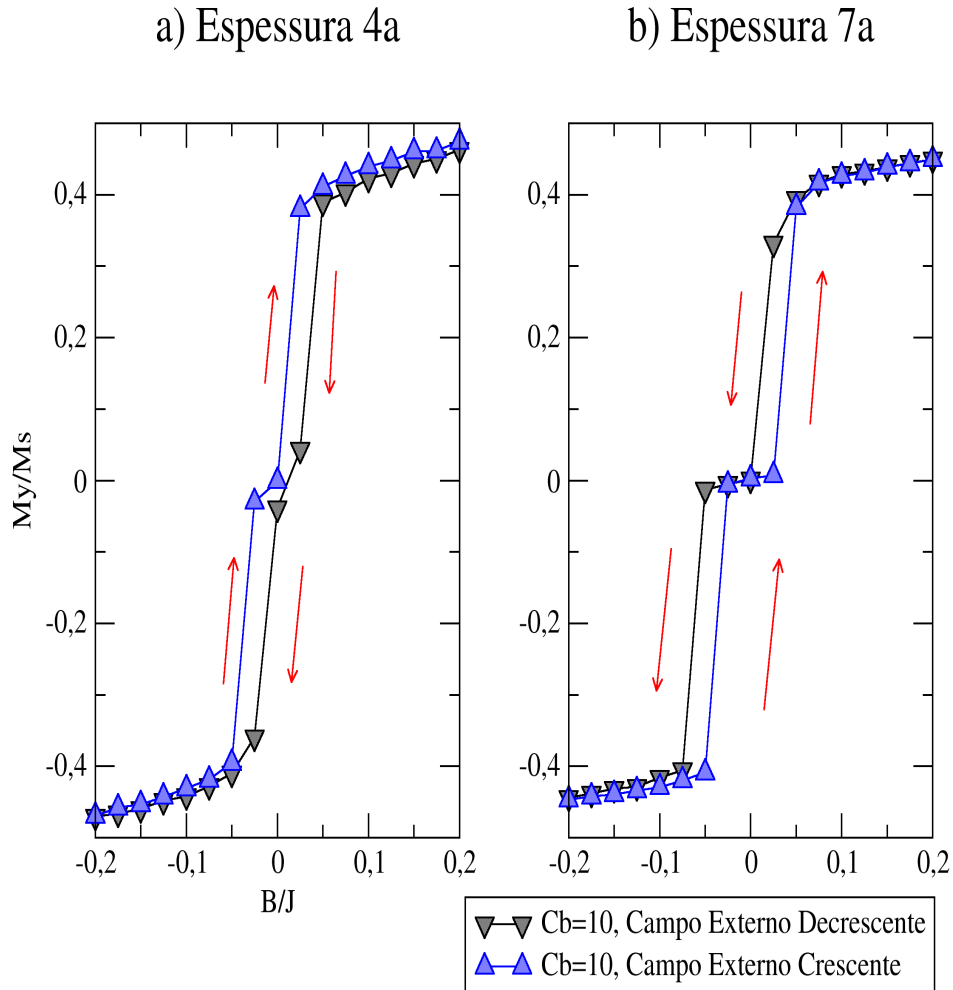


Figura 11 - Curva de Histerese, $C_b=10.0$ e $T=0.45$

Em nossas simulações observamos que um ligeiro aumento da temperatura faz com que a inversão da variação do campo de decrescente para crescente produzam resultados bem mais semelhantes independente dos valores entre $C_b=1.0$ e $C_b=10.0$. Essa tendência não se manteve a temperaturas relativamente mais altas como $T=1.0$ e $T=2.0$, a C_b também não aparentou ter alguma influência nas propriedades do sistema. Isto é devido às flutuações térmicas que desordenam as direções dos spins no nanodisco.

CAPÍTULO 5

Conclusões e perspectivas

Recentemente Kireev e Ivanov^[20] estudaram os estados fundamental e meta estável de Nanodiscos Magnéticos. Utilizando o modelo de Heisenberg, simulações numéricas e um termo descrevendo a anisotropia, concluíram que a configuração de Meio Vórtice é mais favorável que a tipo Vórtice energeticamente. Posteriormente, Marques^[9] em suas simulações levou consideração a espessura da borda, não citada em trabalhos anteriores, mostrando que a mesma influencia consideravelmente o estabelecimento do estado fundamental dos Nanodiscos Magnéticos.

No presente trabalho, por meio de um modelo diferente^[17], reproduzimos resultados semelhantes. Verificamos também que a espessura da borda influencia na formação de vórtices e meios vórtices, tanto como a constante de borda e a temperatura. Verificamos tais resultados por meio das curvas de histerese e analisando o perfil dos spins no nanodisco magnético.

Como perspectiva, pretendemos desenvolver um estudo mais extenso capaz de abordar os sistemas nanomagnetos elíptico. Com posterior produção de artigos científicos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] - ARANTES, F. R. Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo (2010). **Estudo do comportamento magnético de nanopartículas de magnetita e nanofios de níquel diluídos em cristais líquidos liotrópicos.**
- [2] - ASHCROFT, N.W., MERMIM, N.D. “**Solid State Physics, International Edition**”, ed. D.G. Crane (Saunders College Publishing, 1976) p. 674,679 .
- [3] - BINDER, K. Prog. Phys. **60**, (1997) 487-559.
- [4] – CAPELLARI, C. A. **Introdução ao Gnuplot**. Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, abril 2004.
- [5] - BRITO, A. F. Tese de Mestrado, Universidade Federal de Viçosa (2003). **Transições de rugosidade no modelo de Ising unidimensional com interações de alcance longo.**
- [6] - CHOU, S. Y., WEI, M., KRAUSS, P. R., and FISCHER, P. B. J. Appl. Phys. **70**, 6673 (1994).
- [7] – GUIMARAES, A. P. **INTRODUÇÃO AO NANOMAGNETISMO**. Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 2006.
- [8] - MARIA, M. E. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” (2009). **Propriedades magnéticas do modelo de Ising bidimensional em uma rede bipartida de spins $\frac{1}{2}$ e 1: Um estudo de ferrimagnetismo com vacâncias.**
- [9] - MARQUES, I. A. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Juiz de Fora (Março de 2007). **Estudo, via simulações, do comportamento de Vórtices em Nanodiscos Magnéticos.**
- [10] - MOL, L. S. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Viçosa (2004). **ESTUDO DE MATERIAIS MAGNÉTICOS DE BAIXA DIMENSIONALIDADE DOPADOS COM IMPUREZAS NÃO MAGNÉTICAS.**
- [11] - OLIVEIRA-NETO, N. M. Tese de Doutorado, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

(2006). **ÁLGEBRAS DE HEISENBERG GENERALIZADAS: PARTÍCULAS COMPOSTAS E ESTADOS DE QUASE-EQUILÍBRIO.**

[12] - PEREIRA, A. R., PIRES, A. S. T. **TEORIA QUÂNTICA DE CAMPOS EM SISTEMAS MAGNÉTICOS DE BAIXAS DIMENSÕES.** Minas Gerais, maio 2008. Disponível na internet em: <http://www.ufv.br/dpf/didaticos.htm>, acesso em 29 abr. 2011.

[13] – PAULA, F. M. Tese de Mestrado, Universidade Federal de Viçosa (2006). **Influência de vacâncias de spin na dinâmica de vórtices em sistemas magnéticos bidimensionais.**

[14] - PINTO, F. C. Tese de Mestrado, Faculdade de Engenharia/Faculdade de Ciências da Universidade do Porto (1999). **Um estudo computacional do modelo de Ising.**

[15] - PULWEY, R., RAHM, M., BIBERGER, J., and WEISS, D., *IEEE Trans. Magn.* **37** (2001)

[16] - SANTOS, V. L. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Viçosa (Fevereiro de 2008). **Soluções topológicas de spins no toro.**

[17] - SILVA, R. L. Dissertação de Mestrado, Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa (2009). **Dinâmica de spins na presença de defeitos em estruturas magnéticas confinadas: Aplicações a nanodiscos magnéticos.**

[18] - SMYTH, J. F. *et al*, *J. Appl. Phys.* **69**, 5262 (1991).

[19] - KITTEL, C., **Introduction to Solid State Physics.** 7a ed., John Wiley and Sons, Inc., New York, (1996)

[20] - KIREEV, V. E., IVANOV, B.A. *Physical Review B.* Vol. 68, Pg. 104428. Ano 2003

ANEXOS

Anexo I – Cálculo do Vetor Perpendicular à Borda da Elipse

A elipse tem a propriedade de que a bissetriz do ângulo formado pelos dois focos e por um ponto qualquer da elipse (com vértice) é perpendicular à tangente à elipse nesse ponto.

Na figura abaixo ilustramos os focos F e F' e um ponto M , considere o ângulo $\widehat{FMF'}$, nesse caso a bissetriz deste ângulo é perpendicular à elipse. Podemos utilizar essa bissetriz para definir o vetor unitário $\hat{\eta}$ perpendicular a borda da elipse.

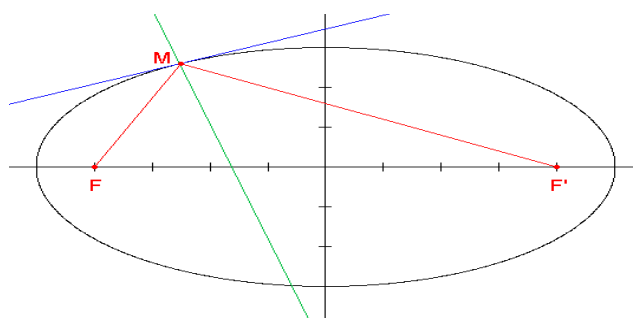


Figura I.1 - Elipse

Porém, para calcular as coordenadas do vetor $\hat{\eta}$ em função do eixo maior a , excentricidade e e o centro da elipse (r_o, r_o) com valores iguais por simplicidade, devemos primeiro calcular a excentricidade, dada por,

$$e = \frac{\sqrt{(a^2 - b^2)}}{a}$$

na Figura I.2 ilustramos como exemplo os itens utilizados neste cálculo do vetor $\hat{\eta}$, o ângulo α é formado pela reta que liga F ao ponto da borda da elipse escolhido e o segmento $\overline{FF'}$, analogamente para β , porém a reta parte de F' , para calcular esses ângulos utilizaremos algumas propriedades da trigonometria.

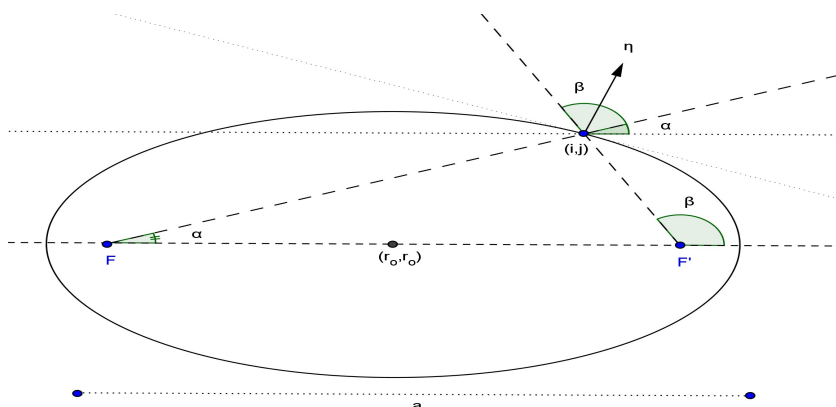


Figura I.2 - Cálculo do Vetor Tangente a borda da Elipse

Observe que,

$$\cos \alpha = \frac{i - r_o + a.e}{\sqrt{(j - r_o)^2 + (i - r_o + a.e)^2}} \text{ e}$$

$$\cos \beta = \frac{i - r_o - a.e}{\sqrt{(j - r_o)^2 + (i - r_o - a.e)^2}},$$

sabendo estes valores podemos calcular cada ângulo separadamente, por exemplo:

$$\alpha = \cos^{-1} \frac{i - r_o + a.e}{\sqrt{(j - r_o)^2 + (i - r_o + a.e)^2}} \text{ e}$$

$$\beta = \cos^{-1} \frac{i - r_o - a.e}{\sqrt{(j - r_o)^2 + (i - r_o - a.e)^2}},$$

dessa forma, o ângulo formado entre vetor η e a reta paralela a $\overline{FF'}$ passando pelo ponto escolhido da borda é dado por

$$\gamma = \frac{\beta - \alpha}{2} + \alpha = \frac{\alpha + \beta}{2},$$

logo temos as coordenadas do vetor η perpendicular a borda da elipse dada,

$$\hat{\eta} = (i + \cos \gamma, j + \sin \gamma).$$