

Um Estudo de Nano-partículas Magnéticas via Simulação Computacional

Julio Cesar Siqueira Rocha

Orientador: Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa

Tese apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em Física.

Dezembro 2011

*Aos meus pais,
Augusto Olímpio Rocha e
Maria das Graças Siqueira Rocha.*

Agradecimentos

Ao Prof. Bismarck pela orientação, pelas oportunidades e amizade. Aos nossos colaboradores e amigos da Universidade Federal de Juiz de Fora: Rodrigo, Sidiney, Pablo e Danilo.

Aos meus pais, que com muito sacrifício, luta e garra, me deram todo o suporte. Aos meus irmãos Gustavo, Carlos Eduardo e Fabíola pelo apoio, assim como a minha cunhada Valesca.

A Kellynha, minha princesa, pelo amor, carinho e compreensão, não vislumbro um dia da minha vida sem ela. Também agradeço à sua família, principalmente aos seus pais Sr. Eurípedes e Dona Elizete, que sempre me receberam de braços abertos.

Aos professores do ICEx, principalmente do Departamento de Física. Em especial ao Prof. Wagner Corradi pelas oportunidades e, principalmente, pelo papel fundamental que teve na minha formação. Ao Prof. Renato las Casas pela consideração em me convocar para os eventos do observatório.

Aos colegas do laboratório de simulação Marcela Rapini, Anderson Lima, Marcelo Guimarães, Lucas Mól, Anna Lúcia, Romero, Alexandre Soares, Manassés, Denis da Mata e Thiago, pelos esclarecimentos, sugestões, conversas e acima de tudo pela amizade.

A todos os colegas de curso, muitos se tornaram grandes amigos, em especial Daniel, Alex, Guilherme, Gabriela, Gustavo, Thiago e Gessy. E principalmente a Maria Clara cujo apoio e incentivo foram fundamentais durante todos esses anos.

A todos os meus familiares, em especial a tia Fina, tia Jorlanda, tia Tereza, tia Manuelina e ao meu primo Euvécio pelo suporte. Ao tio Geraldo e tia Lete pelas conversas e apoio. A tia Mercês pelo carinho maternal. Ao tio Agnaldo pelo apoio.

Aos funcionários técnico-administrativos da UFMG, principalmente do ICEx e do Departamento de Física. Em especial as secretárias da pós-graduação Marluce e Ieda e as bibliotecárias Clarice e Shirley.

Ao CNPq pela concessão da bolsa e, assim como a FAPEMIG, pelo suporte ao laboratório de simulação.

A Deus.

Resumo

Neste trabalho apresentamos um estudo computacional de magnetismo em nano-escala. Modelamos as propriedades magnéticas de nano-partículas usando um modelo de spins clássicos na rede. Em nosso modelo consideramos interações de troca e dipolar. Enquanto o termo de troca age somente entre primeiros vizinhos o segundo é de longo alcance e deve ser computado entre todos os spins do sistema. Neste trabalho nós discutimos modelos alternativos para o termo de dipolo. Nossos cálculos mostram que as interações dipolares não podem ser aproximadas por qualquer corte no potencial.

A influência da geometria da nano-partícula e a aplicação de campos externos na formação de estruturas do tipo vórtice foi estudada em diversas situações. Nós determinamos as condições em que um vórtice aparece como o estado fundamental do modelo e como sua morfologia é afetada pela geometria da nano-partícula. Pares de vórtice-antivórtice aparecem no sistema quando aumentamos a temperatura. Acredita-se que a criação e aniquilação desses pares é o mecanismo de inversão de polaridade do vórtice. Nossas simulações não corroboram este mecanismo.

Avaliamos, também, o comportamento das nano-partículas na presença de um campo magnético externo. Obtivemos curvas de histerese típicas de nanoestruturas. Estudamos o efeito de Exchange-bias, considerando nano-discos depositados sobre substratos antiferromagnéticos.

Abstract

In this work we present a computational study of magnetism in nano-scale. We modeled the magnetic properties of nano-particles using a classical spins model defined in a lattice. In our model we consider exchange and dipolar interactions as well. The former acts only between first neighbors while the latter is long-ranged and must be computed between all the spins on the system. We have discussed alternative models for the dipole term. Our calculations show that the dipolar interactions cannot be approximated by any cutoff in the potential.

The influence of the geometry of the nano-particle and the application of external fields in the formation of vortex structures were studied in several situations. We have determined the conditions under which a vortex appears as the ground state of the model and how their morphology is affected by the geometry of the nano-particle. Vortex-antivortex pairs appear in the system when the temperature is raised. It is believed that a vortex-antivortex creation and annihilation mechanism is responsible for the polarity switching of the vortex. Our simulations do not give support to this mechanism.

We have also studied the behavior of nano-particles in the presence of an external magnetic field. Typical nanostructures hysteresis curves were obtained. The effect of exchange-bias in nano-disks deposited over antiferromagnetic substrates is also considered.

Sumário

Agradecimentos	p. iii
Resumo	p. iv
Abstract	p. v
Lista de Figuras	p. ix
Lista de Tabelas	p. xii
Preâmbulo	p. 1
1 Introdução	p. 3
1.1 Vórtices em Nano-partículas magnéticas	p. 3
1.1.1 Nano-partículas	p. 3
1.1.2 Vórtice Magnético	p. 9
1.2 Comportamento magnético	p. 12
1.2.1 Curva de Histerese de nano-partículas	p. 12
1.2.2 Efeito de Exchange-bias	p. 13
1.3 Modelo de spins clássicos	p. 16
1.3.1 Hamiltoniano	p. 16
1.4 Métodos Numéricos	p. 20
1.4.1 Minimização	p. 20
1.4.2 Dinâmica de Spins	p. 22

2	Resultados	p. 25
2.1	Diagrama de Formação de Vórtices	p. 25
2.1.1	Definindo um corte na interação dipolar	p. 25
2.1.2	Tipos de Rede	p. 27
2.1.3	Espessura	p. 33
2.2	Forma geométrica	p. 34
2.2.1	Base Quadrada	p. 34
2.2.2	Base Triangular	p. 41
2.3	Efeitos de temperatura	p. 43
2.4	Comportamento magnético	p. 45
2.4.1	Curva de Histerese de nano-partículas	p. 45
2.4.2	Efeito de Exchange-bias em nano-partículas	p. 47
3	Conclusão	p. 61
	Apêndice A – Formação de degraus nas curvas de histerese	p. 63
	Apêndice B – Campo efetivo gerado pelo substrato	p. 65
	B.1 Termos constantes	p. 66
	Apêndice C – Condição de espessura mínima	p. 68
	Apêndice D – Limite para o campo aplicado	p. 72
	D.1 Energia dos estados	p. 74
	D.2 Anisotropia Mínima	p. 75
	Apêndice E – Artigos	p. 77
	E.1 Publicados	p. 77
	E.2 Aceitos para Publicação	p. 77

E.3 Submetidos p.77

Referências Bibliográficas p.78

Lista de Figuras

1.1	Posições possíveis dos spins em uma rede cúbica.	p. 4
1.2	Formatos das nano-partículas.	p. 8
1.3	Classificação dos vórtices e antivórtices.	p. 9
1.4	Estado capacitor.	p. 10
1.5	Estados degenerados dos vórtices.	p. 10
1.6	Par vórtice-antivórtice	p. 11
1.7	Esquema do mecanismo de inversão da polarização.	p. 11
1.8	Curva de histerese típica.	p. 12
1.9	Curva de histerese experimental para nano-partículas.	p. 13
1.10	Esquema da magnetização das nano-partículas.	p. 14
1.11	Esquema das configurações de spins para se observar o efeito de Exchange-bias.	p. 15
1.12	Fluxograma do algoritmo de Metropolis.	p. 22
2.1	Visualização do raio de corte.	p. 26
2.2	Diagrama para formação de vórtices em nano-discos	p. 27
2.3	Comportamento da componente fora do plano \mathbf{M}_\perp em função da intensidade da interação dipolar D/J	p. 28
2.4	Diagrama para formação de vórtices para as rede triangular, quadrada e hexagonal.	p. 29
2.5	Tipos de rede. Em (a) rede quadrada, em (b) rede hexagonal e em (c) rede triangular.	p. 31
2.6	Vórtices em diferentes tipos de rede.	p. 32
2.7	Direção dos cortes das superfícies para formação de vórtice fora-do-plano.	p. 33

2.8	Comparação entre os diagramas de formação de vórtices para rede hexagonal com duas camadas e uma camada.	p. 34
2.9	Configuração de spins na superfícies de nano-partículas cúbicas.	p. 35
2.10	Configuração de spins na borda de uma nano-partícula de base quadrada. . . .	p. 36
2.11	Configurações possíveis da magnetização das arestas em função da polarização do centro do vórtice.	p. 36
2.12	Esquema das configurações das magnetizações das arestas para redes limitadas por um quadrado.	p. 37
2.13	As duas configurações possíveis para o vértice da nano-partícula.	p. 37
2.14	Energia em função do multiplicador α para nano-partícula de base quadrada.	p. 39
2.15	Nano-partícula de base triangular.	p. 42
2.16	Energia em função do multiplicador α para nano-partícula de base triangular.	p. 43
2.17	Configuração típica da distribuição de pares vórtice-antivórtice em uma rede hexagonal.	p. 44
2.18	Densidade de pares vórtice-antivórtice ρ_{v-a} em função da temperatura.	p. 44
2.19	Reprodução das curvas de histereses típicas das nano-partículas.	p. 46
2.20	Degraus das curvas de histerese vistos em detalhe.	p. 46
2.21	Campo de saturação em função da constante dipolar.	p. 47
2.22	Rede cúbica de corpo centrado vista como duas redes cúbicas simples entrelaçadas.	p. 48
2.23	Nano-disco ferromagnético crescido epitaxialmente sobre um substrato anti-ferromagnético.	p. 49
2.24	Curvas de histerese considerando os spins do substrato congelados.	p. 50
2.25	Curva de histerese apresentado exchange-bias para spins do substrato tipo-Ising.	p. 52
2.26	Curvas de histerese para o substrato Heisenberg com plano-fácil.	p. 52
2.27	Esquema da configuração de spins para o substrato tipo Heisenberg, com plano de magnetização fácil e integral de troca ferromagnética na interface. .	p. 53
2.28	Esquema da configuração de spins para o substrato tipo Heisenberg e integral de troca antiferromagnética na interface.	p. 54

2.29	Campo de saturação em função da constante dipolar para os substratos não magnético e Heisenberg com plano de magnetização fácil.	p. 55
2.30	Curvas de histerese para vários valores de anisotropia.	p. 56
2.31	Configurações de spins possíveis para o substrato do tipo Heisenberg: Em (a) antiferromagnético (AFM), em (b) a spin-flop (SF) e em (c) saturado (S). . .	p. 57
2.32	Diagrama mostrando as fases do substrato, antiferromagnético (AF), saturado (S) e spin-flop (SF), no espaço de campo aplicado em função da integral de troca do substrato.	p. 57
2.33	Comportamento magnético do nano-disco em função da espessura do substrato.	p. 58
2.34	Curvas de histerese apresentado exchange-bias com spins do tipo Heisenberg clássico.	p. 59
2.35	Campo de exchange bias em função da integral de troca da interface, para os substratos congelado, tipo Ising e tipo Heisenberg clássico.	p. 59
A.1	Esquema da magnetização em vórtices.	p. 64
C.1	Configuração de spins do substrato para análise de espessura mínima.	p. 69
C.2	Esquema da configuração de spins para as duas primeiras camadas atômicas do substrato tipo Ising com campo aplicado $\mathbf{H} = +H_s \hat{\mathbf{x}}$	p. 69
D.1	Esquema da configuração de spins para o substrato tipo Heisenberg, eixo de magnetização fácil, integral de troca ferromagnética na interface e campo de saturação no sentido $-\hat{\mathbf{x}}$	p. 73

Lista de Tabelas

1.1	Proporção do número de sítios na superfície para uma nano-partícula cúbica. .	p. 5
1.2	Alguns comprimentos característicos em magnetismo e suas magnitudes usuais.	p. 5
1.3	Magnetização de saturação a temperatura ambiente , constante de anisotropia, rigidez de troca para o ferro, cobalto, níquel e permalloy	p. 6
1.4	Estimativa da magnetização de saturação, rigidez das ondas de spin, constante de anisotropia e tamanho mínimo para se observar ondas de spin, a temperatura ambiente.	p. 8
2.1	Constantes utilizadas para descrever o comportamento da linha de crossover em redes diferentes.	p. 29
2.2	Parâmetros típicos das redes quadrada, triangular e hexagonal.	p. 31
2.3	Constantes utilizadas para descrever o comportamento da linha de crossover em redes com espessura diferentes.	p. 33
2.4	Degenerescência, estados possíveis e energia para o modelo de comportamento da componente da magnetização fora-do-plano para nano-partícula cúbica.	p. 40
2.5	Degenerescência, estados possíveis e energia para o modelo de comportamento da componente da magnetização fora-do-plano para nano-partícula triangular.	p. 42
2.6	Campo de Exchange Bias para os três tipo de substratos e a média entre eles em função da troca na interface.	p. 60

Preâmbulo

A nano-tecnologia proporcionou diversos avanços tecnológicos nos últimos 50 anos. Por exemplo, a miniaturização dos dispositivos eletrônicos, medicamentos menos tóxicos e mais eficazes que liberam a droga no local de interesse e em quantidades apropriadas, materiais mecanicamente mais resistentes e até mesmo em cosméticos. Este trabalho é uma pequena contribuição em nano-ciência que, formalmente, é entendida como:

“Nano-ciência é o estudo dos fenômenos e manipulação de materiais nas escalas atômica, molecular e macromolecular, onde as propriedades diferem significativamente da escala macroscópica.”[1]

A propriedade que nos interessa aqui é o magnetismo. O magnetismo fascina a humanidade desde a antiguidade. Várias civilizações antigas conheciam as propriedades de atração entre o ferro e a magnetita (Fe_3O_4)[2]. Um dos primeiros relatos se deve a Tales de Mileto (624 a.C. 448 a.C.), considerado o pai da filosofia, que afirmou que o magnetismo se devia à existência de almas dentro dos minerais[3].

Apesar do fenômeno ser conhecido desde a antiguidade, o primeiro tratado sobre o tema só apareceu em 1600 com Gilbert em *Do magneto, corpos magnéticos do grande magneto Terra*. Neste trabalho ele discute como a terra age como um grande magneto, com os pólos magnéticos situados próximo aos pólos geográficos. O termo pólo magnético apareceu no séc. XIII e se deve a Pierre de Maricourt.

O magnetismo passou por uma revolução no séc. XIX, iniciada com o desenvolvimento da magnetostática por Simenon Denis Poisson. Poisson introduziu o conceito de potencial, termo que foi batizado por George Green, de magnetização e momento magnético[4]. Em 1820 a relação entre magnetismo e eletricidade foi descoberta por Hans Christian Oersted, apesar dos efeitos magnéticos causados por uma corrente elétrica terem sido observados 20 anos antes por Gian Domenico Romagnosi. Naquele mesmo ano, Jean Baptiste Biot e Félix Savart anunciaram a lei quantitativa que leva seus nomes[4]. Em 1825 André Marie Ampère desenvolveu o eletroímã e sugeriu que o magnetismo natural se devia a correntes elétricas circulares nas moléculas e, dessa forma, essas se comportariam como eletroímãs. Faraday em 1831 descobriu a indução magnética e inventou o dínamo. Em 1851 ele propôs a ideia do campo magnético.

O ápice desse desenvolvimento se deu com o trabalho de James Clerk Maxwell, que unificou vários modelos empíricos, até então aparentemente não correlacionados, da teoria elétrica, magnetismo e óptica. Essa nova teoria unificada ficou conhecida como eletromagnetismo. No entanto, somente no séc. XX, com a mecânica quântica, a origem do magnetismo dos materiais ficou completamente compreendida.

O magnetismo em nano-escala é uma área muito nova; importante em ciência e tecnologia por duas razões principais. Primeiro, porque há uma grande possibilidade de descobrir-se novos fenômenos físicos; segundo, pela grande demanda por dispositivos eletrônicos miniaturizados. Entre as várias aplicações podemos citar: memórias de acesso aleatório não-volátil (MRAMs), cabeças de leitura digitais, sensores de posição e amperímetros[5, 6]. É possível que novas aplicações possam ser descobertas em alguns anos.

Uma questão importante em gravação digital é a quantidade de informação que pode ser guardada. Vários avanços tecnológicos elevaram esse limite de 10^4 bits/pol^2 na década de 70 para 10 Gbit/pol^2 nos dias atuais. O futuro dos equipamentos de alta densidade irá depender da nossa capacidade de desenvolver sensores mais sensíveis e materiais que possam guardar as informações de forma mais estável. O processo de miniaturização é sujeito a restrições impostas pelo limite superparamagnético[7, 8]. Quando as dimensões do sistema são muito pequenas, a direção de magnetização dos domínios magnéticos flutua muito rapidamente. Dessa forma, as informações armazenadas em dispositivos que utilizam estes domínios como bit podem ser perdidas. Uma possível solução para este problema, surgida recentemente, é o uso de nanopartículas como bits elementares[9, 10, 11]. Em certas condições um vórtice magnético é a configuração de spins do estado fundamental nessas partículas[12, 13, 14, 15, 16, 17]. Como veremos adiante, o vórtice tem dois estados que podem ser usadas para armazenar informação em nano-partículas. Sua vantagem em relação aos dispositivos atuais está em sua grande estabilidade. Assim sendo, o corpo principal deste trabalho é discutir as condições que levam à formação de vórtices nestes sistema, seu comportamento termodinâmico, magnético e sua morfologia.

1 *Introdução*

Neste capítulo introduzimos o conceito de nano-partículas e de vórtices magnéticos. A seguir, discutimos o comportamento magnético de nano-partículas na presença de um campo externo. Um modelo físico para descrevê-las é apresentado. Para finalizar, discutiremos brevemente as ferramentas computacionais usadas neste trabalho.

1.1 Vórtices em Nano-partículas magnéticas

1.1.1 Nano-partículas

Segundo a comissão do Departamento de Negócios e Indústria DTI (Department of Trade and Industry) do Reino Unido em colaboração com o Instituto Britânico de Padrões BSI (British Standards Institution), com o intuito de encorajar o uso de uma linguagem comum em nano-ciência, elaborou as especificações PAS (Publicly available specification) número 71 de 2005 [1] onde define:

Nano-partícula: Partícula com uma ou mais dimensões em nano-escala.

NOTA: As novas propriedades que diferem as nano-partículas dos materiais macroscópicos aparecem tipicamente à escala de tamanho crítica de $100nm$.

Nano-escala: Uma ou mais dimensões da ordem de $100nm$ ou menos.

Apesar do momento de dipolo magnético ser o ente principal de todos os fenômenos magnéticos em todas as escalas, as propriedades dos nano-magnetos são bem distintas dos magnetos macroscópicos[18]. Uma das origens de tal distinção está na sensibilidade do momento magnético em relação à simetria do sítio em que está localizado [18, 19]. Em um cristal, um sítio de volume (*bulk*) é completamente simétrico em relação à vizinhança. Na borda, essa simetria é quebrada. Isto é, um sítio de volume possui o mesmo número de vizinhos em cada direção, enquanto na borda pode haver uma ou mais direções nas quais o número de vizinhos difere das demais. Por exemplo, na direção perpendicular a uma face há menos vizinhos quando

comparada com as direções paralelas a essa face. Em uma aresta a direção paralela possui mais vizinhos que as direções perpendiculares (veja figura 1.1). De modo geral os spins tendem a se alinhar nas direções que possuem mais vizinhos, ou seja, na direção das bordas.

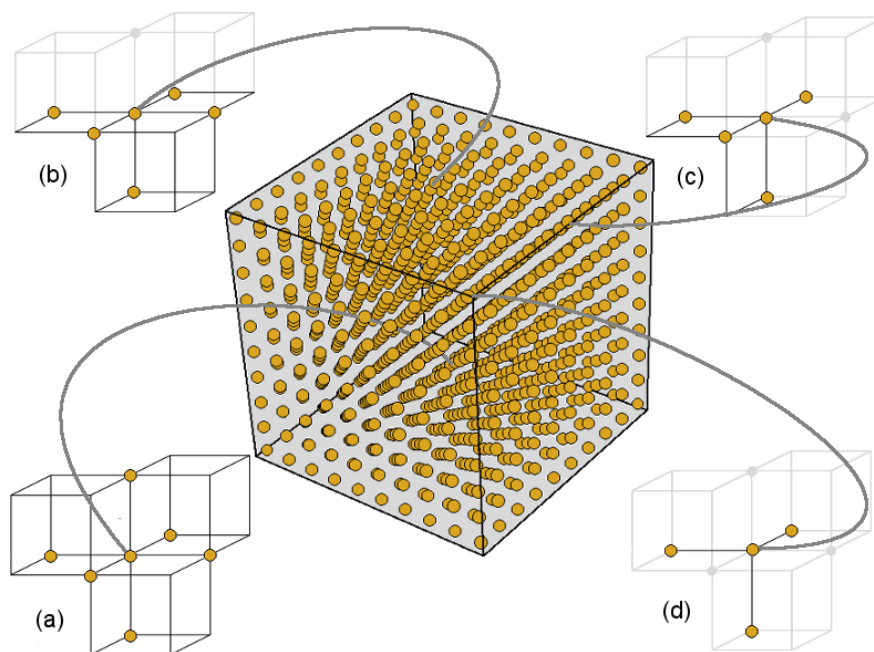


Figura 1.1: Posições possíveis dos spins em uma rede cúbica. Em (a) vemos um spin situado no volume, há dois primeiros vizinhos em cada direção cristalográfica. Em (b) temos um spin localizado em uma face. Nesse caso há dois primeiros vizinhos nas direções paralelas a face e um na direção perpendicular. Em (c) um spin situado em uma aresta. Aqui observamos dois primeiros vizinhos somente na direção paralela à aresta. Em (d) mostramos um spin no vértice que possui somente um vizinho em cada direção.

Em um magneto macroscópico o número de sítios da borda é desprezível quando comparado com o número de sítios de volume. Dessa forma, os efeitos de volume dominam o comportamento magnético desses materiais. Já na escala nanométrica o número de partículas contidas no volume e nas bordas são da mesma ordem de grandeza (veja tabela 1.1). Assim sendo, a essa escala, os efeitos de borda irão competir com aqueles típicos de volume. O mais importante desses efeitos é a anisotropia, que está relacionada às direções preferencias para a magnetização. Vamos chamar de anisotropia de superfície o efeito dos spins se alinharem paralelos à borda. Há outro tipo de anisotropia comum em nano-partículas, chamada de anisotropia de forma ou de configuração, que depende da geometria das nano-partículas [20]. As anisotropias são responsáveis pelo comportamento magnético do material como um todo. Contudo, pela escolha de uma geometria podemos obter um nano-magneto com uma dada propriedade de interesse [20]. Este fato torna muito interessante o conhecimento da física envolvida, assim como, das técnicas de crescimento, caracterização e manipulação dessas partículas.

Tabela 1.1: Proporção do número de sítios na superfície para uma nano-partícula cúbica [19, 21].

número de sítios no lado	número de sítios na superfície	número de sítios no volume	Porcentagem de sítios na superfície
5	98	125	78,5
10	488	1.000	48,8
100	58.800	1×10^6	5,9
1.000	6×10^6	1×10^9	0,6
10.000 ($> 100nm$)	6×10^8	1×10^{12}	0,006

A diferença entre os nano e macro magnetos também deve-se em parte ao fato que os primeiros, em contraste com os macroscópicos, possuem dimensões da ordem de alguns comprimentos característicos [18, 19, 22]. Mostramos na tabela 1.2 alguns exemplos de comprimentos típicos em magnetismo. Dois deles são mais relevantes quando tratamos de nano-partículas [19, 22, 23]: O comprimento de troca l_t , que é distância na qual a interação de troca é dominante [23], ou seja, representa a escala na qual os momentos magnéticos são forçados a se alinharem paralelamente devido a interação de troca [24], e a espessura das paredes de domínio δ_0 , que é a largura da região de transição entre dois domínios magnéticos [19].

Tabela 1.2: Alguns comprimentos característicos em magnetismo e suas magnitudes usuais [19].

Símbolo	Comprimento	magnitude típica (nm)
a	Distância interatômica (Fe)	$2,5 \times 10^{-1}$
d_t	Alcance da interação de troca	$\sim 10^{-1} - \sim 1$
d_{RKKY}	Alcance da interação RKKY	$\sim 10^{-1} - \sim 10$
d_c	Tamanho do domínio	$\sim 10 - 10^4$
D_{cr}^{spm}	Diâmetro crítico superparamagnético	$\sim 1 - \sim 10^2$
D_{cr}	Tamanho crítico do domínio	$\sim 10 - \sim 10^3$
δ_0	Largura da parede de domínio	$\sim 1 - \sim 10^2$
l_t	Comprimento de troca	$\sim 1 - \sim 10^2$
l_{ds}	Comprimento de difusão de spins	$\sim 10 - 10^2$
λ_{mfp}	Livre caminho médio eletrônico	$\sim 1 - 10^2$
ζ	Comprimento de coerência de supercondutividade	$\sim 1 - 10^3$
λ_F	Comprimento de onda de Fermi em metais	$\sim 10^{-1}$
λ_F	Comprimento de onda de Fermi em semicondutores	$\sim 10^2$

O comprimento de troca pode ser escrito em termos de quantidades mais básicas como

$$l_t = \sqrt{\frac{K}{\mu_0 M_s^2}}, \quad (1.1)$$

e a espessura da parede de domínio como

$$\delta_0 = \pi \sqrt{\frac{A}{K}}, \quad (1.2)$$

onde μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo, M_s é a magnetização de saturação, A é a anisotropia e K é a rigidez de troca. Por sua vez, a rigidez de troca é dada por

$$K = \frac{nJ\sigma^2}{a}, \quad (1.3)$$

onde n é o número de primeiros vizinhos, J a integral de troca, σ o módulo do spin e a o parâmetro de rede. Na tabela 1.3 mostramos valores experimentais para os parâmetros básicos e, através das equações acima, os valores para os comprimentos característicos para o ferro (Fe), cobalto (Co), níquel (Ni) e permalloy ($Ni_{80}Fe_{20}$) [18, 19].

Tabela 1.3: Magnetização de saturação a temperatura ambiente $M_s(T_a)$, constante de anisotropia (A), rigidez de troca (K) para o ferro (Fe), cobalto (Co), níquel (Ni) e permalloy ($Ni_{0,8}Fe_{0,2}$) [19].

Material	$M_s(T_a)$ ($10^3 Am^{-1}$)	A ($10^5 Jm^{-3}$)	K ($10^{-11} Jm^{-1}$)	l_t (nm)	δ_0 (nm)	D_{cr} (nm)
Fe	1,714	0,481	1,98	3,28	63,7	19,0
Co	1,422	4,12	2,81	4,70	25,9	96,4
Ni	484,1	-0,056	0,86	7,64	123	53,6
$Ni_{80}Fe_{20}$	813	0,0027	1,07	5,08	625	4,66

Esses comprimentos característicos são obtidos fazendo uma aproximação na qual a rede é tratada como contínua [18, 25]. No estudo de nano-partículas a discretização e o tamanho finito podem alterar estas relações [23, 25]. Podemos entender essas considerações como uma primeira estimativa. Dessa forma, temos uma ideia das escalas envolvidas na formação de domínios em nano-estruturas [23].

Comparando a largura da parede de domínio com a escala de tamanho das nano-partículas fica claro que estes materiais não comportam multidomínios nessa escala. Isso não significa que a configuração magnética será necessariamente um monodomínio, quer dizer apenas que não há paredes de domínios. Será realmente um monodomínio quando a nano-partícula for da ordem do comprimento de troca. Uma configuração circular dos momentos magnéticos do material, chamada de vórtice magnético, pode satisfazer essas condições [23].

Quando excitações térmicas são introduzidas faz-se necessário considerar a contribuição da entropia. O potencial termodinâmico de Gibbs é o apropriado para tratar essa situação [26]. Para temperaturas (T) abaixo da temperatura de Curie podemos tratar as excitações térmicas como uma perturbação do estado fundamental. A solução nos leva a ondas de spins. As ondas de spin dependem dos parâmetros fundamentais do sistema. Assim sendo, elas carregam informações sobre várias propriedades importantes do material, como anisotropia e constante de troca [18]. A dispersão das ondas de spin é dada por

$$\hbar\omega = Dk^2. \quad (1.4)$$

onde $\hbar = h/2\pi$, sendo h a constante de Planck, ω é a frequência angular e k é o vetor de onda. D é a "rigidez das ondas de spins" (*wavelength stiffness*), dada por [18]

$$D = 2J\sigma a^2. \quad (1.5)$$

A fronteira finita impõe restrições nos valores permitidos para o vetor de onda. Assim sendo, os modos de vibração das ondas de spin serão na forma

$$k \sim \frac{n\pi}{L}, \quad (1.6)$$

onde L é o tamanho linear característico [18]. A menor frequência possível será para $n = 1$. Assumindo esse valor e substituindo a equação acima na equação 1.4, temos que

$$\hbar\omega = D \frac{\pi^2}{L_{min}^2}. \quad (1.7)$$

Para ondas excitadas termicamente $\hbar\omega = k_B T$, portanto

$$k_B T = \frac{\pi^2}{L_{min}^2} D \Rightarrow L_{min} = \pi \sqrt{\frac{D}{k_B T}}. \quad (1.8)$$

Na tabela 1.4 mostramos os valores da rigidez de ondas de spin a temperatura ambiente, obtidas por difração de neutrons [18]. Nesta mesma tabela apresentamos o tamanho mínimo para se observar ondas de spin em um dada direção (L_{min}), obtidas pela equação 1.8. Note que L_{min} é da ordem de grandeza de 10\AA . Através desse tamanho podemos definir a dimensionalidade do espectro das ondas de spins. Se a amostra for maior que L_{min} em todas as direções o espectro será tri-dimensional. Se a espessura for menor que L_{min} , por exemplo, o espectro será bi-dimensional (2D), e assim por diante.

Tabela 1.4: Estimativa da magnetização de saturação M_s , rigidez das ondas de spin D , constante de anisotropia A e tamanho mínimo para se observar ondas de spin L_{min} , a temperatura ambiente.

Material	$M_s(T_a)$ ($emu\ cm^3$)	$D(T_a)$ ($meV\ \text{Å}^2$)	$A(T_a)$ ($\mu erg\ cm^{-1}$)	L_{min} Å
<i>Fe</i>	1714	280 ± 10	1,98	10,3
<i>Co</i> (fcc)	1445	500 ± 20	3,00	13,8
<i>Co</i> (hcp)	1422	500 ± 20	2,81	13,8
<i>Ni</i>	484,1	450 ± 20	0,86	13,1
<i>Ni</i> ₈₀ <i>Fe</i> ₂₀	813	330 ± 20	1,07	11,2

Defeitos na rede afetam de forma mais significativa os materiais em nano-escala [19]. Neste trabalho vamos nos concentrar nos efeitos devidos à forma geométrica da amostra. As principais nano-partículas tratadas neste trabalho são prismas retos com bases circular, quadrada e triangular (veja figura 1.2).

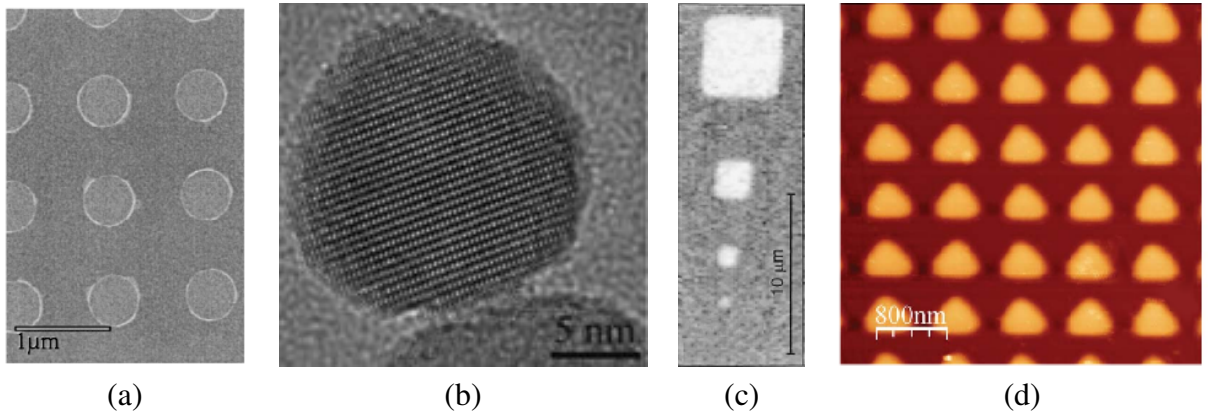


Figura 1.2: Formatos das nano-partículas. Em (a) mostramos nano-partículas de base circular chamados de nano-cilindros ou nano-discos [20]. Em (b) uma nano-esfera [27]. Em (c) temos uma nano-partícula de base quadrada [28]. Quando a altura é igual ao lado do quadrado temos um nano-cubo. Finalmente em (d) mostramos uma nano-partícula de base triangular [29].

Além disso, estamos interessados nas propriedades de nano-partículas isoladas. Podemos considerar nano-partículas separadas por uma distância de duas ou três vezes o tamanho do seu diâmetro como isoladas, dado que a essa distância elas não interagem [20, 30].

1.1.2 Vórtice Magnético

O vórtice é uma excitação magnética que apresenta uma configuração especial dos spins similar as linhas de fluxo no escoamento circular de um fluido. Ou seja, os spins precessam de $\pm 2\pi$ em torno do centro do vórtice. Assim sendo, o vórtice é definido como uma excitação em que a soma das diferenças dos ângulos¹ formados pelos spins num caminho fechado em torno da excitação é um múltiplo inteiro de $\pm 2\pi$, i.e.

$$\sum \Delta\phi = \pm 2n\pi.$$

O inteiro n é chamado de vorticidade da excitação. Uma magnetização na direção perpendicular ao plano do vórtice, chamada de magnetização fora-do-plano, aparece para minimizar a energia de troca no centro do vórtice. A região em torno do centro do vórtice, em que os spins possuem componente nessa direção, é chamada de núcleo do vórtice. De agora em diante, exceto onde indicado, a direção da magnetização fora-do-plano definirá a direção \hat{z} . Além disso, os vórtices que possuem magnetização fora-do-plano serão chamados aqui de vórtices fora-do-plano e caso contrário vórtices no-plano ou planares. Há dois tipos de vórtices, vamos denominá-los de tipo I (figura 1.3 (a)) e tipo II (figura 1.3 (b)). A cada tipo de vórtice está associado um antivórtice, figura 1.3 (c) e figura 1.3 (d) respectivamente.

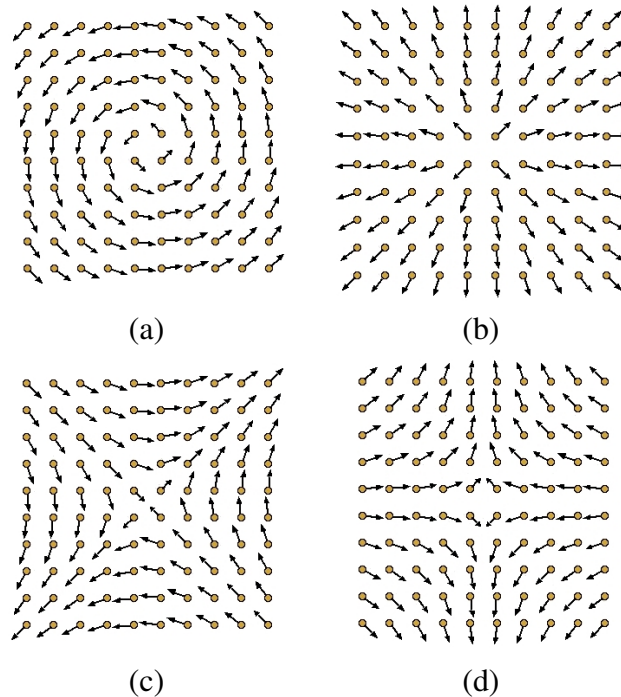


Figura 1.3: Classificação dos vórtices e antivórtices. Em (a) vórtice do tipo I, em (b) vórtice do tipo II, em (c) antivórtice do tipo I e em (d) antivórtice do tipo II.

¹Ângulos em relação a um eixo arbitrário no plano, por exemplo o eixo \hat{x} .

Como dito anteriormente, em geral, os spins tendem a ficar paralelos às bordas em um sistema finito. Dessa forma, em uma nano-partícula, observa-se a formação de vórtices do tipo I. De agora em diante iremos omitir essa classificação, de modo que sempre que falarmos de vórtices e antivórtices entender-se-á que são do tipo I. Além de vórtices, as nano-partículas podem apresentar um estado que se assemelha a um monodomínio, chamado aqui de estado capacitor (figura 1.4).

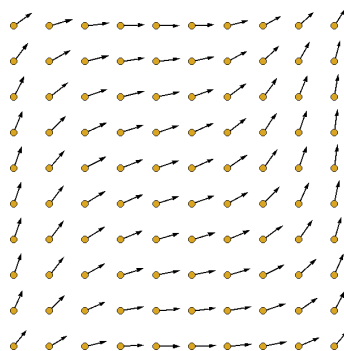


Figura 1.4: Estado capacitor.

Em um vórtice há quatro estados degenerados. Dois são relacionados ao sentido de rotação dos spins e dois de polarização. O sentido de rotação pode ser horário ou anti-horário, veja figura 1.5 (a) e (b). A polarização é definida pelo sentido da magnetização fora-do-plano, sendo positiva ($+\hat{z}$) ou negativa ($-\hat{z}$), figura 1.5 (c) e (d). Estes dois estados de polarização são cogitados a serem usados como bit em dispositivos de armazenamento de informação binário [28, 31, 32, 33], fazendo corresponder a polarização positiva ao bit 0 e a negativa ao bit 1, por exemplo.

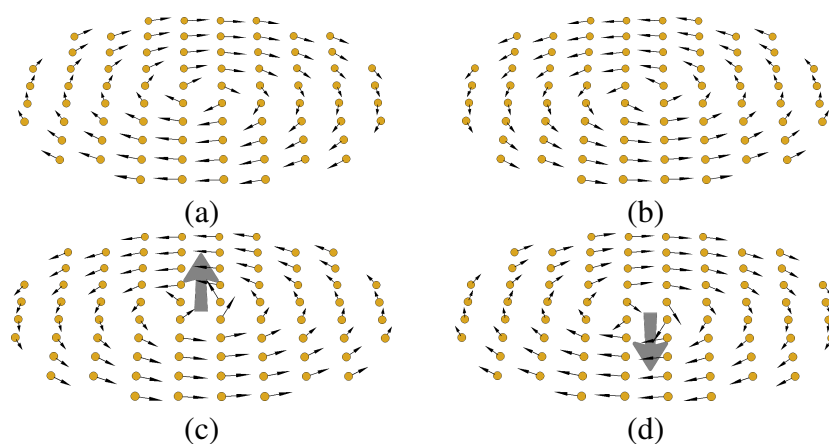


Figura 1.5: Estados degenerados dos vórtices. Em (a) sentido de rotação horário e em (b) anti-horário. Em (c) polarização positiva e em (d) negativa. Todas as combinações possíveis entre o sentido de rotação e polarização são estados degenerados.

Para qualquer aplicação prática, além de conhecer as propriedades dessas estruturas, é necessário conhecer a sua dinâmica e os mecanismos possíveis de controle da polarização do vórtice. Acredita-se que um processo de criação e aniquilação de pares vórtice-antivórtice (figura 1.6) seja responsável pelo mecanismo de inversão da polarização. Este mecanismo está esboçado na figura 1.7. No primeiro quadro desta figura vemos um vórtice com polarização “positiva”. A seguir um par vórtice-antivórtice com polarização “negativa” é excitado. O antivórtice criado se aniquila com o vórtice existente restando apenas aquele com polarização “negativa”, invertendo a polarização.

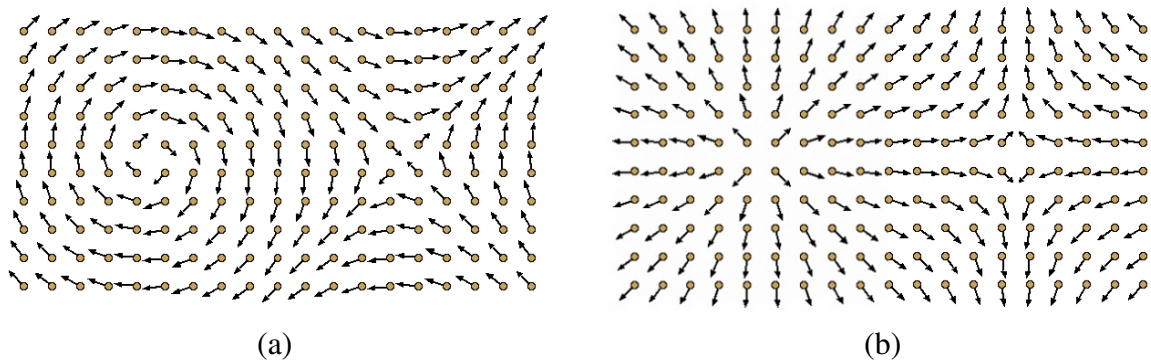


Figura 1.6: Par vórtice-antivórtice. Em (a) temos um par do tipo I e em (b) do tipo II.

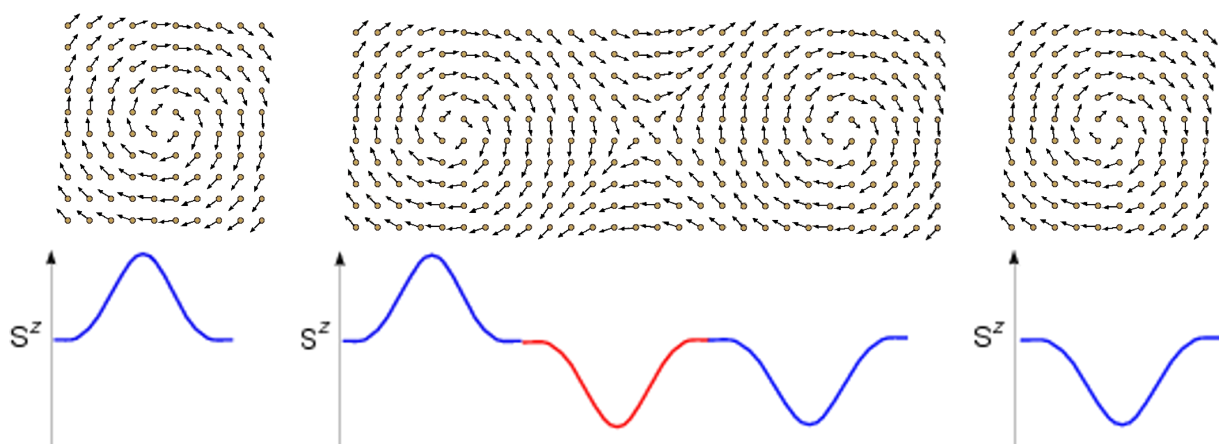


Figura 1.7: Esquema do mecanismo de inversão da polarização.

1.2 Comportamento magnético

O comportamento de um material magnético na presença de um campo magnético externo (\mathbf{B}) é descrito pela sua curva de histerese (veja figura 1.8). Uma das propriedades mais interessantes desse comportamento é a magnetização remanescente ou residual. Essa magnetização pode ser entendida como um resquício de magnetização que o material apresenta quando o campo que alinhava os momentos magnéticos do material é reduzido a zero. Outras quantidades de interesse nesta curva são: O campo coercivo B_c , que é o campo necessário para anular a magnetização residual, e o campo de saturação B_s , que é o campo necessário para saturar a magnetização. Entendemos como saturado o estado em que todos os momentos magnéticos da amostra estão alinhados no sentido do campo.

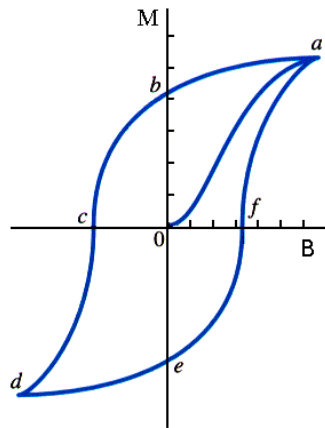


Figura 1.8: Curva de histerese típica. Nos pontos a e d o material está saturado, os campos e magnetizações são respectivamente (B_s, M_s) e $(-B_s, -M_s)$. Nos pontos b e e o material apresenta magnetização residual. O campo necessário para reduzir a magnetização a zero (pontos c e f) é conhecido como campo coercivo.

1.2.1 Curva de Histerese de nano-partículas

Como todo material magnético, uma nano-partícula também apresenta uma curva de histerese. O seu aspecto irá depender, entre outras coisas, se a partícula forma um vórtice ou não [34]. A formação do vórtice faz com que a curva tenha uma aparência típica, como mostrado experimentalmente por Cowburn [34] (figura 1.9 (a)). Intuitivamente podemos compreendê-la da seguinte forma: Considere o campo aplicado igual a zero. Nesta situação a magnetização também será zero, devido à presença do vórtice (figura 1.10 (a) e (d)). Considere agora um campo aplicado diferente de zero. Os spins tendem a se alinhar com o campo. Este alinhamento faz com que o vórtice se desloque na direção perpendicular ao campo (veja figura 1.10 (b) e (e)). Nesse

esquema fica claro que o sentido do deslocamento depende do sentido de rotação dos spins no vórtice. Quanto mais forte for o campo, mais deslocado o centro do vórtice estará do centro da nano-partícula, conseqüentemente, maior a componente da magnetização em sua direção. Já para um campo suficientemente forte o vórtice será expulso e a magnetização ficará saturada, (figura 1.10 (c) e (f)). A seguir, reduzindo a intensidade do campo a configuração do estado saturado irá se manter como estado metaestável. Quando o campo é baixo o suficiente² o sistema formará o vórtice novamente, já que esse é o estado mais estável nestas condições. Este processo se repete para o campo no sentido oposto, fechando a curva de histerese.

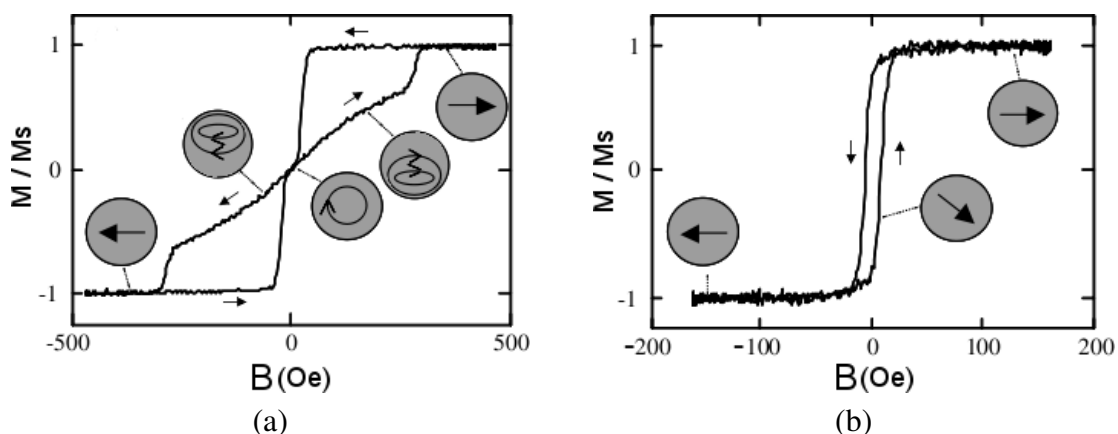


Figura 1.9: Curva de histerese experimental para nano-partículas [34]. Em (a) apresentamos a curva típica para os estados que apresentam vórtice e em (b) a curva típica para o estado capacitor.

1.2.2 Efeito de Exchange-bias

Um material ferromagnético (FM) em contato com um antiferromagnético (AFM) pode apresentar um desvio em sua curva de histerese. Esse efeito é chamado de *exchange-bias* (EB) [22] e o valor do desvio é chamado de campo de *exchange-bias* (B_{EB}). Ele foi observado pela primeira vez em partículas finas de cobalto (Co) em que a oxidação de sua superfície formou uma camada de óxido de cobalto (CoO) [35]. A explicação para tal desvio foi associada à interação de troca na interface FM-AFM (Co-CoO) [36, 37]. O conceito está esquematizado na figura 1.11. Nesta figura observamos que a superfície do antiferromagneto possui uma magnetização diferente de zero, ou seja, os spins da superfície apontam numa dada direção. Chamamos essa configuração de superfície com magnetização não-compensada. A magnetização não-compensada (M_{nc}) do antiferromagneto age como um campo efetivo no ferromagneto. Este campo irá contribuir ou competir com o campo magnético aplicado. Por

²Campo para o qual a barreira de energia que separa os estados de vórtice e saturado é da ordem de grandeza das excitações térmicas.

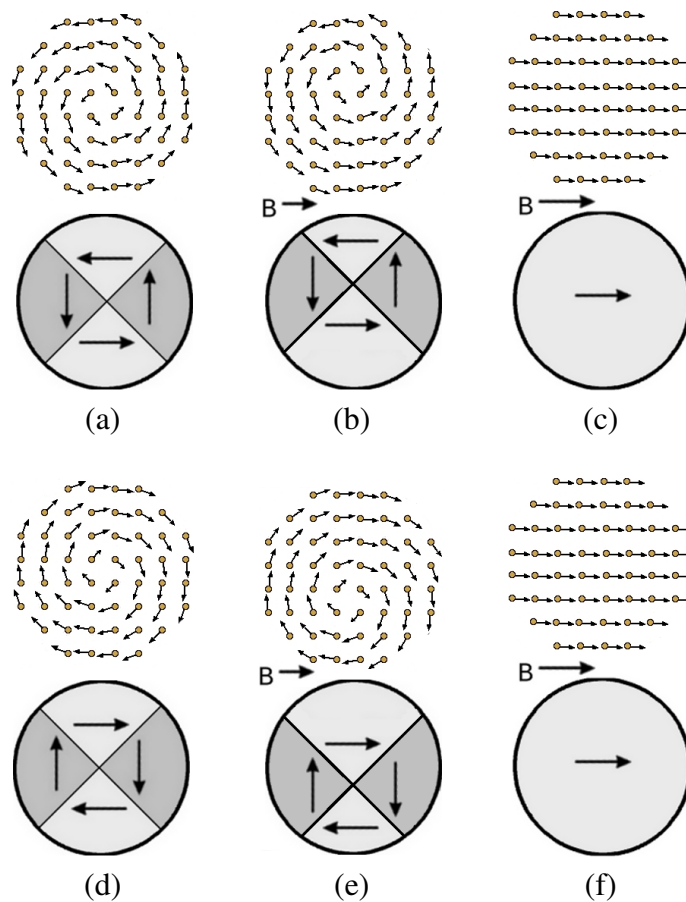


Figura 1.10: Esquema da magnetização das nano-partículas. Em (a) e (d) a partícula apresenta um vórtice, região onde a magnetização gira de 2π . Como não há campo aplicado, por simetria, o centro do vórtice está localizado no centro da nano-partícula. Nesse esquema vemos que as magnetizações em regiões opostas irão se anular, de forma que magnetização total será zero. A diferença entre (a) e (d) é o sentido de rotação dos spins. Aplicando um campo magnético o vórtice irá se deslocar na direção perpendicular a do campo, como mostrado em (b) e (e). O sentido do deslocamento depende do sentido de rotação dos spins, a configuração mostrada em (a) desloca no sentido mostrado em (b) e a configuração mostrada em (d) desloca no sentido mostrado em (e). O deslocamento se deve a minimização da energia quando os spins se alinham na direção do campo. Aumentando a intensidade do campo magnético "expulsamos" o vórtice da nano-partícula de forma a saturá-la, configuração apresentada em (c) e (f).

exemplo, se a troca na interface é ferromagnética, o campo efetivo irá contribuir com o campo aplicado quando ambos apontam na mesma direção e vai competir quando apontam em direções opostas. Portanto, $B_{EB} < 0$ se $M_{nc} > 0$ (figura 1.11 (a)) e $B_{EB} > 0$ se $M_{nc} < 0$ (figura 1.11 (b)). No caso em que a troca na interface é antiferromagnética a situação se inverte. O campo efetivo irá competir com o campo aplicado quando ambos apontam na mesma direção e vai contribuir quando apontam na direção oposta. Portanto, $B_{EB} > 0$ se $M_{nc} > 0$ (figura 1.11 (c)) e $B_{EB} < 0$ se $M_{nc} < 0$ (figura 1.11 (d)). Assim sendo, podemos afirmar que o campo de *exchange-bias* é degenerado, podendo ser $+B_{EB}\hat{x}$ ou $-B_{EB}\hat{x}$, dependendo do sinal da integral de troca na interface e da configuração de spins do substrato. Experimentalmente o sentido de B_{EB} não possui

maior implicação, já que a amostra pode ser girada conforme for a conveniência.

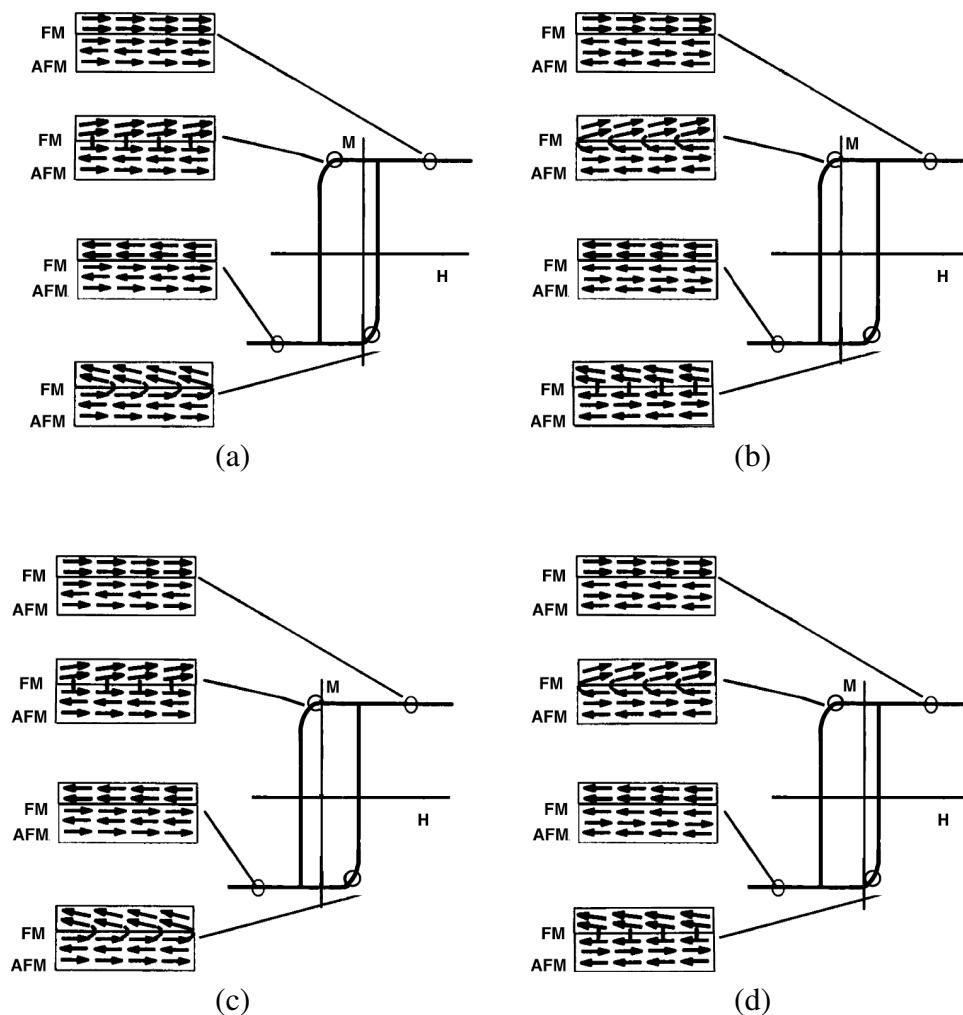


Figura 1.11: Esquema das configurações de spins para se observar o efeito de Exchange-bias [22]. Em (a) e (b) a interação de troca na interface é ferromagnética e em (c) e (d) essa interação é antiferromagnética. (a) e (c) a magnetização não-compensada é positiva e em (b) e (d) é negativa. O campo de EB é negativo para (a) e (d) e positivo para (b) e (c).

Consideramos neste estudo as condições de formação dos vórtices em nano-partículas, sua dinâmica, o seu comportamento térmico e na presença de um campo magnético externo. Nesse último caso consideramos a nano-partícula depositada sobre substratos não-magnéticos e anti-ferromagnéticos, com intenção de analisar o efeito de EB em nano-escala. Também estudamos a dependência da configuração magnética com a forma geométrica das nano-partículas. Para realizarmos todos esses estudos, trabalhamos com um modelo de spins clássicos definido em uma rede discreta [38], que discutimos a seguir.

1.3 Modelo de spins clássicos

Em uma aproximação clássica os spins são considerados vetores clássicos. Essa aproximação mostrou ser muito boa para partículas de spin-5/2 ou maiores [39]. É dentro do espírito desta aproximação que desenvolveremos nosso trabalho.

1.3.1 Hamiltoniano

O hamiltoniano para descrever um sistema magnético pode ser escrito como uma contribuição de vários termos,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_t + \mathcal{H}_a + \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_d, \quad (1.9)$$

onde \mathcal{H}_t representa a energia de troca, \mathcal{H}_a o termo de anisotropia, \mathcal{H}_z o termo Zeeman, referente ao campo magnético externo, e \mathcal{H}_d o termo dipolar, devido a interação entre os dipolos.

Antes de detalhar cada termo do hamiltoniano vamos fazer algumas definições. Chamamos de $\boldsymbol{\sigma}_k$ a resultante de spin no sítio k e $\mathbf{s}_k \equiv \boldsymbol{\sigma}_k / \sigma_k$ o unitário na direção de $\boldsymbol{\sigma}_k$. Dessa forma, vamos utilizar um sistema de unidades em que a temperatura T será medida em unidades de $J\sigma^2/k_B$, onde k_B é a constante de Boltzmann e J é a integral de troca. Além disso, definimos $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ o vetor que liga os sítios i e j , onde \mathbf{r}_k é a posição do k -ésimo sítio. Neste trabalho a posição dos sítios será medida em unidades de parâmetro de rede (a).

Termo de Troca

O termo de troca descreve a interação entre dois elétrons cujas funções de onda se sobrepõem. A origem desse termo está na equação de Schrödinger para o potencial de Coulomb, junto com o requerimento de assimetria imposto pelo princípio de exclusão de Pauli. Como a função de onda total deve ser assimétrica haverá um acoplamento entre as funções espaciais e de spins dos elétrons interagentes, isto é, se as funções espaciais forem assimétricas as de spins serão simétricas, e vice e versa. Considerando que os átomos do cristal estão distantes o suficiente para que mudanças nas funções de onda de átomos isolados possam ser desprezadas, que essas funções de onda possuem um decaimento acentuado, de forma que a sobreposição seja desprezível para átomos além dos primeiros vizinhos, e desprezando os termos no potencial de Coulomb que não sofrem influência dos spins, pode-se mostrar que a interação de troca pode ser escrita como:

$$\mathcal{H}_t = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j, \quad (1.10)$$

onde $\langle i, j \rangle$ significa somatório entre primeiros vizinhos e $J_{i,j}$ é a integral de troca [40, 41].

A integral de troca será escrita através da combinação linear das funções de onda espaciais dos átomos isolados. Se $J_{i,j}$ é positivo a função de onda espacial total será assimétrica. Dessa forma, os spins paralelos minimizarão esse termo de energia. Essa é a causa primária do ferromagnetismo. No caso de $J_{i,j}$ negativo os spins antiparalelos minimizarão esse termo de energia. Dessa forma, teremos um antiferromagneto.

Termo de Anisotropia

Considerando o movimento orbital dos elétrons, a interação entre o spin e momento angular orbital \mathbf{L} é dado pela interação spin-órbita [42],

$$\mathcal{H}_{SO} = \xi \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}, \quad (1.11)$$

onde $\xi = \frac{e^2}{8\pi}$ é uma constante.

A forma de tratar esta interação é através do uso de teoria de perturbação [42, 43]. O resultado depende da simetria do sistema [43]. Ela é responsável pela anisotropia magnetocristalina, que é um dos vários tipos de anisotropias observadas em materiais magnéticos [44]. Esse tratamento introduz uma contribuição de energia no hamiltoniano na forma

$$\mathcal{H}_a = -A \sum_{i=1}^N (s_i^\alpha)^2, \quad (1.12)$$

onde s_i^α é a componente do spin \mathbf{s}_i na direção α [40, 41]. Assim sendo, para $A > 0$, α será um eixo de magnetização fácil, ou seja, será a direção preferencial para os spins. Para $A < 0$ o plano perpendicular a α será de magnetização fácil.

Campo Magnético aplicado - Termo Zeeman

Um momento de dipolo magnético na presença de um campo magnético (\mathbf{B}) sofre a ação de um torque. Pode-se mostrar que a energia potencial associada a esse torque é dada por [45, 46]

$$\mathcal{H}_z = -g\mu_B \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1.13)$$

onde μ_B é o magneton de Bohr e g é o fator de Landé. Assim sendo, a energia devido a presença de um campo magnético em um material magnético com N spins pode ser escrita como

$$\mathcal{H}_z = -g\mu_B \sum_i^N \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i. \quad (1.14)$$

Em nosso sistema de unidades, B será medido em unidades de $\sigma J/g\mu_B$, assim sendo, podemos escrever que

$$\mathcal{H}_z = -\sum_i^N \mathbf{B} \cdot \mathbf{s}_i. \quad (1.15)$$

No caso de um campo constante em uma dada direção α , temos

$$\mathcal{H}_z = -B \sum_i^N s_i^\alpha. \quad (1.16)$$

Interação Dipolar

A interação dipolar tem origem na força magnética em um dipolo devido à presença de outros dipolos magnéticos no sistema. O campo magnético em um ponto do espaço \mathbf{r} gerado por um dipolo situado na origem do sistema de coordenadas é dado por [45, 46]

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = D \left[-\frac{\mathbf{s}}{r^3} + \frac{3\mathbf{r}(\mathbf{s} \cdot \mathbf{r})}{r^5} + \frac{8\pi}{3} \mathbf{s} \delta(\mathbf{r}) \right]. \quad (1.17)$$

Consideramos aqui o dipolo como sendo o nosso spin unitário. Neste trabalho a constante D será medida em unidades de $4\pi a^3 J/\mu_0$. Portanto, N spins, cada um situado em um ponto do espaço denotado por \mathbf{r}_i , produzirão um campo em $\mathbf{r}_j \neq \mathbf{r}_i$ na forma³

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}_j) = D \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\mathbf{s}_i}{r_{ij}^3} + \frac{3\mathbf{r}_{ij}(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right], \quad (1.18)$$

onde $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$. Substituindo o campo acima na equação 1.13, vemos que se houver um spin (\mathbf{s}_i) no sítio \mathbf{r}_i ele terá uma energia potencial dada por

$$\mathcal{H}_{d,j} = D \sum_{j=1}^N \left[\frac{\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right]. \quad (1.19)$$

Para um material com N spins, podemos escrever que a energia potencial total devido a interação entre todos os spin será de

$$\mathcal{H}_d = D \sum_i \sum_{j \neq i} \left[\frac{\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (1.20)$$

ou

$$\mathcal{H}_d = D \sum_{i \neq j} \frac{\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{u}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{u}_{ij})}{r_{ij}^3}, \quad (1.21)$$

onde \mathbf{u}_{ij} é o vetor unitário na direção de \mathbf{r}_{ij} .

³O princípio da superposição é válido já que o campo magnético é linear em função dos dipolos.

É comum, como um passo de simplificação, usar-se um termo alternativo no lugar da equação 1.21[47, 48] na forma

$$\mathcal{H}_{superficie} = B \sum_i e^{-d_i/\xi} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{n}_i)^2, \quad (1.22)$$

onde \mathbf{n}_i é o vetor unitário perpendicular à superfície, d_i a distância do sítio i até a borda. O comprimento de decaimento ξ define uma espessura para a superfície. Este termo produz um efeito similar àquele produzido pelo termo dipolar (equação 1.21). A interação dipolar é responsável por outras anisotropias no sistema. Para entendê-las, vamos considerar esta interação somente entre primeiros vizinhos, isto é,

$$\mathcal{H}_d = D \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3D \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{u}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{u}_{ij}). \quad (1.23)$$

Nesta equação o primeiro termo é similar ao termo de troca para um material antiferromagnético, claramente isotrópico, já que não explicita direção preferencial. O segundo termo é ferromagnético e, devido ao produto escalar, tende a alinhar os spins na direção da linha imaginária que une os sítios i e j ($\hat{\mathbf{u}}_{ij}$). Quando consideramos as superfícies a situação é mais dramática. Como as condições de contorno são abertas temos várias situações possíveis, exemplificadas para uma rede cúbica simples na figura 1.1. Observamos que existem 4 posições distintas para um sítio: No volume (a), em uma face (b), em uma aresta (c) ou em um vértice (d). O número de primeiros vizinhos de cada sítio depende da posição dele na rede. Os sítios de volume possuem dois primeiros vizinhos em cada direção. Um sítio de uma face possui somente um vizinho na direção perpendicular a ela e dois nas duas direções paralelas. Um sítio de uma aresta possui dois vizinhos na direção da própria aresta e somente um vizinho nas duas direções perpendiculares. Por fim, os sítios dos vértices possuem apenas um vizinho em cada direção. Fazendo o produto escalar do termo ferromagnético contabilizamos dois termos não nulos alinhando os spins na direção em que há dois primeiros vizinhos e somente um termo não nulo alinhando na direção em que há somente um vizinho. Devido a essa assimetria, a energia do sistema será minimizada quando os spins se alinharem paralelamente às superfícies, já que nessas direções eles possuem dois primeiros vizinhos e contabilizarão mais termos na energia dipolar.

Se o valor de D é muito grande, comparado com a integral de troca J , de modo que tenhamos que considerar mais termos de energia dipolar a análise não é tão simples e um tratamento analítico se torna impraticável. Nesse caso métodos numéricos proporcionam uma ferramenta adequada para estudar esses modelos.

1.4 Métodos Numéricos

Nesta seção apresentamos os métodos numéricos que utilizamos nas simulações das nanopartículas. Em primeiro lugar apresentamos um método de minimização. Este método é utilizado com o intuito de obter o mínimo global do hamiltoniano. Em seguida apresentamos um método de dinâmica de spins que usamos para descrever a evolução temporal do sistema.

1.4.1 Minimização

De todos os estados possíveis a um sistema físico há um interesse particular naquele de menor energia. Encontrar esse estado é um típico problema de minimização, já que obter o estado fundamental se resume em localizar o mínimo global do hamiltoniano que descreve o sistema de interesse. O método de minimização que usamos é conhecido como recozimento simulado (simulated annealing).

Recozimento simulado

O termo recozimento foi tomado emprestado da metalurgia, processo que consiste no aquecimento de uma liga metálica seguido de um resfriamento controlado. Dessa forma, os grãos sofrem uma recristalização diferente da original permitindo ao sistema minimizar tensões na rede. Por analogia a esse processo, foi proposto em 1983 uma adaptação ao algoritmo de Metropolis [49] denominado de recozimento simulado[50]. Tomamos o estado inicial do sistema como um estado aleatório, correspondendo a alta temperatura. A temperatura é, sequencialmente, reduzida por pequenos decrementos até próximo de zero. A termalização a cada decremento é obtida por um número suficientemente grande de passos de Monte Carlo. Em nossos cálculos usamos o algoritmo de Metropolis. O algoritmo 1 mostra as principais etapas do processo de recozimento simulado.

Algoritmo 1 Simulated Annealing

- 1: Defina a temperatura inicial (T_i), a temperatura final (T_f) e o passo de temperatura (ΔT).
 - 2: Defina também o número de passos de Monte Carlo (MCS) necessários para termalização.
 - 3: Sorteie um estado aleatório (A).
 - 4: $T = T_i$
 - 5: **while** ($T \geq T_f$) **do**
 - 6: Algoritmo de Metropolis(MCS, T, A)
 - 7: $T = T - \Delta T$
 - 8: **end while**
 - 9: **print** Estado final (A)
-

Em minha dissertação de mestrado [40] descrevi em detalhes os conceitos básicos de termodinâmica, probabilidade e mecânica estatística que fundamentam o método de Monte Carlo, e por consequência o algoritmo de Metropolis. Nesse trabalho descreverei as ideias gerais e o algoritmo.

Algoritmo de Metropolis

Um sistema físico em contato com um banho térmico é representado em mecânica estatística pelo ensemble canônico, descrito pela função de partição $Z = \sum_i \exp(-\beta E_i)$, onde $\beta = 1/k_B T$. A função Z conecta-se com a termodinâmica através da energia livre de Helmholtz na forma $F = -k_B T \ln Z$. Dessa forma, avaliando a função de partição, podemos obter todas as informações termodinâmicas de equilíbrio do sistema. Em uma simulação computacional é impossível amostrar completamente o espaço de fase. Assim o que se faz é amostrar os estados com maior peso em Z .

A ideia básica do método de Monte Carlo é fazer essa amostragem através da escolha de estados em um processo seletivo. As taxas de transição entre os estados são escolhidas de modo a obedecer ao balanço detalhado[51]

$$\frac{W_{i,j}}{W_{j,i}} = \frac{P_{eq}(A_j)}{P_{eq}(A_i)}, \quad (1.24)$$

onde $W_{n,m}$ é a taxa de transição do estado A_m para o estado A_n e $P_{eq}(A_k)$ é a probabilidade de, no equilíbrio⁴, encontrar o sistema no estado A_k . Como $P_{eq}(A_k) = \frac{\exp(-\beta E_k)}{Z}$ no ensemble canônico, temos que

$$\frac{W_{i,j}}{W_{j,i}} = \exp(-\beta \Delta E), \quad (1.25)$$

onde $\Delta E = E_j - E_i$.

Temos a liberdade de escolher qualquer taxa de transição que respeite o balanço detalhado. De acordo com a prescrição de Metropolis [49]

$$W_{j,i} = \begin{cases} \exp(-\beta \Delta E) & \text{se } \Delta E > 0 \\ 1 & \text{se } \Delta E < 0 \end{cases} \quad (1.26)$$

Dessa forma, $W_{j,i}$ é uma grandeza diferente de zero para todos estados A_i e A_j , assim sendo, a condição de ergodicidade também é obedecida.

O algoritmo pode ser implementado na forma mostrada no fluxograma da figura 1.12 e o mostrada no algoritmo 2, onde refinamos a subrotina citada no algoritmo 1.

⁴Em equilíbrio a probabilidade não muda com o tempo, i.e. $dP_{eq}(A_k)/dt = 0$

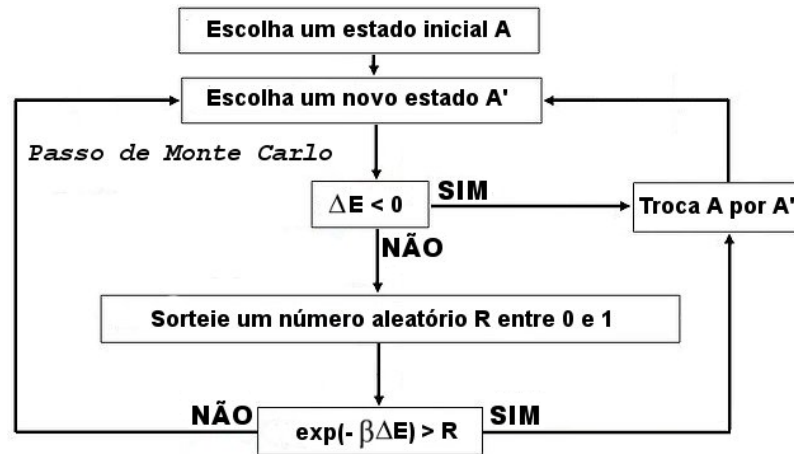


Figura 1.12: Fluxograma do algoritmo de Metropolis.

Algoritmo 2 Algoritmo de Metropolis(MCS, T, A)

- 1: Calcule a energia E do estado A
- 2: $\beta = 1/T$
- 3: **for** ($j = 1$ to MCS) **do**
- 4: Escolha um novo estado A_j
- 5: Calcule a diferença de energia $\Delta E = E_j - E$
- 6: **if** $\Delta E < 0$ **then**
- 7: $A = A_j; E = E + \Delta E$
- 8: **else**
- 9: Sorteie um número aleatório R
- 10: **if** $(\exp(-\beta\Delta E) > R)$ **then**
- 11: $A = A_j; E = E + \Delta E$
- 12: **end if**
- 13: **end if**
- 14: **end for**
- 15: Retorne A

Após um número suficientemente grande de passos de Monte Carlo obtemos um estado do sistema que estará em equilíbrio termodinâmico à temperatura T . Este estado é usado como condição inicial nas equações de movimento.

1.4.2 Dinâmica de Spins

Para um modelo de pseudo-spins clássicos as equações de movimento são dadas pela prescrição de Landau [51],

$$\frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = -\mathbf{S}_i \times \nabla_i \mathcal{H}, \quad (1.27)$$

onde $\nabla_i \mathcal{H} = \frac{d\mathcal{H}}{ds_i^x} \hat{x} + \frac{d\mathcal{H}}{ds_i^y} \hat{y} + \frac{d\mathcal{H}}{ds_i^z} \hat{z}$.

Fazendo o produto vetorial acima,

$$\frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = - \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ S_i^x & S_i^y & S_i^z \\ \frac{d\mathcal{H}}{ds_i^x} & \frac{d\mathcal{H}}{ds_i^y} & \frac{d\mathcal{H}}{ds_i^z} \end{vmatrix}, \quad (1.28)$$

temos que,

$$\frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = \left(S_i^z \frac{d\mathcal{H}}{ds_i^y} - S_i^y \frac{d\mathcal{H}}{ds_i^z} \right) \hat{x} + \left(S_i^x \frac{d\mathcal{H}}{ds_i^z} - S_i^z \frac{d\mathcal{H}}{ds_i^x} \right) \hat{y} + \left(S_i^y \frac{d\mathcal{H}}{ds_i^x} - S_i^x \frac{d\mathcal{H}}{ds_i^y} \right) \hat{z}. \quad (1.29)$$

A partir do modelo de spins discutido, equação 1.9, podemos escrever que

$$\nabla_i \mathcal{H} = \nabla_i \mathcal{H}_t + \nabla_i \mathcal{H}_a + \nabla_i \mathcal{H}_z + \nabla_i \mathcal{H}_d \quad (1.30)$$

ou seja,

$$\frac{d\mathcal{H}}{ds_i^\alpha} = \frac{d\mathcal{H}_t}{ds_i^\alpha} + \frac{d\mathcal{H}_a}{ds_i^\alpha} + \frac{d\mathcal{H}_z}{ds_i^\alpha} + \frac{d\mathcal{H}_d}{ds_i^\alpha}, \quad (1.31)$$

onde $\alpha = \hat{x}, \hat{y}$ ou \hat{z} . Das equações 1.10, 1.12, 1.15, e 1.21, temos que

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{H}_t}{ds_i^\alpha} &= - \sum_{\langle j \rangle_i} J_{i,j} s_j^\alpha, \\ \frac{d\mathcal{H}_a}{ds_i^\alpha} &= -2A s_i^\varepsilon \delta_{\alpha,\varepsilon}, \\ \frac{d\mathcal{H}_z}{ds_i^\alpha} &= -H^\alpha, \\ \frac{d\mathcal{H}_d}{ds_i^\alpha} &= D \sum_j \frac{s_j^\alpha - 3u_{ij}^\alpha (\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{u}_{ij})}{r_{ij}^3}, \end{aligned}$$

onde o símbolo $\langle j \rangle_i$ significa somatório em todos os j 's vizinhos de i . Assim sendo,

$$\frac{d\mathcal{H}}{ds_i^\alpha} = - \sum_{\langle j \rangle_i} J_{i,j} s_j^\alpha - 2A s_i^\varepsilon \delta_{\alpha,\varepsilon} - H^\alpha + D \sum_j \frac{s_j^\alpha - 3u_{ij}^\alpha (\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{u}_{ij})}{r_{ij}^3}. \quad (1.32)$$

Dessa forma, a dinâmica se resume a resolver um conjunto de equações diferenciais acopladas com condição inicial obtida por simulated annealing. Ou seja, a dinâmica do modelo é obtida resolvendo a equação 1.29 com $d\mathcal{H}/ds_i^\alpha$ dada pela equação 1.32. Essa equação não tem solução analítica. Para obter a evolução temporal, usamos uma forma discretizada dessa equação e a resolvemos numericamente. Neste trabalho implementamos o método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4) para essa resolução numérica. Nesse método o spin do i -ésimo

sítio evolui, em um passo de tempo h , da seguinte forma

$$\mathbf{s}_i(t+h) = \mathbf{s}_i(t) + \frac{1}{6}\mathbf{k}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{k}_2 + \frac{1}{3}\mathbf{k}_3 + \frac{1}{6}\mathbf{k}_4, \quad (1.33)$$

onde,

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= f(t, \mathbf{s}_i(t)), \\ \mathbf{k}_2 &= f\left(t + \frac{1}{2}h, \mathbf{s}_i(t) + \frac{1}{2}h\mathbf{k}_1\right), \\ \mathbf{k}_3 &= f\left(t + \frac{1}{2}h, \mathbf{s}_i(t) + \frac{1}{2}h\mathbf{k}_2\right), \\ \mathbf{k}_4 &= f(t+h, \mathbf{s}_i(t) + h\mathbf{k}_3), \end{aligned}$$

e a função f é a implementação direta da equação 1.29, junto com a equação 1.32.

Agora temos todas as ferramentas necessárias para fazer as integrações necessárias ao nosso problema.

2 Resultados

A partir deste ponto passamos a apresentar nossos resultados. Os problemas que estudamos foram:

1. Condição para formação de vórtices em nano-estruturas;
2. Morfologia das estruturas magnéticas;
3. Efeitos de temperatura;
4. Dinâmica e;
5. Comportamento quando submetido a um campo magnético.

2.1 Diagrama de Formação de Vórtices

Estamos interessados em descrever o comportamento de nano-partículas ferromagnéticas. Portanto, o hamiltoniano que descreve o sistema de interesse pode ser escrito como a combinação dos termos de troca e dipolar (equações 1.10 e 1.21, respectivamente), ou seja,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + D \sum_{i \neq j} \frac{\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{u}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{u}_{ij})}{r_{ij}^3}. \quad (2.1)$$

Lembrando que $\langle i, j \rangle$ significa soma entre primeiros vizinhos e $\mathbf{u}_{ij} = \mathbf{r}_{ij}/r_{ij}$, onde \mathbf{r}_{ij} é o vetor ligando os sítios i e j .

2.1.1 Definindo um corte na interação dipolar

A interação dipolar é muito cara computacionalmente, já que devemos avaliá-la entre todas as partículas do sistema. É comum utilizar um corte nesta interação para diminuir o tempo de processamento. O corte é feito de modo a desprezar a interação de partículas a distância r_{ij} maior que um dado raio de corte r_{cut} , como está esquematizado na figura 2.1. Este procedimento

se justifica devido ao decaimento na forma $1/r_{ij}^3$ nessa interação. Espera-se que partículas cuja distância entre si são superiores a r_{cut} irão contribuir muito pouco para o hamiltoniano, de modo que podemos desprezar esses termos.

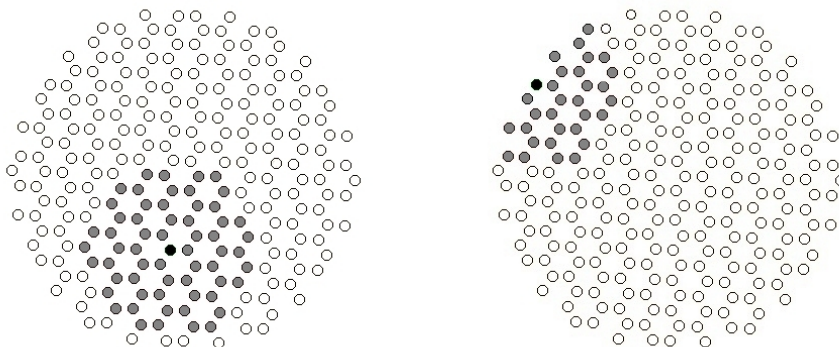


Figura 2.1: Visualização do raio de corte. A partícula preta interage com as partículas cinzas. Aquela não irá interagir com as brancas, já que estão a distância superior ao raio de corte. À direita evidenciamos a condição de contorno aberta.

Assim sendo, o primeiro passo neste trabalho é estudar a influência de um corte na interação dipolar em modelos de nano-estruturas. Apesar de resultados de simulações para filmes finos sugerirem que para $r_{cut} > 5a$ não se observa modificações qualitativas nos resultados [52]¹ nós observamos que isso não é verdadeiro para nano-partículas, como mostrado nas figuras 2.2 e 2.3. Na primeira, temos um diagrama mostrando as regiões no espaço de parâmetros (intensidade da interação dipolar D/J por diâmetro L) onde o estado capacitor (região I), vórtice fora-do-plano (região II) e vórtice no-plano (região III) são energeticamente favoráveis, para vários valores de corte. Nesse diagrama os resultados são para a rede hexagonal, resultados para outros tipos de rede são similares (o caso $r_{cut} = L$ é o equivalente a se dizer que não há corte). Nesse diagrama está claro que a escolha do corte é importante na determinação das regiões de transição entre os estados. O comportamento das curvas será discutido à frente.

Na figura 2.3 vemos a dependência da componente fora-do-plano do vórtice (\mathbf{M}_\perp) em função da interação dipolar para vários tamanhos de rede. Aqui se considerou uma rede cúbica simples com número de camadas $L_z = 2$ em (a), $L_z = 3$ em (b) e $L_z = 4$ em (c). Os cálculos foram para $r_{cut} = 6$ e $r_{cut} = L$. Nesta figura vemos que para $L_z = 2$ o corte não tem influência alguma sobre a componente fora do plano. A partir de $L_z = 3$ já se observa desvios nos resultados. Apesar do comportamento qualitativo semelhante, o corte leva a uma determinação

¹De fato Mól e Costa mostraram que essa afirmação não é válida no limite termodinâmico [53].

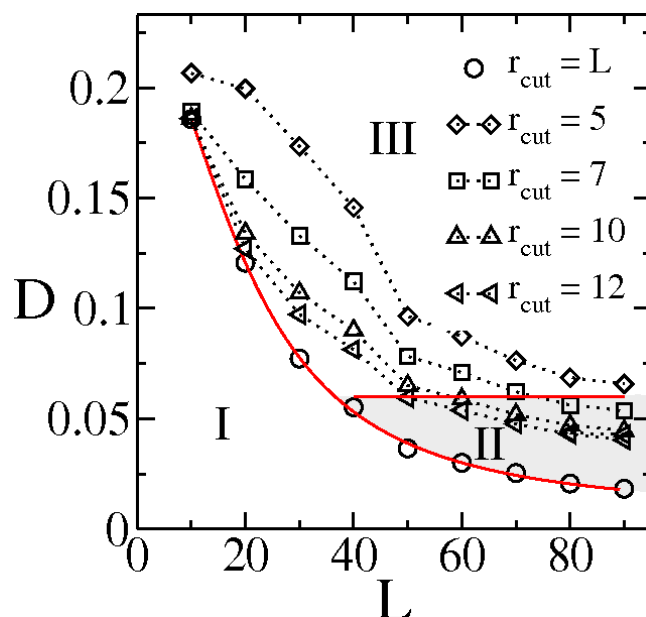


Figura 2.2: Diagrama para formação de vórtices em nano-discos, consideramos uma rede hexagonal com uma camada. Aqui mostramos a intensidade da interação dipolar D/J em função do diâmetro L , para vários valores de corte r_{cut} . A região I apresenta nano-discos cujo estado fundamental é capacitor. As regiões II e III mostram as regiões onde vórtices fora-do-plano e no-plano são observados, respectivamente. Os círculos correspondem ao sistema sem considerar corte [54].

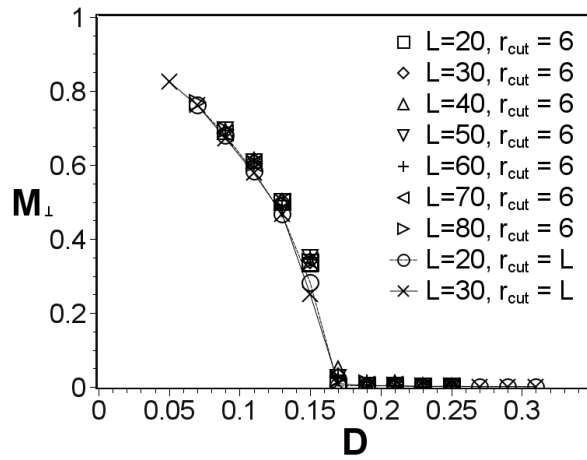
subestimada para a região no espaço de parâmetros em que se observa a componente fora do plano. Tendo em vista os resultados obtidos não usamos corte em nossos trabalhos.

2.1.2 Tipos de Rede

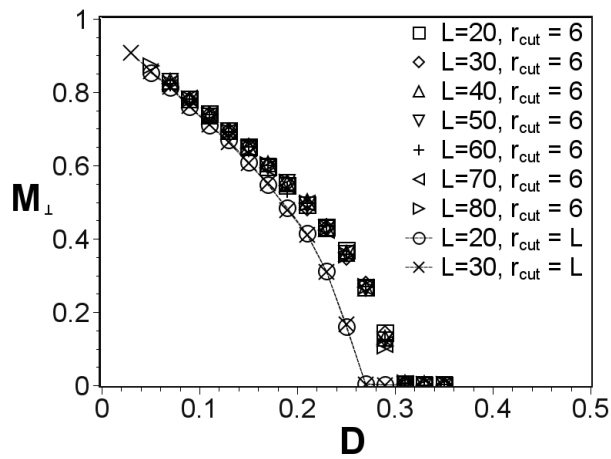
Em uma nano-partícula, cujas dimensões envolvidas são de uma a no máximo duas ordens de grandeza maior que o parâmetro de rede, devemos analisar as influências que os diferentes tipos de rede podem ter no comportamento das grandezas físicas. Na figura 2.4 mostramos o diagrama de estados no espaço de parâmetros para as redes quadrada, hexagonal e triangular. Nesse diagrama observamos que as linhas que separam a região de estado capacitor das regiões de vórtices são bem descritas por uma lei de potência, que pode ser escrita pela fórmula

$$D_c = D_0 + \frac{1}{A(1 + BL^2)}. \quad (2.2)$$

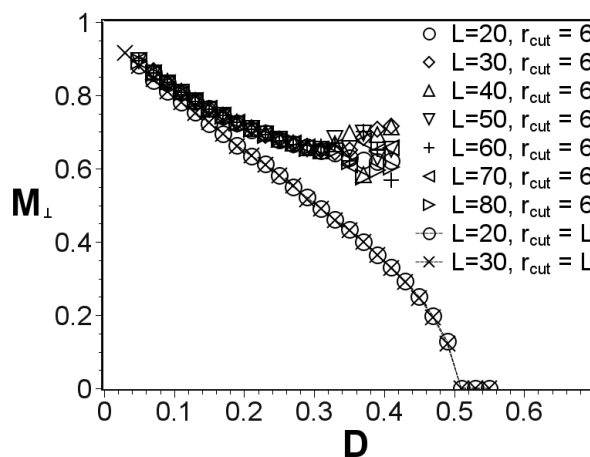
Os valores para as constantes em cada caso são apresentados na tabela 2.1. Além disso, as regiões de vórtice fora-do-plano e planar são separados por uma reta de inclinação nula, sendo que, para a rede hexagonal, $D/J = 0,060 \pm 0,005$ e, para a rede quadrada, $D/J = 0,11 \pm 0,01$. A região de vórtice fora-do-plano não apareceu para a rede triangular. Esse comportamento linear que separa os estados de vórtice no-plano e fora-do-plano corrobora os resultados apresentados



(a)



(b)



(c)

Figura 2.3: Comportamento da componente fora do plano M_{\perp} em função da intensidade da interação dipolar D/J . Considerou-se rede cúbica simples em (a) com espessura $L_z = 2$, em (b) $L_z = 3$ e em (c) $L_z = 4$ [55].

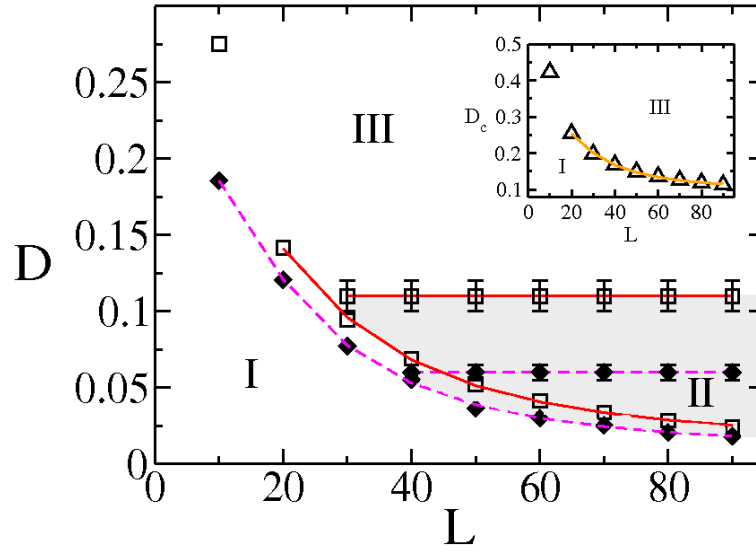


Figura 2.4: Diagrama para formação de vórtices para as rede triangular (gráfico menor), rede quadrada (símbolo quadrado) e rede hexagonal (losango). As regiões I, II e III são definidas na figura 2.2 [54].

Tabela 2.1: Constantes utilizadas para descrever o comportamento da linha de crossover em redes diferentes.

	D_0	A	B
Triangular	0.098	3.798	0.002
Quadrado	0.011	4.417	0.002
Hexagonal	0.007	4.522	0.002

na figura 2.3, onde fica claro que a magnetização perpendicular é independente do tamanho da rede.

Para entendermos esses resultados devemos olhar para os comprimentos típicos. O comprimento de troca pode ser visto como uma medida da competição entre o termo de troca e o termo dipolar. Para distâncias menores que esse comprimento a troca domina a dipolar. Como o termo dipolar é responsável por anisotropias no sistema, para o nosso caso, podemos escrever o comprimento de troca na forma

$$L_t = \sqrt{\frac{K}{H_A}}, \quad (2.3)$$

onde K é a rigidez de troca e $H_A = 4\pi\mu_0 M_S$ é uma medida do campo de anisotropia [56]. A magnetização de saturação pode ser escrita na forma $M_S = V\rho S$, onde V é o volume da nanopartícula e ρ a densidade de sítios, assim sendo,

$$L_t = \sqrt{\frac{K}{4\pi\mu_0 V\rho S}}. \quad (2.4)$$

Como visto (equação 1.3) a rigidez de troca é dada por

$$K = \frac{nJS^2}{a}. \quad (2.5)$$

Essa última grandeza pode ser entendida como um parâmetro para avaliar a dificuldade de mudar os spins vizinhos da configuração de alinhamento. Ou seja, um parâmetro que mede o esforço necessário para que a orientação dos spins vizinhos forme um ângulo diferente de zero entre eles. O valor da rigidez de troca será interessante para compreendermos a diferença entre a componente da magnetização fora-do-plano e o raio do núcleo do vórtice nessas redes, pois, como veremos abaixo, próximo do centro do vórtice a magnetização perpendicular aparece para minimizar o termo de troca. Quanto maior a rigidez maior será o alinhamento entre os spins vizinhos e, conseqüentemente, maior a magnetização perpendicular e o raio do núcleo, já que ângulos grandes entre os spins serão proibitivos. Como os parâmetros J , S e a possuem os mesmos valores para as três, redes somente o número de primeiros vizinhos (n) será diferente (figura 2.5 e tabela 2.2). Assim sendo, para a rede triangular temos que

$$K_{\Delta} = \frac{n_{\Delta}}{n_{\square}} K_{\square} = 1,5K_{\square} \quad (2.6)$$

e para a rede hexagonal,

$$K_{\diamond} = \frac{n_{\diamond}}{n_{\square}} K_{\square} = 0,75K_{\square}, \quad (2.7)$$

onde K_{\square} é a rigidez de troca para a rede quadrada. Vamos comparar partículas com mesmo raio e mesma espessura, ou seja, com mesmo volume, mas redes diferentes. Dessa forma, o comprimento de troca (equação 2.4) para a rede triangular é dado por

$$L_{t\Delta} = \sqrt{\frac{K_{\Delta} \rho_{\square}}{B_{\square} \rho_{\Delta}}} L_{t\square} \approx 1,14L_{t\square}, \quad (2.8)$$

e para a rede hexagonal por

$$L_{t\diamond} = \sqrt{\frac{K_{\diamond} \rho_{\square}}{B_{\square} \rho_{\diamond}}} L_{t\square} \approx 0,99L_{t\square}, \quad (2.9)$$

onde $L_{t\square}$ é o comprimento de troca para a rede quadrada.

O comprimento de troca para a rede hexagonal difere de apenas 1% da rede quadrada. Portanto, podemos afirmar que a competição entre o termo de troca e a dipolar é similar nesses dois casos. Isso explica o motivo pelo qual as linhas que separam as fases de vórtice e capacitor são tão próximas para essas redes. Como esse comprimento é menor para a rede hexagonal a influência da anisotropia de superfície irá aparecer para valores menores da constante dipolar. Ou seja, o vórtice irá aparecer para valores menores de D/J , como obtido no diagrama. Para a rede

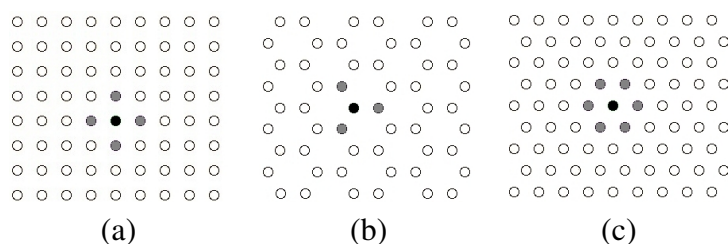


Figura 2.5: Tipos de rede. Em (a) rede quadrada, em (b) rede hexagonal e em (c) rede triangular. Os sítios na cor cinza indicam os primeiros vizinhos do sítio preto.

Tabela 2.2: Parâmetros típicos das redes quadrada, triangular e hexagonal. Número de primeiros vizinhos n , densidade superficial de sítios ρ em unidades de $1/a^2$, onde a é o parâmetro de rede, rigidez de troca B em unidades da rigidez de troca da rede quadrada (K_{\square}) e comprimento de troca L_t em unidades do comprimento de troca da rede quadrada ($L_{t\square}$).

	Quadrada	Triangular	Hexagonal
n	4	6	3
ρ	1,00	$2\sqrt{3}/3 \approx 1,16$	$4\sqrt{3}/9 \approx 0,77$
K/K_{\square}	1,00	1,50	0,75
$L_t/L_{t\square}$	1,00	1,14	0,99

triangular, em que a curva que separa os estados de vórtice e capacitor já destoa consideravelmente, o comprimento de troca é 14% maior quando comparado com o valor da rede quadrada. Ou seja, a troca irá dominar a distâncias maiores nesse caso. Assim, para formar os vórtices a anisotropia de superfície deve ser mais forte nessa rede. Consequentemente o vórtice irá aparecer somente para valores maiores de D/J . Isso explica o motivo pelo qual a região I, região onde encontram-se os estados capacitor (tipo monodomínio), é maior para a rede triangular.

Para analisarmos a componente fora-do-plano vamos olhar mais atentamente para a configuração de vórtice (figura 1.3). Para sítios longe do centro os spins estão quase alinhados, minimizando a energia de troca nessa região. Para a região próxima ao centro esse alinhamento é bem menor. Veja a figura 2.6 onde mostramos um vórtice totalmente planar, obtido pelas relações:

$$S_x = -\frac{y}{r_{xy}},$$

$$S_y = \frac{x}{r_{xy}}$$

e

$$S_z = 0,$$

onde S_k é a componente do spin na direção k e $\mathbf{r}_{xy} = x\hat{x} + y\hat{y}$ é a posição do sítio em relação ao centro do vórtice. Com os spins confinados ao plano, observamos que, na célula em que se encontra o centro do vórtice, o alinhamento entre primeiros vizinhos é de aproximada-

mente 83,3% na rede hexagonal, aproximadamente 44,7% na rede quadrada e aproximadamente 31,5% na rede triangular. O aparecimento de uma componente fora do plano aumenta o alinhamento desses spins minimizando a energia de troca também nessa região. Vimos acima que o valor da rigidez de troca é 25% menor para a rede hexagonal e 50% maior para a rede triangular quando comparamos com o valor da rede quadrada. A rede hexagonal além de já possuir um alinhamento considerável entre os spins no centro do vórtice possui uma rigidez de troca menor em relação às outras redes. Portanto, a componente da magnetização fora-do-plano e o raio do núcleo poderão ser menores para essa rede. Para a rede triangular a situação se inverte. O alinhamento no plano é menor e a rigidez de troca é maior quando comparamos com a rede quadrada. Dessa forma, a componente fora-do-plano e o raio do núcleo devem ser maiores. No entanto, não observamos vórtices fora-do-plano para a rede triangular. Como o valor de anisotropia de superfície deve ser mais forte para formação dos vórtices nessa rede, quando eles aparecem essa anisotropia já é muito forte para que se tenha uma componente fora-do-plano.

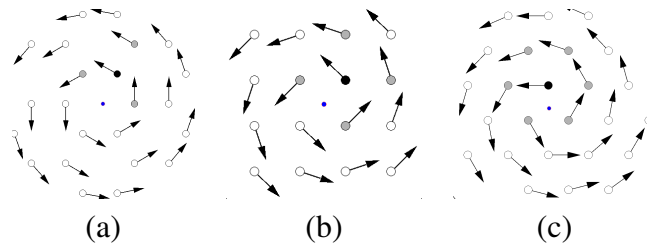


Figura 2.6: Vortex em diferentes tipos de rede. Em (a) rede hexagonal, em (b) rede quadrada e em (c) rede triangular. Os sítios na cor cinza indicam os primeiros vizinhos do sítio preto e o ponto indica o centro do vórtice.

Como a minimização da interação de troca é responsável pela componente fora-do-plano dos vórtices, se a superfície da nano-partícula for cortada em uma direção cristalográfica em que não há primeiros vizinhos essa componente não irá se formar. Este é o caso da rede cúbica de corpo centrado (CCC) com corte na direção (001). Essa componente irá aparecer para a rede CCC se a superfície for cortada na direção (101) (figura 2.7 (c)). Para as redes cúbica simples (CS) e CFC essa componente se forma nas superfícies cortadas na direção (001) (veja figura 2.7 (a) e (b)) mas não formará se o corte for na direção (101). Em todos esses casos os vórtices sempre aparecerão em células quadradas.

Vamos olhar agora para o efeito de tamanho em relação à espessura.

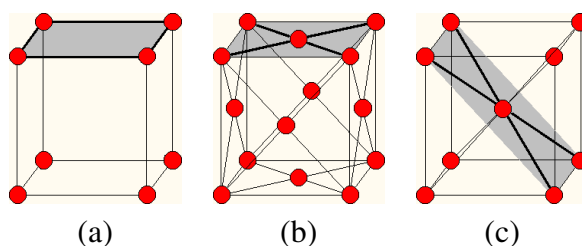


Figura 2.7: Direção dos cortes das superfícies para formação de vórtice fora-do-plano. Em (a) rede cúbica simples, corte na direção (001), em (b) rede cúbica de face centrada, corte na direção (001) e em (c) rede cúbica de corpo centrado, corte na direção (101).

2.1.3 Espessura

Na introdução afirmei que o termo ferromagnético da interação dipolar tende a alinhar os spins na direção da linha imaginária que une os sítios i e j (\mathbf{u}_{ij}). Como em uma camada não há componente de \mathbf{u}_{ij} na direção \hat{z} esse termo irá favorecer que os spins se alinhem nas direções \hat{x} e \hat{y} . Ao aumentar o número de camadas aparecerá um termo ferromagnético da interação dipolar na direção perpendicular ao plano devido à componente de \mathbf{u}_{ij} nessa direção. Assim sendo, ele contribuirá com a interação de troca de forma a aumentar a componente fora-do-plano da magnetização. Podemos entender essa contribuição como uma anisotropia de forma. Contudo, espera-se uma amplificação da região em que o estado de vórtice fora-do-plano é observado no diagrama anterior. Na figura 2.8 mostramos o resultado que confirma essa expectativa. Esse resultado foi obtido para a rede hexagonal com $L_z = 1$ e $L_z = 2$, sendo similar para os outros tipos de redes.

O mesmo comportamento de escala observado na linha que separa o estado capacitor dos estados de vórtice apresentado na figura 2.4 é observado no sistema com duas camadas (figura 2.8). Os parâmetros da equação 2.2 que descrevem esse comportamento nesse caso são apresentados na tabela 2.3. Além disso, a linha $D/J = 0,150 \pm 0,005$ separa as regiões de vórtices fora-do-plano da região de vórtices planares nesse caso.

Tabela 2.3: Constantes utilizadas para descrever o comportamento da linha de crossover em redes com espessura diferentes.

L_z	D_0	A	B
1	0.007	4.522	0.002
2	0.003	6.375	0.004

Nessa seção obtivemos as regiões no espaço de parâmetros onde as configurações de spin possíveis são mais estáveis para vários tipos de redes. A rede quadrada é a que apresenta a maior

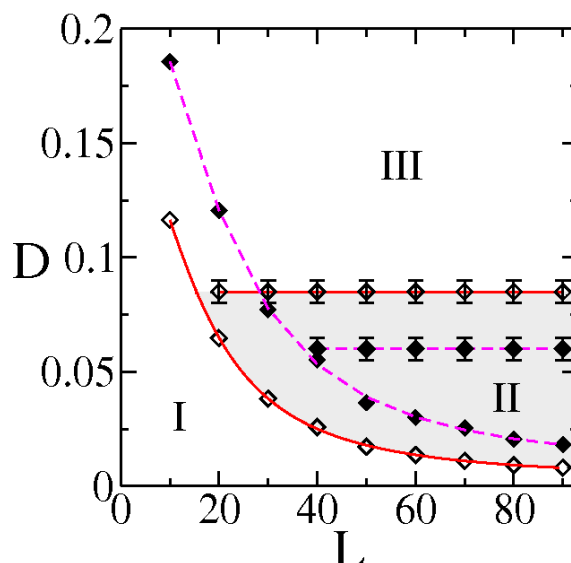


Figura 2.8: Comparação entre os diagramas de formação de vórtices para rede hexagonal com duas camadas (símbolo vazio) e uma camada (símbolo cheio). As regiões I, II e III são definidas na figura 2.2 [54].

região de vórtice fora-do-plano. Observamos que essa região pode ser ampliada aumentando o número de camadas. Agora vamos olhar para os efeitos devido à forma geométrica das nanopartículas.

2.2 Forma geométrica

Até aqui apresentamos resultados para nano-partículas cilíndricas. Vamos olhar a seguir para nano-partículas com base quadrada e triangular. Vamos analisar o efeito devido à forma somente em redes cúbicas simples.

2.2.1 Base Quadrada

A magnetização de uma nano-partícula com base quadrada apresenta algumas sutilezas que a tornam mais complexa quando comparada às partículas cilíndricas e esféricas. O que a diferencia são as magnetizações que aparecem nas arestas perpendiculares à base. Este efeito já era esperado, já que a anisotropia de superfície criada pelo termo dipolar faz com que os spins tendam a se alinhar paralelamente às bordas. Devido a esse alinhamento nas bordas, uma rede limitada por bordas quadradas poderá formar 4 tipos de configurações de spin (veja figura 2.9). Estas são, respectivamente, configurações do tipo vórtice (figura 2.9 (a)), capacitor (figura 2.9 (b)), meio-capacitor (figura 2.9 (c)) e antivórtice (figura 2.9 (d)). Devido à comple-

xidade do modelo, não podemos afirmar a princípio qual configuração será a mais estável no espaço de parâmetros. Somente os resultados das simulações poderão nos dar alguma pista.

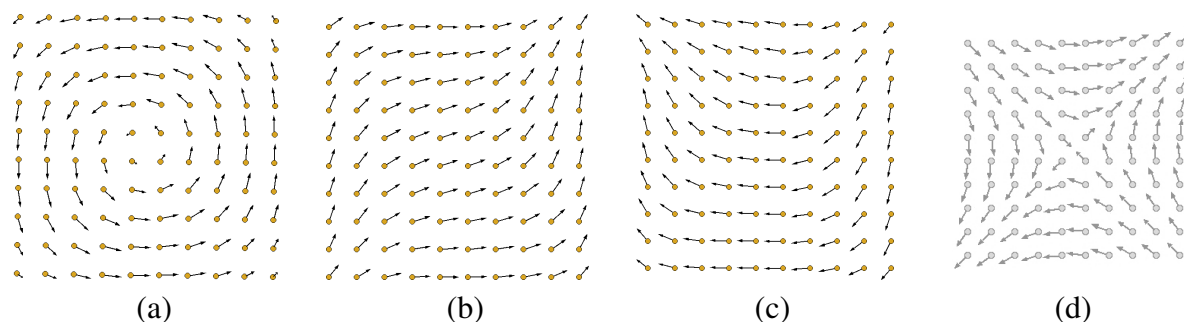


Figura 2.9: Configuração de spins na superfícies de nano-partículas cúbicas em (a) apresenta um vórtice, em (b) capacitor e em (c) tipo meio-capacitor. Em (d) mostramos uma configuração do tipo antivórtice. Este tipo de configuração não foi observada nas nossas simulações.

Começamos nosso estudo considerando um quadrado de lado L com apenas uma camada atômica. O resultado foi idêntico ao caso das nano-partículas cilíndricas, isto é, observa-se um estado do tipo capacitor ou um estado que forma vórtice. Com duas camadas o resultado também foi similar. Houve um aumento da componente da magnetização fora-do-plano no centro do vórtice. Para uma e duas camadas, não há diferença relevante em se considerar uma nano-partícula com base circular ou quadrada. No entanto, aumentando mais a espessura da nano-partícula observamos uma magnetização na direção das arestas perpendiculares à base, como mostrado na figura 2.10. Como estamos interessados em vórtices fora-do-plano, todas as simulações daqui para a frente foram realizadas com parâmetros em que estes aparecem já em uma camada.

Para espessuras bem menores que L , as faces laterais são retangulares. Nesta situação observamos os vórtices nas camadas paralelas à base da nano-partícula. Quando a espessura é comparável a L podemos observar vórtices em qualquer face. Não observamos mais de duas faces com vórtices simultaneamente. Vamos nos concentrar nas configurações do primeiro caso.

A observação mais interessante foi uma dependência entre a polarização dos vórtices e o sentido das magnetizações das arestas perpendiculares à base. Dos seis tipos de configurações possíveis, somente três foram observadas: (1) Todas as arestas com magnetização oposta a polarização (figura 2.11 (a)); (2) uma aresta com magnetização no mesmo sentido da polarização e as outras três opostas (figura 2.11 (d)); (3) duas no sentido da polarização e duas opostas, de forma que as arestas com magnetização no mesmo sentido são adjacentes (figura 2.11 (c)). O caso em que as duas arestas com mesmo sentido de magnetização são diagonalmente opostas (figura 2.11 (d)) não foi observado. O mesmo ocorre para os casos com três arestas com

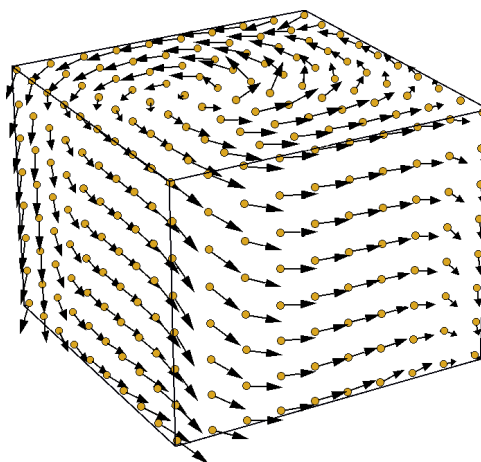


Figura 2.10: Configuração de spins na borda de uma nano-partícula de base quadrada.

magnetização no sentido da polarização e uma oposta (figura 2.11 (e)) e todas as arestas com magnetização no sentido da polarização (figura 2.11 (f)).

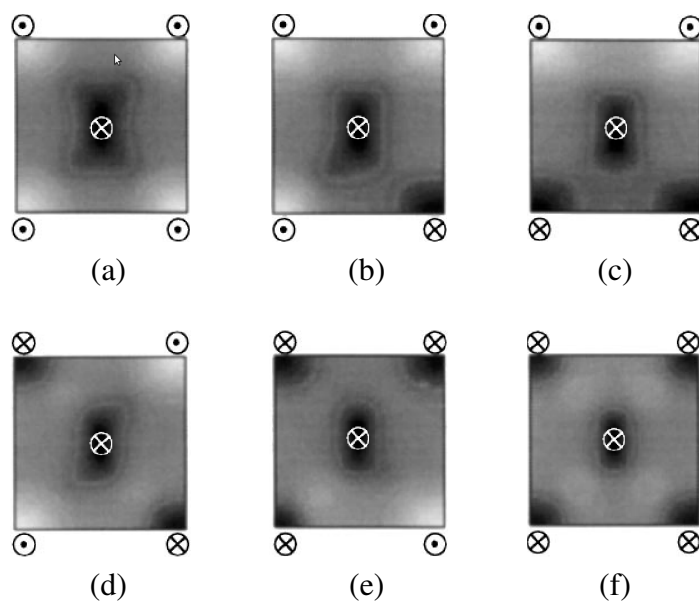


Figura 2.11: Configurações possíveis da magnetização das arestas em função da polarização do centro do vórtice. Em (a) todas as arestas têm magnetização oposta a polarização. Em (b) somente uma aresta com magnetização no sentido da polarização e três opostas. Em (c) e (d) mostramos o caso em que duas arestas possuem magnetização no sentido da polarização e duas opostas. Sendo que, em (c) as arestas com magnetização no mesmo sentido são adjacentes e em (d) são diagonalmente opostas. Em (e) três arestas com magnetização no sentido da polarização e uma oposta. Finalmente em (f) todas as arestas com magnetização no sentido da polarização [57].

Devido à configuração de spins dessas arestas, observam-se apenas duas configurações para as faces laterais. Quando as arestas adjacentes têm mesmo sentido de magnetização forma-se um capacitor, quando são opostas, meio-capacitor. Como a configuração de vórtice é impressa

em todas as camadas paralelas à base com o mesmo sentido de rotação, uma configuração do tipo antivórtice fica impossibilitada de se observar, assim como outro vórtice (veja figura 2.12).

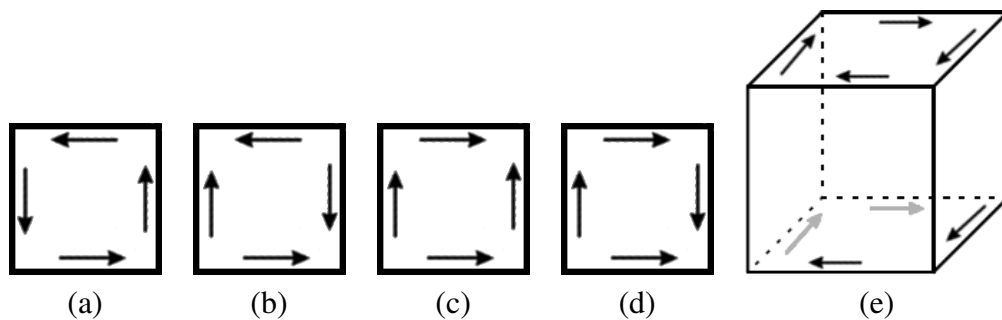


Figura 2.12: Esquema das configurações das magnetizações das arestas para redes limitadas por um quadrado. Em (a) mostramos a configuração de um vórtice, em (b) um antivórtice, em (c) de um capacitor e em (d) de um meio-capacitor. Observe que todas as arestas opostas dos estados vórtice e antivórtice possuem magnetizações em sentidos opostos. Em (e) mostramos um nano-cubo com vórtices impressos nas faces paralelas a base. Observe que as faces laterais terão necessariamente pelo menos duas arestas opostas com magnetização no mesmo sentido. Assim sendo, essas faces só comportam configuração dos tipo capacitor e meio-capacitor.

A componente da magnetização total na direção \hat{z} terá a contribuição da magnetização das arestas e da magnetização do centro do vórtice. Portanto, é interessante olhar para a configuração de spin do vértice da nano-partícula. Devido ao termo de troca, essa configuração irá depender da magnetização das arestas a que esse vértice pertence. Há dois tipos de configurações possíveis [57] (veja figura 2.13). A configuração de tripé onde a magnetização das três arestas adjacentes convergem ou divergem e a configuração de sela, onde a magnetização de duas arestas convergem e uma diverge, ou vice-versa. A configuração do tipo sela é a única possível nos vértices de faces que apresentam vórtice.

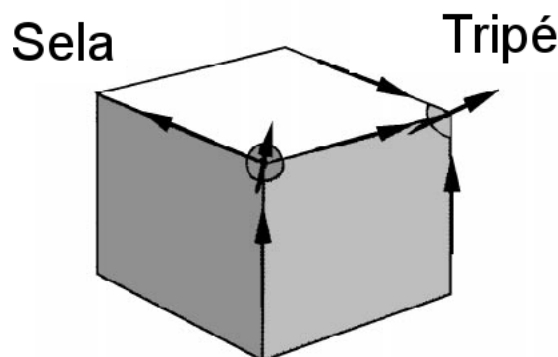


Figura 2.13: As duas configuração possíveis para o vértice da nano-partícula. A configuração tripé, em que a magnetização das três arestas convergem ou divergem dela e a configuração de sela, em que a magnetização de duas arestas convergem e uma diverge, ou vice-versa [57].

Modelo para magnetização das arestas

Para entendermos como o sentido de magnetização das arestas depende da polarização do vórtice propomos um modelo simples. Suponha um quadrado de mesmas dimensões da base da nano-partícula. Considere um momento magnético (\mathbf{N}) em cada vértice e um no centro desse quadrado. Estes momentos são construídos somando-se os spins vizinhos a cada região e considerando-se somente a componente \hat{z} de cada um (como exemplificado na figura 2.11). Isto não significa que a componente no plano se anula, mas, simplesmente que ela não é importante nesse estágio do cálculo. Como os spins a longa distância interagem apenas por dipolo-dipolo podemos supor que essa será a interação dominante entre esses momentos magnéticos. Portanto, podemos escrever que

$$\mathcal{H} = D \sum_{i \neq j} \frac{\mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j - 3(\mathbf{N}_i \cdot \mathbf{u}_{ij})(\mathbf{N}_j \cdot \mathbf{u}_{ij})}{r_{ij}^3},$$

Por construção $\mathbf{N}_k \cdot \mathbf{u}_{kj} = 0$, já que $\mathbf{N}_k \perp \mathbf{u}_{kj}$. Assim sendo,

$$\mathcal{H} = D \sum_{i \neq j} \frac{\mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j}{r_{ij}^3}. \quad (2.10)$$

Esquemáticamente, \mathbf{N}_i está disposto da seguinte forma

$$\begin{array}{cc} \mathbf{N}_1 & \mathbf{N}_2 \\ & \mathbf{N}_5 \\ \mathbf{N}_4 & \mathbf{N}_3 \end{array}$$

Vemos que $r_{12} = r_{14} = r_{23} = r_{34} = L$, $r_{13} = r_{24} = \sqrt{2}L$ e $r_{15} = r_{25} = r_{35} = r_{45} = \sqrt{2}L/2$. Como as arestas são idênticas não há motivos para crer que suas magnetizações irão diferir em módulo. Além disso, podemos dizer que a magnetização do centro do vórtice irá diferir das magnetizações das arestas por um multiplicador α . Ou seja, $|\mathbf{N}_1| = |\mathbf{N}_2| = |\mathbf{N}_3| = |\mathbf{N}_4| = N$ e $|\mathbf{N}_5| = \alpha N$. Fazendo $D' = DN/L^3$, o modelo pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = D' \left[(n_1 n_2 + n_1 n_4 + n_2 n_3 + n_3 n_4) + 2^{\frac{3}{2}} \alpha (n_1 n_5 + n_2 n_5 + n_3 n_5 + n_4 n_5) + \frac{(n_1 n_3 + n_2 n_4)}{2^{\frac{3}{2}}} \right], \quad (2.11)$$

onde $n_k = \pm 1$, para $k = 1, 2, 3, 4$ e 5 . Como esse é um modelo de 5 partículas de 2 níveis temos $2^5 = 32$ estados possíveis. Na tabela 2.4 apresentamos todos os estados e respectivas energias, agrupados em degenerescência.

Olhando para a equação 2.11 vemos dois limites distintos: α muito grande e α muito pequeno. No limite de $\alpha \rightarrow \infty$, o segundo termo dessa equação irá dominar. Assim sendo, a

energia que minimiza esse sistema é obtida quando o momento magnético do centro (\mathbf{N}_5) aponta no sentido oposto dos momentos das arestas, correspondendo a estados da primeira linha da tabela 2.4. Reduzindo o valor de α , os estados apresentados na segunda linha se tornam mais estáveis quando $(4 + \sqrt{2}/2 - 2^{7/2}\alpha)D' > -2^{5/2}\alpha D'$, ou seja, para $\alpha < (4 + \sqrt{2}/2)/(2^{7/2} - 2^{5/2})$, como visto na figura 2.14.

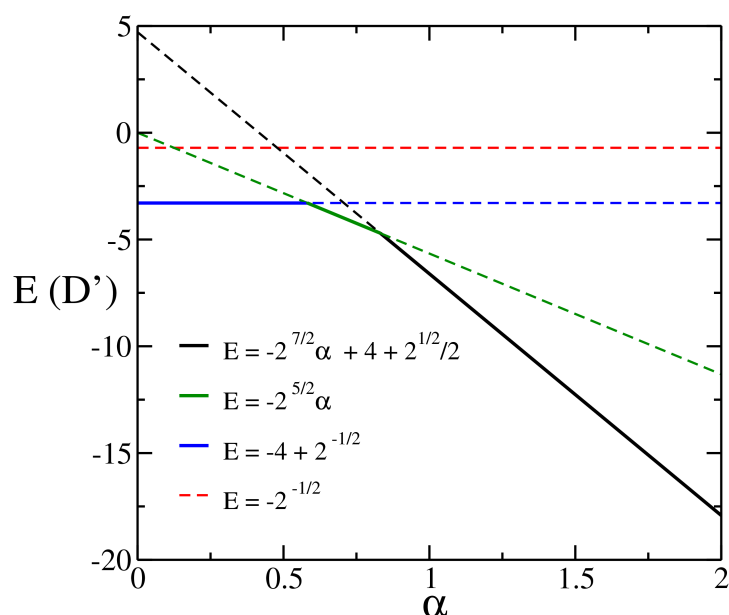


Figura 2.14: Energia em função do multiplicador α para nano-partícula de base quadrada.

Por outro lado, no limite $\alpha \rightarrow 0$, o segundo termo da equação 2.11 tende a zero. A terceira linha da tabela 2.4 apresenta os estados com energia mais estáveis para esse caso, como visto na figura 2.14. No entanto, os resultados das simulações apresentam estados mostrados na quarta linha em detrimento destes. Para entender o motivo que isso ocorre devemos olhar novamente para a configuração de spins da nano-partícula. Estes dois conjuntos de configurações apresentam duas arestas com magnetização no sentido da polarização e duas no sentido oposto. Enquanto no primeiro conjunto (terceira linha da tabela) as arestas com magnetização no mesmo sentido são diagonalmente opostas no segundo (quarta linha) são adjacentes. Vamos olhar para a configuração de spins das faces laterais. Baseado na discussão anterior, sobre a configuração dos spins das faces em função do sentido da magnetização das arestas, podemos afirmar que para os estados da terceira linha da tabela as quatro faces laterais apresentam configuração do tipo meio-capacitor. Para os estados da quarta linha haverá duas faces opostas com configuração do tipo meio-capacitor e as outras duas do tipo capacitor. A configuração do tipo capacitor pode ser vista como um monodomínio enquanto o meio-capacitor lembra uma parede de Néel. Portanto, nos estados da quarta linha da tabela, teremos duas faces com configuração tipo monodomínio,

Tabela 2.4: Degenerescência, estados possíveis e energia para o modelo de comportamento da componente da magnetização fora-do-plano para nano-partícula cúbica. Os símbolos \odot e \otimes significam $n_k = 1$ e $n_k = -1$, respectivamente.

g(E)	Estados	Energia
2	\odot \odot \otimes \otimes \otimes \odot \odot \odot \otimes \otimes	$(4 + \frac{\sqrt{2}}{2} - 2^{\frac{7}{2}}\alpha)D'$
8	\otimes \odot \odot \otimes \odot \odot \odot \odot \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \odot \odot \odot \odot \odot \otimes \otimes \odot \odot \otimes \otimes \odot \otimes \otimes \otimes \otimes \odot \otimes \otimes \odot \odot \otimes \otimes \odot \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \odot \odot \otimes	$-2^{\frac{5}{2}}\alpha D'$
4	\otimes \odot \odot \otimes \odot \otimes \otimes \odot \otimes \otimes \otimes \odot \otimes \odot \odot \otimes \odot \otimes \otimes \odot \otimes \odot \odot \otimes	$-(4 - \frac{1}{\sqrt{2}})D'$
8	\otimes \otimes \odot \otimes \odot \odot \otimes \odot \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \odot \odot \odot \otimes \otimes \otimes \otimes \odot \odot \odot \otimes \odot \otimes \otimes \odot \otimes \odot \otimes \otimes \odot \odot \otimes \otimes \odot \otimes \otimes \otimes \odot \odot \odot \odot \otimes	$-\frac{1}{\sqrt{2}}D'$
8	\otimes \odot \odot \otimes \odot \odot \odot \odot \odot \odot \odot \odot \odot \otimes \otimes \odot \odot \otimes \otimes \odot \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \otimes \odot \odot \otimes	$2^{\frac{5}{2}}\alpha D'$
2	\odot \odot \otimes \otimes \odot \otimes \odot \odot \otimes \otimes	$(4 + \sqrt{2} + 2^{\frac{7}{2}}\alpha)D'$

sendo que as configurações do tipo meio-capacitor são responsáveis pela inversão dos seus sentidos de magnetização. Para estados da terceira linha, teremos uma parede de Néel cruzando outra. Portanto, olhando para a configuração total de spins o custo energético para se formar esse estado explica o motivo de não ser observado nas simulações.

2.2.2 Base Triangular

No caso de nano-partículas triangulares (figura 2.15) podemos utilizar o mesmo modelo, considerando agora \mathbf{N}_i disposto nos vértices e centro de um triângulo equilátero, esquematicamente:

$$\begin{array}{ccc} & \mathbf{N}_1 & \\ & & \mathbf{N}_4 \\ \mathbf{N}_3 & & \mathbf{N}_2 \end{array}$$

Nesse caso, $r_{12} = r_{13} = r_{23} = L$ implica que $r_{14} = r_{24} = r_{34} = \sqrt{3}L/3$. Da mesma forma anterior $|\mathbf{N}_1| = |\mathbf{N}_2| = |\mathbf{N}_3| = N$ e $|\mathbf{N}_4| = \alpha N$, fazendo $D' = DN/L^3$, temos que

$$\mathcal{H} = D' \left[(n_1 n_2 + n_1 n_3 + n_2 n_3) + 3^{\frac{3}{2}} \alpha (n_1 n_4 + n_2 n_4 + n_3 n_4) \right], \quad (2.12)$$

onde $n_k = \pm 1$, para $k = 1, 2, 3$ e 4. Agora temos um modelo do tipo 4 partículas com 2 níveis levando a $2^4 = 16$ estados possíveis. Na tabela 2.5 apresentamos todos os estados e respectivas energias, também agrupados em degenerescência. A última linha desta tabela apresenta estados com energias positivas, como antes, não vão entrar na discussão. As energias em função de α são apresentadas na figura 2.16.

No limite de $\alpha \rightarrow \infty$, o segundo termo da equação 2.12 irá dominar. Assim sendo, irão minimizar a energia configurações em que as magnetizações dos vértices são opostas à do centro. No limite de $\alpha \rightarrow 0$, o primeiro termo irá dominar e os estados apresentados na segunda linha da tabela 2.5 minimizarão a energia (veja figura 2.16). Assim sendo, para α pequeno teremos uma aresta com magnetização no mesmo sentido da polarização.

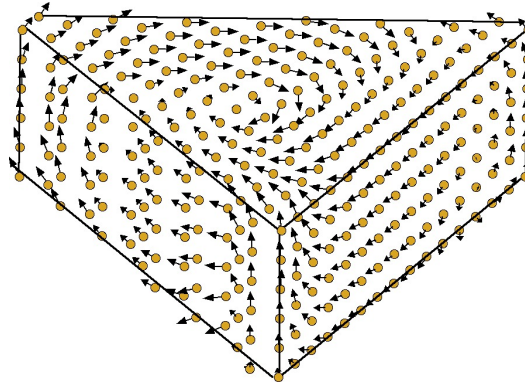


Figura 2.15: Nano-partícula de base triangular.

Tabela 2.5: Degenerescência, estados possíveis e energia para o modelo de comportamento da componente da magnetização fora-do-plano para nano-partícula triangular. Os símbolos \odot e \otimes significam $n_k = 1$ e $n_k = -1$, respectivamente.

g(E)	Estados	Energia
2	$ \begin{array}{ccccc} \odot & & & & \otimes \\ & & & & \odot \\ \odot & \odot & & \otimes & \otimes \end{array} $	$3(1 - 3^{\frac{3}{2}}\alpha)D'$
6	$ \begin{array}{ccccccc} & \otimes & & & \odot & & \odot \\ & \otimes & & & \otimes & & \otimes \\ \odot & & \odot & & \odot & \otimes & \otimes & \odot \\ & \odot & & & \otimes & & \otimes \\ & \odot & & & \odot & & \odot \\ \otimes & \otimes & & \otimes & \odot & \odot & \otimes \end{array} $	$-(1 + 3^{\frac{3}{2}}\alpha)D'$
6	$ \begin{array}{ccccccc} \odot & & & & \otimes & & \otimes \\ & \otimes & & & \otimes & & \otimes \\ \otimes & & \otimes & & \otimes & \odot & \odot & \otimes \\ & \otimes & & & \odot & & \odot \\ & \odot & & & \odot & & \odot \\ \odot & \odot & & \odot & \otimes & \otimes & \odot \end{array} $	$(-1 + 3^{\frac{3}{2}}\alpha)D'$
2	$ \begin{array}{ccccc} \odot & & & & \otimes \\ & & & & \otimes \\ \odot & \odot & & \otimes & \otimes \end{array} $	$3(1 + 3^{\frac{3}{2}}\alpha)D'$

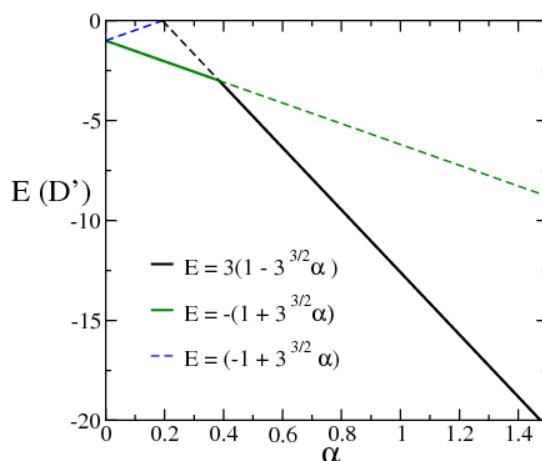


Figura 2.16: Energia em função do multiplicador α para nano-partícula de base triangular.

2.3 Efeitos de temperatura

Pares de vórtices e antivórtices são excitados com o aumento da temperatura [39, 58, 59]. Na figura 2.17 mostramos uma configuração de spins em uma nano-partícula cilíndrica, rede hexagonal e temperatura $T = 0,7$. Nela observamos 5 pares vórtice-antivórtice e um vórtice desemparelhado. Diminuindo a temperatura esses pares vão se aniquilando e sobra somente o vórtice desemparelhado no sistema. Cada hexágono na rede, chamado de célula, pode conter o centro de um vórtice (ou um antivórtice). Dessa forma, podemos definir a densidade de pares vórtice-antivórtice ρ_{v-a} , como

$$\rho_{v-a} = \frac{2N_a}{N_c}, \quad (2.13)$$

onde N_a é o número de antivórtices² e N_c é o número de células do sistema. Como os antivórtices sempre aparecem aos pares (par vórtice-antivórtice), e um par ocupa duas células, o número máximo de pares é $N_c/2$. Portanto, o fator 2 dessa equação é somente para normalizar a densidade.

Na figura 2.18 mostramos a densidade de pares vórtice-antivórtice para a partícula mostrada na figura 2.17 como função da temperatura. Observamos que até a temperatura $T \approx 0,4$ não há pares vórtice-antivórtice no sistema.

Poderíamos acreditar que esse seria o limite de temperatura para a estabilidade da polarização nesta partícula, uma vez que se acredita que a polarização é invertida via um mecanismo de criação-destruição de pares com polaridade oposta. No entanto, nossos resultados, obtidos por dinâmica molecular, indicam que o vórtice muda de polarização aleatoriamente à tempe-

²Como um vórtice desemparelhado pode se formar no sistema, no estado fundamental, uma relação para a densidade de pares vórtices-antivórtices que utiliza o número de vórtices pode levar a uma contagem errada.

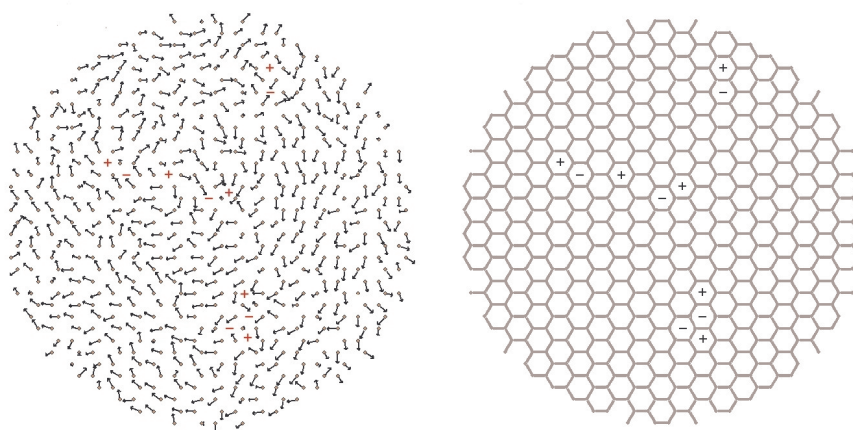


Figura 2.17: Configuração típica da distribuição de pares vórtice-antivórtice em uma rede hexagonal a $T = 0,7$, $D = 0,1$ e $L = 30$. Na esquerda apresentamos a configuração de spin e a localização dos vórtices (símbolo +) e antivórtices (símbolo -). A direita mostramos apenas as posições dos vórtices e antivórtices no esqueleto da rede hexagonal [54].

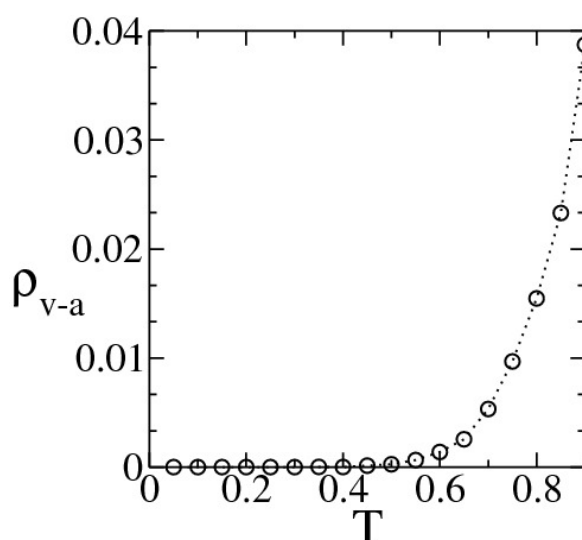


Figura 2.18: Densidade de pares vórtice-antivórtice ρ_{v-a} em função da temperatura para os mesmos parâmetros da figura 2.17 [54].

ratura bem inferior, a $T = 0,1$. Se para $T > 0,1$ a polarização do vórtice não é estável e para $T < 0,4$ não há pares vórtice-antivórtice, leva-se a crer que há outro mecanismo responsável pela mudança de polaridade. Este resultado de dinâmica molecular leva a crer que ondas de spin podem ser responsáveis por essa inversão. Assim sendo, estudos mais apurados levando em consideração a discretização da rede e efeitos de temperatura deverão ser realizados a fim de determinar a possível existência de um outro mecanismo.

2.4 Comportamento magnético

Nesta seção vamos estudar o comportamento magnético das nano-partículas quando sujeitas a um campo externo. Vamos começar esse estudo considerando um nano-disco sobre um substrato não magnético. A seguir vamos considerar o nano-disco depositado sobre um substrato antiferromagnético, com intuito de compreender o efeito de exchange-bias nessas estruturas. Vamos fazer três aproximações para o substrato antiferromagnético: Com os spins congelados em uma dada direção; considerando spins do tipo Ising; e, por fim, spins do tipo Heisenberg clássicos. Neste último caso consideramos primeiro uma anisotropia de plano-fácil para o substrato e depois uma anisotropia de eixo-fácil.

2.4.1 Curva de Histerese de nano-partículas

Para simular o comportamento de uma nano-partícula na presença de um campo magnético introduzimos o termo Zeeman no hamiltoniano. O campo será aplicado na direção \hat{x} , de modo que, o hamiltoniano torna-se

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + D \sum_{i \neq j} \frac{\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{u}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{u}_{ij})}{r_{ij}^3} - B \sum_i s_i^x. \quad (2.14)$$

Ao aplicar o campo, o vórtice sofre um deslocamento na direção perpendicular a ele. O sentido do deslocamento depende do sentido de rotação dos spins (veja figura 1.10). Podemos definir um vetor para representar o sentido de rotação dos spins similar ao vetor velocidade angular, isto é, vamos defini-lo da seguinte forma: $\mathbf{q} = \hat{z}$ se o sentido de rotação é anti-horário e $\mathbf{q} = -\hat{z}$ se o sentido de rotação é horário. Dessa forma, podemos dizer que o vórtice sofre a ação de uma força (a causa do deslocamento) na forma

$$\mathbf{F} \propto \mathbf{q} \times \mathbf{B}, \quad (2.15)$$

de modo que, aplicando um campo externo e observando o deslocamento do vórtice, podemos inferir imediatamente a quiralidade.

Na figura 2.19 mostramos os resultados obtidos em nossas simulações com campo externo \mathbf{B} . Observamos claramente o aparecimento de pequenos degraus na curva de histerese referente ao sistema com vórtice (veja figuras 1.9 e 1.10 para referência). A origem destes degraus está no “pinning” devido a rede discreta.

Como o centro do vórtice está sempre localizado dentro de uma célula unitária o seu deslocamento será discreto. Ou seja, no caso da rede quadrada, o centro do vórtice se deslocará

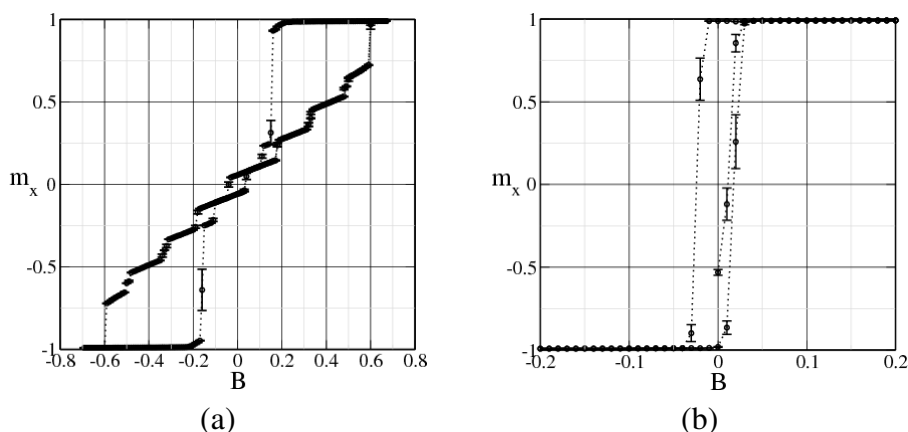


Figura 2.19: Reprodução das curvas de histereses típicas das nano-partículas, em (a) estado com vórtice ($D = 0,4$) e em (b) estado capacitor ($D = 0,1$).

aproximadamente por um parâmetro de rede a . O degrau é a variação da magnetização a cada deslocamento. A variação da magnetização por spin (Δm_x) é inversamente proporcional ao tamanho linear do sistema L . Portanto, aumentando o diâmetro do nano-disco a curva tenderá a ficar cada vez mais contínua. Para nano-partículas de perfil quadrado temos que $\Delta m_x = 1/L$. Para nano-discos, obtemos

$$\Delta m_x = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \frac{1}{L}, \quad (2.16)$$

ou seja, $\Delta m_x \approx 0,900/L$. A dedução dessas relações são apresentadas no apêndice A. Portanto, para um nano-disco devemos observar uma salto na magnetização de aproximadamente $\Delta m_x \approx 0,090$ para $L = 10$ e de $\Delta m_x \approx 0,045$ para $L = 20$. Na figura 2.20 mostramos em detalhe os degraus típicos das curvas de histerese. Nas nossas simulações observamos uma altura típica de aproximadamente $\Delta m_x \approx 0,130$ para $L = 10$ e de $\Delta m_x \approx 0,065$ para $L = 20$. Estes cálculos simples estão em bom acordo com as simulações.

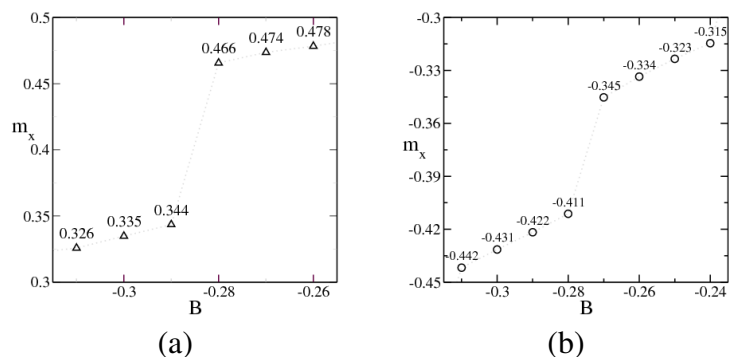


Figura 2.20: Degraus das curvas de histerese vistos em detalhe. Em (a) para um nano-disco com $L = 10$ e em (b) para um nano-disco com $L = 20$. As alturas desses degraus são de $\Delta m_x = 0,122$ e $\Delta m_x = 0,066$, respectivamente.

Nossos resultados também mostraram que o campo de saturação é diretamente proporcional a interação dipolar, como mostrado na figura 2.21

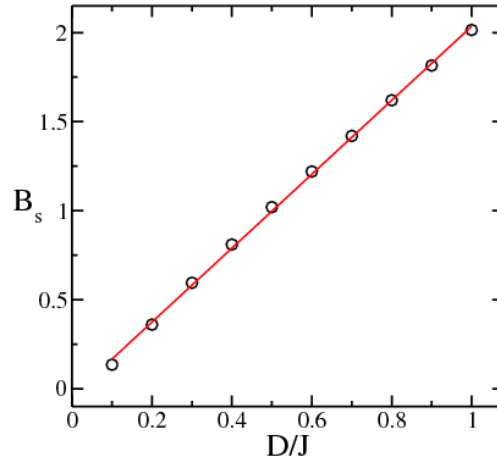


Figura 2.21: Campo de saturação em função da constante dipolar.

2.4.2 Efeito de Exchange-bias em nano-partículas

Nesta seção vamos estudar um nano-disco ferromagnético depositado sobre um substrato antiferromagnético. Nossos resultados mostram que o efeito de EB ocorre e as curvas de histerese apresentadas na seção anterior sofrem um desvio linearmente dependente com a interação de troca na interface FM-AFM.

Antes de mostrar os nossos resultados, vamos apresentar um modelo para esse sistema. Devemos considerar três termos de troca distintos: Um ferromagnético entre os spins da nano-partícula $J_{i,j} = J_d$, outro antiferromagnético para o substrato $J_{i,j} = -J_s$, por fim, uma interação ferromagnética na interface $J_{i,j} = J_{d-s}$. Teremos então,

$$\mathcal{H}_t = \mathcal{H}_t^d + \mathcal{H}_t^s + \mathcal{H}_t^{d-s}, \quad (2.17)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_t^d &= -J_d \sum_{\langle i,j \rangle_d} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j, \\ \mathcal{H}_t^s &= J_s \sum_{\langle i,j \rangle_s} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j, \\ \mathcal{H}_t^{d-s} &= -J_{d-s} \sum_{\langle i,j \rangle_{d-s}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j, \end{aligned} \quad (2.18)$$

onde os símbolos significam: d spins do nano-disco, s do substrato e $d - s$ entre nano-disco e substrato.

Para explorar as simetrias do problema, introduzimos uma anisotropia A na direção \hat{x} . Com todas essas considerações, o hamiltoniano é escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - J_d \sum_{\langle i,j \rangle_p} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + J_s \sum_{\langle i,j \rangle_s} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - J_{d-s} \sum_{\langle i,j \rangle_{d-s}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - A \sum_i^{N_s} (s_i^x)^2 \\ & + D \sum_{i \neq j}^{N_p} \frac{\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{u}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{u}_{ij})}{r_{ij}^3} - B \sum_i^N S_i^x, \end{aligned} \quad (2.19)$$

onde N_p é o número de spins da nano-partícula, N_s do substrato e $N = N_p + N_s$ o número total de spins.

Para completar o modelo, devemos fazer considerações sobre o tipo de rede. Olhando para um dos esquemas de EB (figura 1.11 (a), por exemplo), vemos que o substrato deverá ter camadas intercaladas de spins opostos. Uma forma de satisfazer esta condição é considerar o substrato uma rede cúbica de corpo centrado (CCC) com superfície cortada na direção (100). A rede CCC pode ser vista como duas sub-redes cúbicas simples (CS) entrelaçadas. Cada sítio de uma subrede está no centro da célula unitária da outra subrede. Dessa forma, os primeiros vizinhos de um sítio são os sítios da célula unitária em que ele está centrado (veja figura 2.22 (a)). De outra forma, as subredes podem ser vistas como camadas intercaladas (figura 2.22 (b)), onde os sítios vizinhos estão em camadas distintas (na próxima camada inferior e superior), satisfazendo a condição acima.

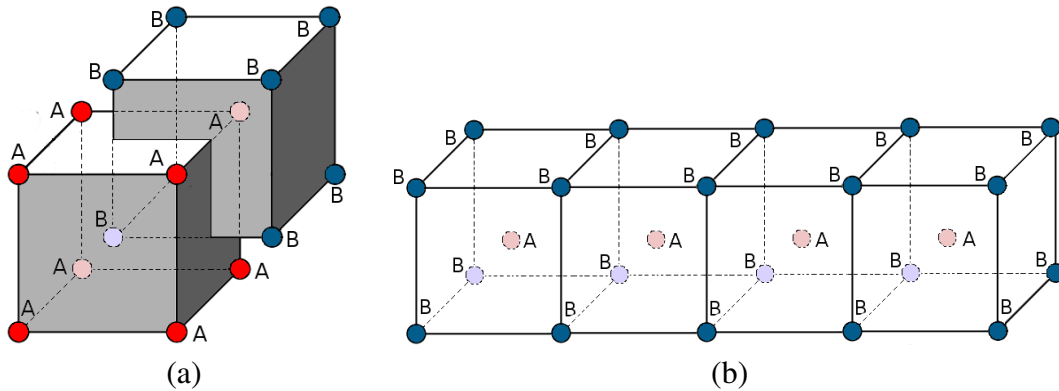


Figura 2.22: Rede cúbica de corpo centrado vista como duas redes cúbicas simples entrelaçadas. Em (a) especificamos as duas sub-redes cúbicas simples A e B . Em (b) mostramos como essas sub-redes também podem ser vistas como camadas intercaladas, sítios da subrede A entre os da subrede B .

Em nossas simulações, vamos considerar o tamanho linear do substrato igual a duas vezes o diâmetro da nano-partícula [30], i.e. $L^s = 2L$, condição de contorno periódica no plano- $\hat{x}\hat{y}$ e aberta na direção \hat{z} . Dessa forma, cada camada do substrato tem $(L^s)^2 = 4L^2$ sítios. Sendo L_z^s o

número de camadas, temos que o número de sítios do substrato é

$$N_s = 4L^2L_z^s. \quad (2.20)$$

Com condições de contorno periódicas, devemos considerar L_z^s par, i.e. $L_z^s = 2n$ com $n = 1, 2, 3, \dots$. Caso L_z^s fosse ímpar o sentido da magnetização de subrede tenderia a se inverter com a inversão do sentido do campo, pois teríamos uma subrede com mais sítios que a outra. Dessa forma, a magnetização espontânea da subrede com maior número de sítios minimizaria a energia alinhando-se ao campo. Crescemos o nano-disco com geometria CCC sobre o substrato, como mostra a figura 2.23. (Considerando uma rede CS, por exemplo, os resultados não se alteram qualitativamente). O sentido em que crescemos a nano-partícula define o sentido $+\hat{z}$. Além disso, vamos definir as camadas a partir da interface. A primeira camada, tanto da nano-partícula quanto do substrato será a da interface. A partir daí, contam-se as camadas da nano-partícula (Cnd) no sentido $+\hat{z}$ e as camadas do substrato (Cs) no sentido $-\hat{z}$, veja figura 2.23 (a).

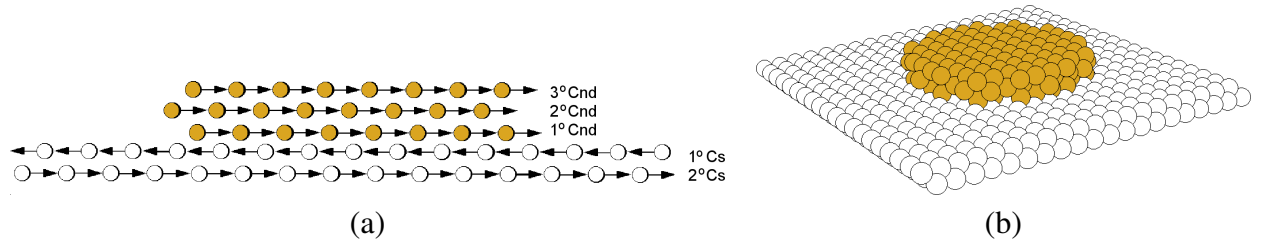


Figura 2.23: Nano-disco ferromagnético crescido epitaxialmente sobre um substrato antiferromagnético. Consideramos uma rede CCC com superfície cortada na direção (100). O substrato têm o dobro do tamanho linear do nano-disco, número par de camadas, condição de contorno periódica no plano- $\hat{x}\hat{y}$ e aberta na direção \hat{z} . Em (a) mostramos um corte no sistema no plano- $\hat{x}\hat{z}$ passando pelo centro do nano-disco. As camadas são identificadas a partir da interface FM-AFM, sendo Cnd do nano-disco e Cs do substrato. Em (b) mostramos o sistema em perspectiva.

Neste estudo consideramos três aproximações para o substrato: Primeiro com spins congelados na direção \hat{x} ; a seguir spins tipo Ising, que podem assumir os valores $+\hat{x}$ ou $-\hat{x}$; e por fim, spins do tipo Heisenberg clássico, definidos na superfície de uma esfera de raio 1. Nesta última aproximação, consideramos dois casos para a anisotropia, uma com plano-fácil e outra com eixo-fácil de magnetização.

Substrato Congelado

Nesta aproximação consideramos o substrato com spins fixados na direção $\hat{\mathbf{x}}$. A interação da nano-partícula com o substrato será descrita apenas por um campo efetivo, na forma

$$\mathbf{B}_{eff} = 4J_{d-s},$$

aplicado na primeira camada da nano-partícula, de modo que o hamiltoniano do sistema será

$$\mathcal{H} = -J_d \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 4J_{d-s} \sum_k s_k^x + D \sum_{i \neq j} \frac{\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{u}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{u}_{ij})}{r_{ij}^3} - B \sum_i s_i^x. \quad (2.21)$$

O gráfico de histerese obtido das simulações é mostrado na figura 2.24 para dois valores do acoplamento J_{d-s} . Observamos o EB como esperado. Observamos que $B_{EB} = |\mathbf{B}_{EB}|$ apresenta um comportamento linear em função da interação J_{d-s} , como mostra a tabela 2.6 e a figura 2.35.

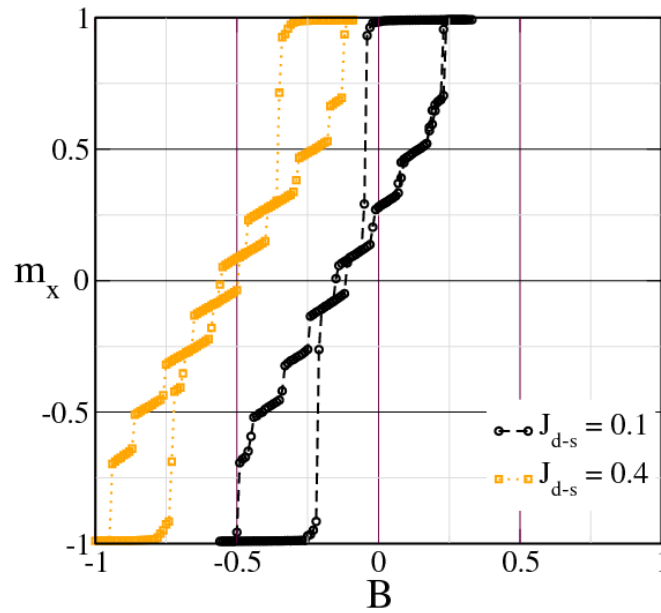


Figura 2.24: Curvas de histerese considerando os spins do substrato congelados, para $D = 0, 2$ e $L = 10$.

Substrato Ising

Consideramos agora o substrato com spins do tipo Ising, podendo assumir os valores $+\hat{\mathbf{x}}$ ou $-\hat{\mathbf{x}}$. Assim sendo, um spin qualquer do substrato pode ser escrito como $\mathbf{s}_i = q_i \hat{\mathbf{x}}$, onde $q_i = \pm 1$. Aqui teremos $s_x^2 = 1$ para os spins do substrato. Portanto, o termo de anisotropia será constante³.

³O termo de anisotropia nesse caso é o mesmo para o substrato fixo mostrado no apêndice B.

Como no Método de Monte Carlo lidamos com diferenças de energia, ele poderá ser ignorado. Além disso, o termo de troca do substrato pode ser escrito como

$$\mathcal{H}_t^s = J_s \sum_{\langle i,j \rangle_s} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = J_s \sum_{\langle i,j \rangle_s} q_i q_j,$$

e o termo de troca da interface como

$$\mathcal{H}_t^{d-s} = -J_{d-s} \sum_{\langle i,j \rangle_{d-s}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = -J_{d-s} \sum_{\langle i,j \rangle_{d-s}} s_i^x s_j^x,$$

com $s_k^x = q_k$ quando o k -ésimo sítio pertencer ao substrato. Podemos reescrever o hamiltoniano mostrado na equação 2.19 na forma

$$\mathcal{H} = -J_d \sum_{\langle i,j \rangle_p} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + J_s \sum_{\langle i,j \rangle_s} q_i q_j - J_{d-s} \sum_{\langle i,j \rangle_{ps}} s_i^x s_j^x + D \sum_{i \neq j} \frac{\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{u}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{u}_{ij})}{r_{ij}^3} - B \sum_i^N S_i^x. \quad (2.22)$$

O fenômeno de exchange bias só irá acontecer para uma certa relação entre espessura do substrato L_z^s , diâmetro da partícula L e das constantes de troca J_s e J_{d-s} , dada por

$$L_z^s > \frac{J_{d-s} L}{J_s} \frac{L}{4}. \quad (2.23)$$

A demonstração dessa relação é apresentada no apêndice C.

Observando esta condição, também obtivemos um desvio nas curvas de histerese em função da interação de troca da interface (figura 2.25). Aqui o B_{EB} também terá um comportamento linear em função de J_{d-s} , como ilustrado na figura 2.35, cujos dados são apresentados na tabela 2.6.

Substrato Heisenberg - Plano Fácil de Magnetização

Consideramos, finalmente, os spins do substrato como do tipo Heisenberg. Vamos considerar inicialmente o caso de simetria de plano-fácil. Neste caso reescreveremos a equação 2.19 considerando um plano de magnetização fácil ($A < 0$)

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - J_d \sum_{\langle i,j \rangle_p} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + J_s \sum_{\langle i,j \rangle_s} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - J_{d-s} \sum_{\langle i,j \rangle_{ps}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + A \sum_i^{N_s} (s_i^z)^2 \\ & + D \sum_{i \neq j}^{N_p} \frac{\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{u}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{u}_{ij})}{r_{ij}^3} - B \sum_i^N S_i^x. \end{aligned} \quad (2.24)$$

As curvas de histerese são mostradas na figura 2.26. Nesse gráfico está claro que não há

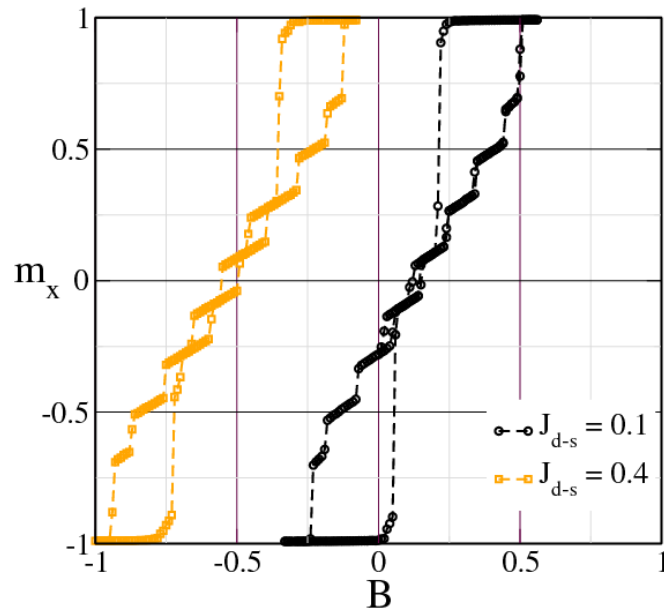


Figura 2.25: Curva de histerese apresentado exchange-bias para spins do substrato tipo-Ising. Para $D = 0,2$, $j_s = 0,5$ e $L = 10$.

um deslocamento dessas curvas em função da interação de troca na interface FM-AFM.

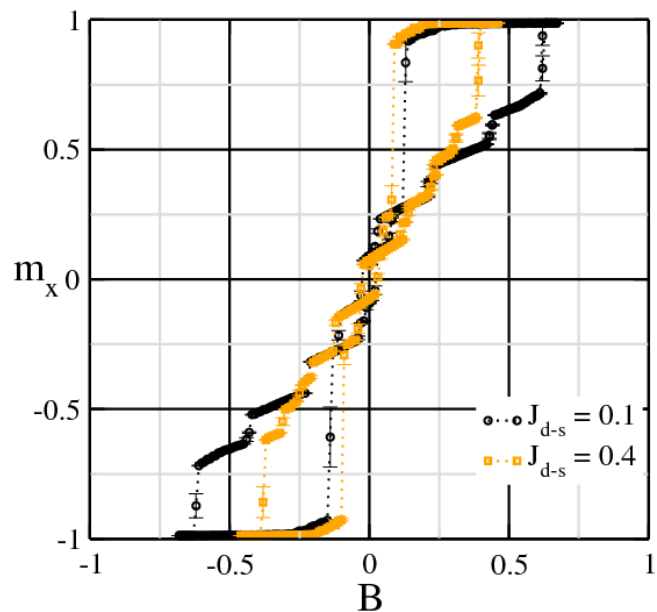


Figura 2.26: Curvas de histerese para o substrato Heisenberg com plano-fácil para $J_{d-s} = 0,1$ e $0,4$. Os outros parâmetros são: $A = 1$, $D = 0,2$ e $J_s = 0,5$.

Olhando para a configuração de spins, observamos que o vórtice é impresso nas camadas do substrato. Vamos considerar primeiro o caso em que a troca na interface é ferromagnética. Nesse caso, o vórtice que aparece na primeira camada do substrato vai ter o mesmo sentido de

rotação do vórtice formado na nano-partícula. O sentido de rotação vai alternando de camada em camada do substrato, como mostrado esquematicamente na figura 2.27. Aplicando um campo magnético o vórtice se deslocará. Quando o campo fizer a magnetização do nano-disco saturar, os vórtices observados no substrato também desaparecerão. Além disso, observamos que a magnetização da primeira camada do substrato sempre estará no mesmo sentido do campo de saturação. Ou seja, se o campo de saturação é positivo (negativo) a magnetização da primeira camada também será positiva (negativa). A magnetização de subrede do substrato gira junto com a magnetização espontânea da nano-partícula (veja figura 2.27). Esse fato se deve aos spins do substrato poderem apontar em qualquer sentido no plano. Assim sendo, não haverá uma barreira de energia a ser vencida para mudar o sentido da magnetização de subrede. Dessa forma, as configurações de spins mostradas nas figuras 1.11 (a) e (b), condições para se observar o EB, não são satisfeitas.

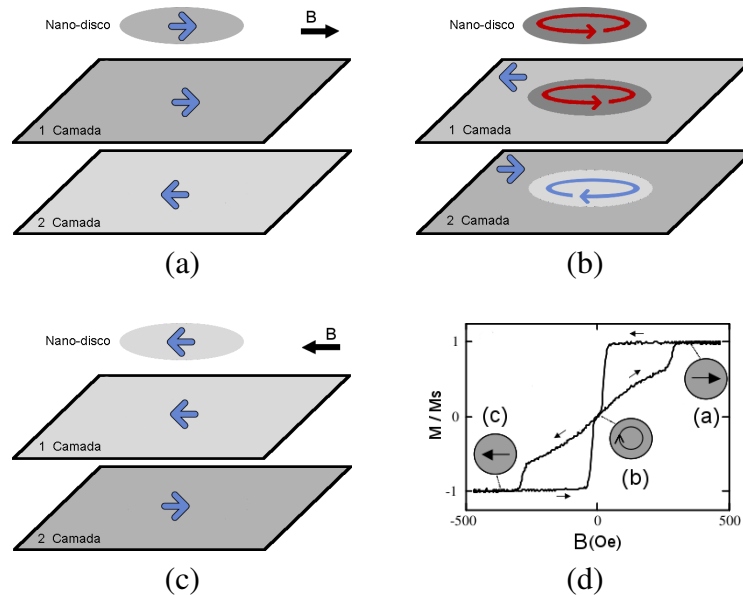


Figura 2.27: Esquema da configuração de spins para o substrato tipo Heisenberg, com plano de magnetização fácil e integral de troca ferromagnética na interface. Em (a) mostramos a configuração observada para o campo de saturação no sentido $-\hat{x}$, em (b) campo aplicado nulo e em (c) campo de saturação no sentido $+\hat{x}$. Em (d) mostramos o ponto na curva de histerese para cada uma dessas configurações. Essas configurações foram obtidas aumentando o campo do valor de saturação negativo até o positivo. A quiralidade do vórtice no nano-disco é degenerada.

Se a interação de troca da interface for antiferromagnética, a situação se inverte. O vórtice impresso na primeira camada do substrato terá sentido de rotação oposto ao da nano-partícula (veja figura 2.28). Além disso, a primeira camada do substrato terá spins opostos ao sentido do campo de saturação. Se o campo de saturação é positivo (negativo) a magnetização da primeira camada será negativa (positiva). A magnetização de subrede do substrato será invertida da

mesma forma. Portanto, as configurações de spins mostradas nas figuras 1.11 (c) e (d) não são satisfeitas.

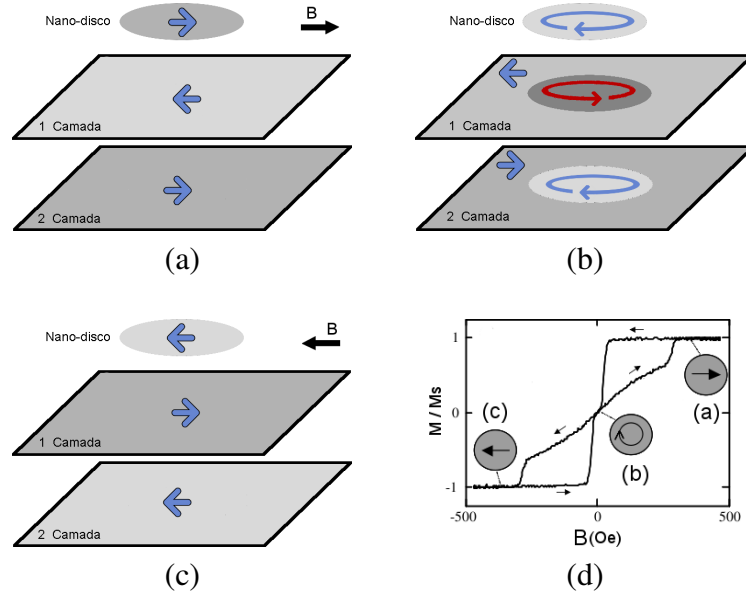


Figura 2.28: Esquema da configuração de spins para o substrato tipo Heisenberg e integral de troca antiferromagnética na interface. Em (a) mostramos a configuração observada para o campo de saturação no sentido $-\hat{x}$, em (b) campo aplicado nulo e em (c) campo de saturação no sentido $+\hat{x}$. Em (d) mostramos o ponto na curva de histerese para cada uma dessas configurações. Essas configurações foram obtidas reduzindo o campo do valor de saturação positivo até o negativo, a quiralidade do vórtice no nano-disco é degenerada.

Assim, como no caso do substrato não-magnético, o campo de saturação é uma função linear da constante dipolar, como pode ser visto na figura 2.29. Além disso, observamos que o campo aplicado necessário para saturar a nano-partícula será menor na presença do substrato magnético. Isso se deve ao fato de que o campo efetivo gerado pelo substrato irá contribuir com o campo magnético externo.

Substrato Heisenberg - Eixo Fácil de Magnetização

Nesse caso, o hamiltoniano toma a forma original proposta pela equação 2.19, ou seja,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - J_d \sum_{\langle i,j \rangle_p} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + J_s \sum_{\langle i,j \rangle_s} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - J_{d-s} \sum_{\langle i,j \rangle_{ps}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - A \sum_i^{N_s} (s_i^x)^2 \\ & + D \sum_{i \neq j}^{N_p} \frac{\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{u}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{u}_{ij})}{r_{ij}^3} - B \sum_i^N s_i^x. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Os spins do substrato se comportarão como spins do tipo Ising[60, 61] se

$$A > \frac{\pi J_{d-s}}{4L_z^s}, \quad (2.26)$$

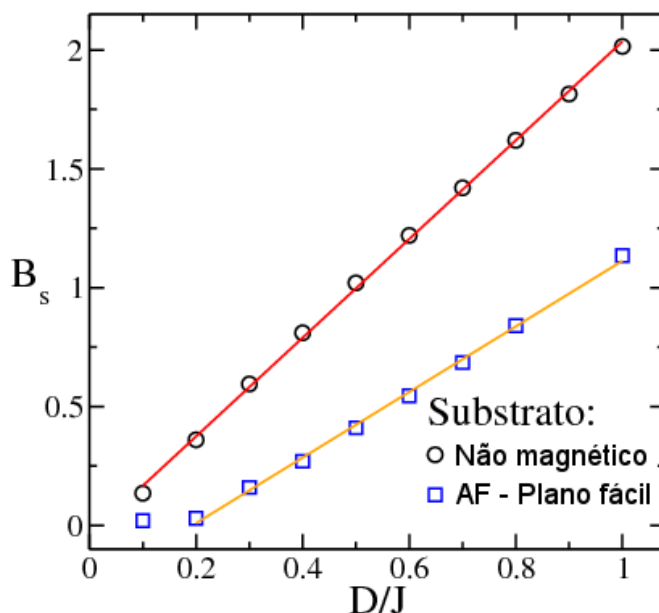


Figura 2.29: Campo de saturação em função da constante dipolar para os substratos não magnético (círculos) e Heisenberg com eixo de magnetização fácil (quadrados).

veja apêndice D.2. Para valores que não satisfazem essa relação, não se observa o efeito de EB. Neste caso a curva de histerese fica mais larga, ou seja, o campo de saturação aumenta em ambos sentidos de B , como visto na figura 2.30. Nas configurações de spins, mostradas nessa mesma figura, observamos que a magnetização da primeira camada do substrato competirá com o campo aplicado, logo antes de saturar. Dessa forma, o campo necessário para saturar a nanopartícula aumentará.

Além dessa condição, devemos garantir que o substrato permanecerá antiferromagnético para todo o intervalo de valores de campo aplicado. O campo máximo que poderá ser aplicado, para garantir também essa condição, vai depender de A e J_s . Fixando a anisotropia através da condição expressa pela inequação 2.26, nós podemos determinar o comportamento do substrato com o campo magnético. Na figura 2.32 mostramos um diagrama onde observamos três configurações possíveis para o substrato: Antiferromagnético (AFM), spin-flop (SF) e saturado (S), veja figura 2.31.

As linhas pretas com símbolos foram obtidas por simulação. A linha vermelha foi obtida comparando a energia do substrato nos estados AFM e S. Através dessa análise, para se observar o EB, o campo aplicado deve obedecer a seguinte relação,

$$B < \frac{K}{g\mu_B\sigma} \left(1 - \frac{1}{L_z^s}\right), \quad (2.27)$$

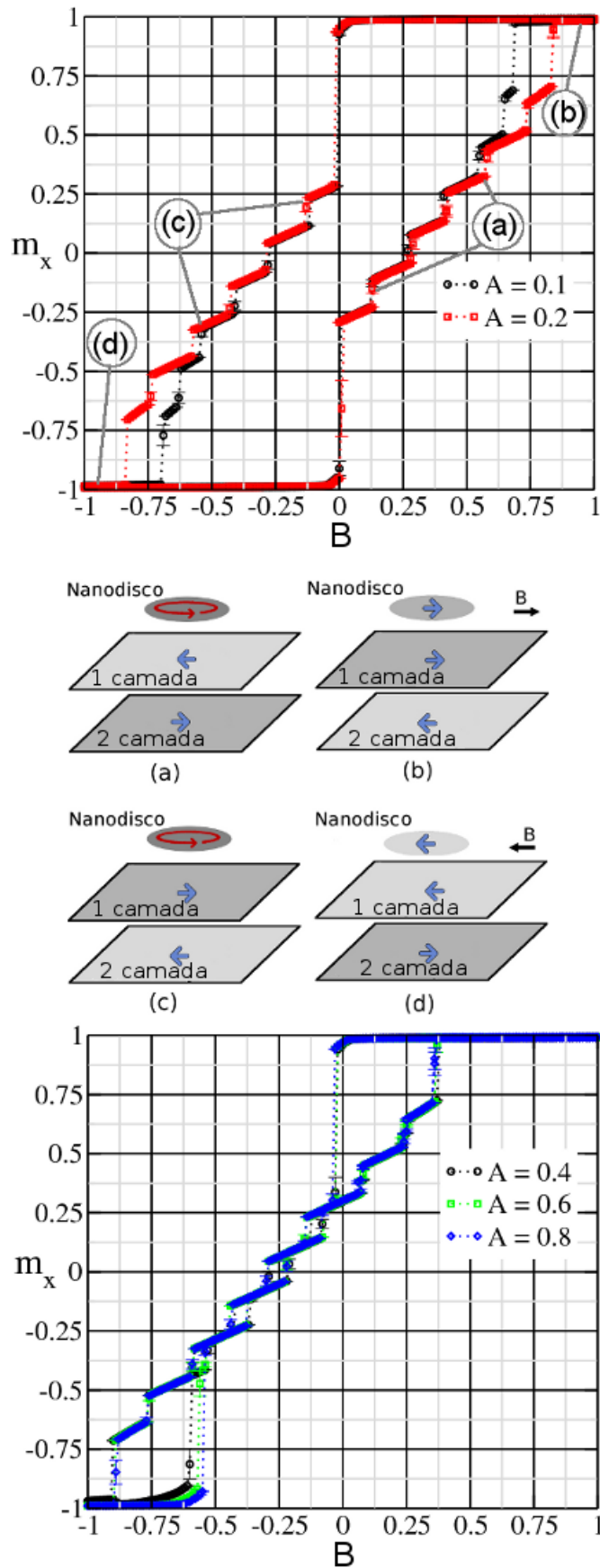


Figura 2.30: Curvas de histerese para vários valores de anisotropia, para $D = 0,3$, $L = 10$, $J_s = 2,0$ e $J_{d-s} = 0,8$. No primeiro gráfico mostramos as curvas para $A = 0,1$ e $A = 0,2$, onde não observamos EB. A configuração de spins dos pontos (a), (b), (c) e (d) são mostrados abaixo. No outro gráfico mostramos as curvas para $A = 0,4$, $A = 0,6$ e $A = 0,8$, onde observamos o EB.

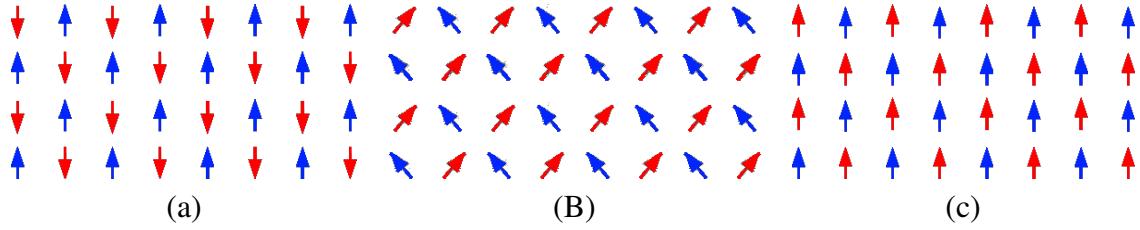


Figura 2.31: Configurações de spins possíveis para o substrato do tipo Heisenberg: Em (a) antiferromagnético (AFM), em (b) a spin-flop (SF) e em (c) saturado (S). As cores identificam as subredes, spins vermelho são da subrede A e spins azuis da subrede B. Como para a rede CCC as subredes estão em camadas distintas, então, temos que, a primeira camada do substrato pertence a subrede A e segunda camada pertence a subrede B, por exemplo.

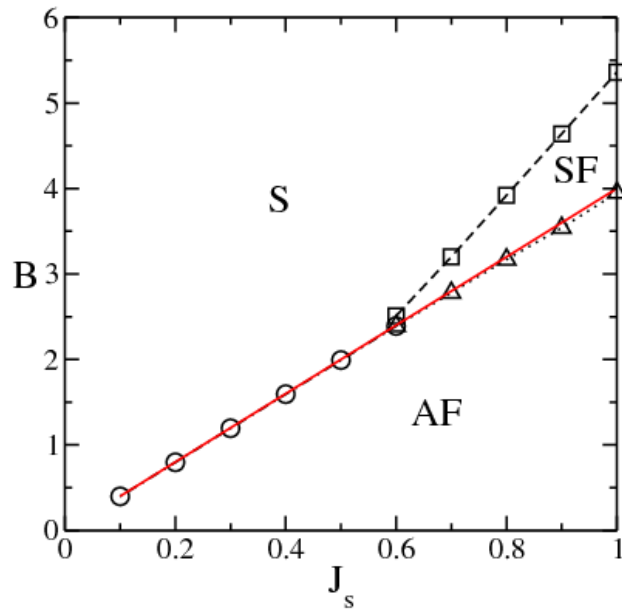


Figura 2.32: Diagrama mostrando as fases do substrato, antiferromagnético (AF), saturado (S) e spin-flop (SF), no espaço de campo aplicado em função integral de troca do substrato. As linhas pretas com símbolos corresponde a resultados de simulações e, a linha vermelha sem símbolos, resultado analítico. Os parâmetros utilizados foram $A = 1, 0$, $D = 0, 3$, $J_{d-s} = 0, 1$, $L = 10$ e $L_z^s = 2$.

onde K é a rigidez de troca, dada pelo equação 1.3, que pode ser escrita como

$$K = \frac{nJ_s\sigma^2}{a}. \quad (2.28)$$

Como discutido, K é um parâmetro para avaliar o esforço necessário para mudar a orientação dos spins. Respeitando essa inequação, o campo não é forte o suficiente para mudar a configuração dos spins impostas pelo termo de troca, neste caso a configuração antiferromagnética. A demonstração dessa relação é apresentada no apêndice D.

Como fizemos, $a = 1$, $\sigma = 1$, $g = 1$ e $\mu_B = 1$, e para rede CCC $n = 8$, temos que

$$B < 8J_s \left(1 - \frac{1}{L_z^s}\right). \quad (2.29)$$

Neste diagrama utilizamos os seguintes parâmetros, $A = 1,0$, $D = 0,3$, $J_{d-s} = 0,1$, $L = 10$ e $L_z^s = 2$. Substituindo $L_z^s = 2$ na equação 2.29, temos que, analiticamente, o campo magnético máximo que poderá ser aplicado nesta situação é

$$B_{max} = 4J_s, \quad (2.30)$$

que corresponde a linha vermelha do diagrama. Vamos olhar agora para os pontos obtidos por simulação. A reta que melhor ajusta os pontos que separam a fase AFM da fase S é dada por

$$B_{max}^{AF-S} = 3,986(1)J_s + 0,000(1).$$

A reta que melhor ajusta os pontos que separam a fase AFM da fase SF é dada por

$$B_{max}^{AF-SF} = 3,88(3)J_s + 0,06(3).$$

Portanto, o valor da estimativa analítica para o campo máximo concorda com os obtidos pela simulação, corroborando a análise. Uma vez satisfeitas todas essas condições, o número de camadas do substrato não tem influência no comportamento magnético do nano-disco, como pode ser visto na figura 2.33. Nesta figura, fica claro que a curva de histerese é a mesma para o substrato com $L_z^s = 2$ e $L_z^s = 4$.

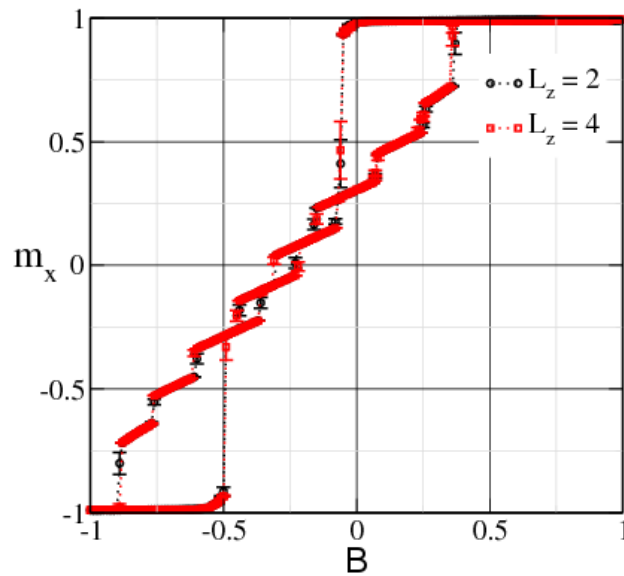


Figura 2.33: Comportamento magnético do nano-disco em função da espessura do substrato. Aqui utilizamos $D = 0,3$, $A = 2,0$, $J_s = 0,5$ e $J_{d-s} = 0,2$

Contudo, observamos que o deslocamento das curvas de histerese, figura 2.34, é similar aos casos estudados anteriormente. Na tabela 2.6 apresentamos os valores do campo de EB e na figura 2.35 ilustramos o comportamento linear de seu módulo. Este comportamento linear é descrito pela equação 2.31. Essa reta foi obtida pela regressão linear da média dos valores para os três tipos de substrato (veja tabela 2.6).

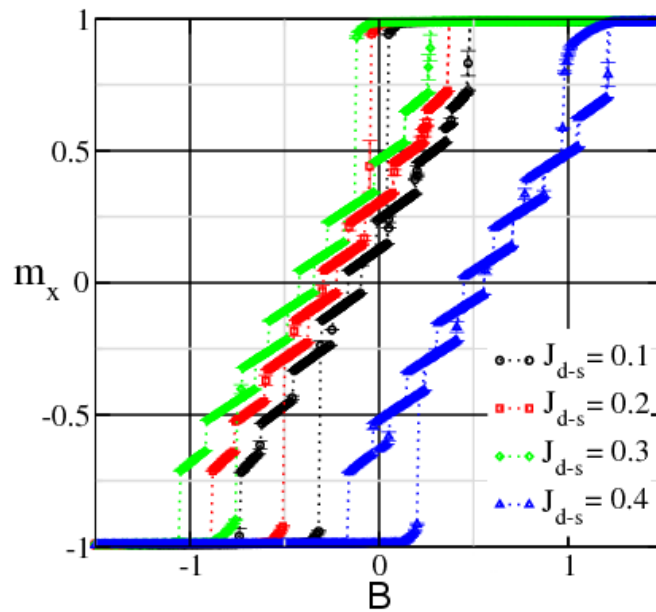


Figura 2.34: Curvas de histerese apresentado exchange-bias com spins do tipo Heisenberg clássico. $D = 0,3$, $A = 1,0$ e $J_s = 2,0$

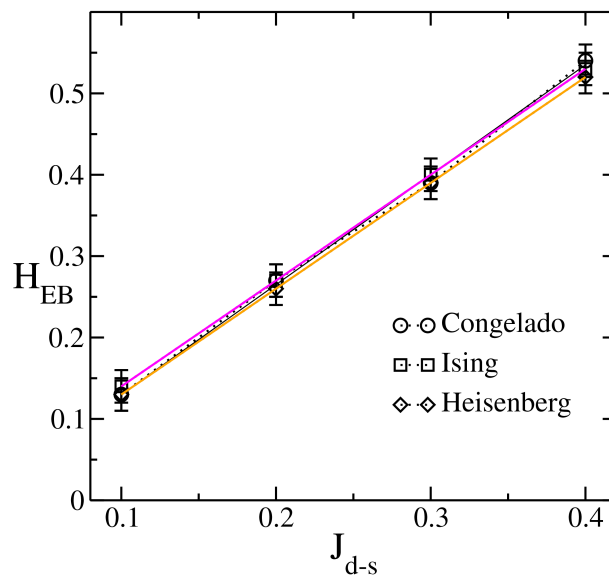


Figura 2.35: Campo de exchange bias em função da integral de troca da interface, para os substratos congelado, tipo Ising e tipo Heisenberg clássico.

Tabela 2.6: Campo de Exchange Bias para os três tipo de substratos e a média entre eles em função da troca na interface.

J_{d-s}	Fixo	Ising	Heisenberg	média
0,1	0.14(1)	0.14(1)	0.13(1)	0.14(1)
0,2	0.27(1)	0.27(1)	0.26(1)	0.27(1)
0,3	0.40(1)	0.40(1)	0.39(1)	0.40(1)
0,4	0.53(1)	0.53(1)	0.52(1)	0.53(1)

$$B_{EB} = 1,300(1)J_{d-s} - 0,010(1). \quad (2.31)$$

Contudo, podemos afirmar que, em certas condições, a aproximação do substrato por spins fixos é suficiente para determinar o comportamento de exchange bias em nano-partículas magnéticas. Essas condições são: Eixo de magnetização fácil com anisotropia forte, campo de saturação alto e, por fim, interação de troca na interface fraca respeitando a inequação 2.23.

3 *Conclusão*

Neste trabalho discutimos a formação de vórtices magnéticos em nano-partículas, assim como o seu comportamento termodinâmico. Fizemos este estudo via simulação computacional, implementando algoritmos de otimização por Monte Carlo e de dinâmica de spins. Em alguns casos, quando possível, completamos nossos argumentos com aproximações analíticas.

Usamos um modelo de pseudo-spins clássico para a nano-partícula através da soma do termo de troca de Heisenberg e da interação dipolar. Com intuito de reduzir o custo computacional das nossas simulações, avaliamos a possibilidade de se fazer um corte na interação dipolar. Essa possibilidade se mostrou inviável devido às distorções no estado fundamental quando comparados ao sistema sem corte. Avaliamos também a influência do tipo de rede e da geometria da nano-partícula na formação do vórtice.

Para um nano-disco, avaliamos as redes quadradas, triangulares e hexagonais, com uma e duas camadas. Observamos três regiões distintas no espaço de parâmetros do modelo, i.e. intensidade da interação dipolar D/J em função do diâmetro do nano-disco L . Sendo, região I em que o estado capacitor é mais estável, região II, onde o vórtice fora-do-plano é o mais estável, e região III, em que vórtice planar é mais estável. A linha que separa as regiões que formam vórtices da que forma capacitor tem um comportamento do tipo lei de potência, na forma $\frac{D}{J} = \frac{D_0}{J} + \frac{1}{A(1+BL^2)}$. A região onde os dois tipos de vórtices são observados é separada por uma linha de inclinação nula. A região com vórtice fora-do-plano não é observado para rede triangular em uma camada. A rede quadrada apresentou a maior região com vórtices fora-do-plano, região essa que aumenta aumentando o número de camadas da nano-partícula.

Avaliamos também nano-partículas cuja forma geométrica é um prisma de base quadrada. Para uma e duas camadas, o comportamento é similar ao nano-disco. Aumentando o número de camadas, aparece uma magnetização nas arestas perpendiculares à base. Concentramos o estudo para parâmetros do modelo em que vórtices são formados nas camadas paralelas à base. Dessa forma, observamos que o sentido da magnetização das arestas depende da polarização do vórtice. O caráter antiferromagnético da interação dipolar determina este comportamento. Quando a magnetização do centro do vórtice é maior que a das arestas, todas as arestas tem magnetização oposta a polarização. Quando são da mesma ordem de grandeza uma aresta somente terá magnetização no mesmo sentido da polarização. E, finalmente, quando a

magnetização do centro do vórtice é pequena em relação à das arestas, observamos duas com magnetização no sentido da polarização e duas opostas. Observamos que as arestas com mesmo sentido de magnetização são adjacentes. A configuração total de spins torna proibitivo o caso em que as arestas com magnetização no mesmo sentido sejam diagonalmente opostas.

Avaliamos essa mesma dependência em nano-partículas triangulares e o resultado é similar, com a diferença de que somente dois tipos de configurações de arestas foram observados. Para magnetização do centro do vórtice muito maior que as arestas observamos todas elas com magnetização oposta a polarização. Caso contrário, uma aresta com magnetização no sentido da polarização.

Aumentando a temperatura pares vórtice-antivórtice são criados no sistema. Acredita-se que esses pares são responsáveis pela inversão da polarização. No entanto, observamos a inversão da polarização aleatoriamente a temperaturas bem abaixo daquelas em que estes pares começam a aparecer. Portanto, faz-se necessário um estudo mais extensivo sobre o mecanismo de inversão de polaridade.

Em contato com um campo magnético, uma nano-partícula no estado vórtice apresenta uma curva de histerese típica, em que não existe magnetização remanescente. O campo de saturação depende do valor da intensidade da interação dipolar D/J . Quanto maior D/J maior será este campo. Se a nano-partícula está em contato com um substrato antiferromagnético observamos o efeito de exchange-bias (EB). Modelamos o substrato por uma camada fixa de spins, por camadas de spins tipo Ising e por spins do tipo Heisenberg clássico. Em todas esses casos observamos uma dependência linear entre o campo de exchange-bias (deslocamento da curva) em função da interação de troca entre nano-partícula e substrato, na forma $H_{EB} = 1,30J_{d-s}$, para rede cristalina CCC e nano-partícula crescida epitaxialmente sobre o substrato. Para observarmos o efeito de exchange bias o substrato deverá ser de eixo de magnetização fácil, como $A > \pi J_{d-s}/4L_z^s$, e campo aplicado na direção desse eixo. Além disso, esse campo deverá ser menor que $\left(8 - \frac{4}{L_z^s}\right)J_s$ e a espessura do substrato maior ou igual a $\frac{J_{d-s}L}{J_s} \frac{L}{2}$. Caso o substrato for de plano de magnetização fácil o campo de saturação da nano-partícula será menor quando comparado com um substrato não-magnético e também não apresentará o efeito de EB.

APÊNDICE A – Formação de degraus nas curvas de histerese

Em nossas curvas de histerese observamos a formação de degraus. Uma análise da figura 1.10 pode nos ajudar a entender este fato. Na figura 1.10 (a) o vórtice está no centro da nano-partícula e as regiões com magnetização no sentido do campo e no sentido oposto são idênticas. Na figura 1.10 (b), o vórtice se deslocou de um parâmetro de rede. Observa-se um aumento na região com magnetização no sentido do campo. Vamos chamar esta variação na área de ΔA_+ . Concomitantemente, observamos uma redução na região com magnetização oposta ao campo, que chamaremos de ΔA_- . Para calcular a variação da magnetização devemos contabilizar o número de spins que se alinharam na direção do campo e o número de spins que não estão mais na direção oposta. Ou seja, devemos contabilizar os spins em ΔA_+ e em ΔA_- e somá-los. Assim sendo,

$$\Delta M_x = \rho_s e \Delta A_+ + \rho_s e \Delta A_-, \quad (\text{A.1})$$

onde e é a espessura do nano-disco e ρ_s é a densidade de spins. Como $e = aL_z$, podemos escrever que

$$\Delta M_x = \rho_s a L_z (\Delta A_+ + \Delta A_-), \quad (\text{A.2})$$

Na figura A.1, onde detalhamos essas áreas, podemos notar que as variações das áreas podem ser obtidas através da diferença entre áreas de triângulos. A base de todos estes triângulos possuem o mesmo valor $b = \sqrt{2}aL/2$. ΔA_+ corresponde a região hachurada na figura A.1 (b) e ΔA_- a região hachurada na figura A.1 (c). O triângulo interno da figura A.1 (b) e o externo da figura A.1 (c) são idênticos e são formados quando o centro do vórtice coincide com o centro do nano-disco. Vamos chamar a altura desses triângulos de h . O triângulo externo da figura A.1 (b) e o interno figura A.1 (c) são formados com o centro do vórtice deslocado do centro do nano-disco de um parâmetro de rede. Portanto, as alturas desses triângulos são $h' = h + a$ e $h'' = h - a$, respectivamente. Dessa forma, temos que

$$\Delta A_+ = \frac{bh'}{2} - \frac{bh}{2} = \frac{1}{2}ab$$

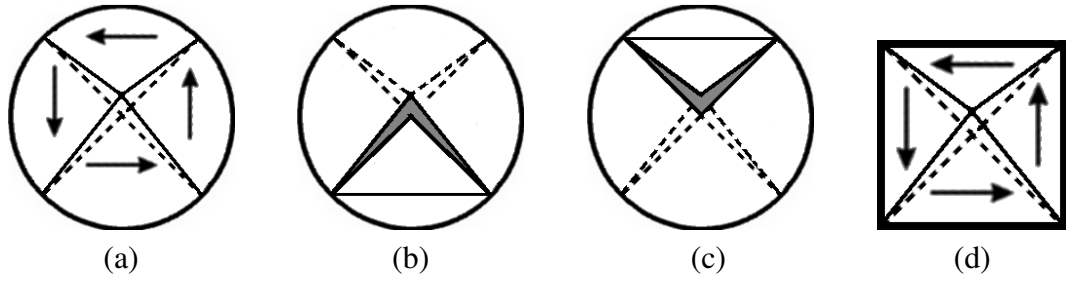


Figura A.1: Esquema da magnetização em vórtices. Em (a) a linha tracejada indica o esquema da magnetização quando o centro do vórtice está no centro do nano-disco e a linha contínua o esquema quando o vórtice desloca de um parâmetro de rede. Em (b) a área hachurada indica o aumento da região com magnetização no sentido do campo magnético, que pode ser calculado pela diferença das áreas entre os triângulos traçados. Em (c) a área hachurada indica a redução da região com magnetização no sentido oposto do campo magnético, que também pode ser calculada como a diferença das áreas dos triângulos traçados. Em (d) mostramos o esquema de magnetização similar ao mostrado em (a) para uma nano-partícula quadrada. Apesar de não termos resultados para curva de histerese neste tipo de nano-partícula, este esquema mostra de forma mais clara a motivação de termos traçado triângulos, já que a magnetização segue a direção das arestas.

e

$$\Delta A_- = \frac{bh}{2} - \frac{bh''}{2} = \frac{1}{2}ab.$$

Portanto,

$$\Delta A_+ = \Delta A_- = \frac{\sqrt{2}}{4}a^2L. \quad (\text{A.3})$$

Substituindo essa relação na equação A.2, temos que

$$\Delta M_x = \frac{\sqrt{2}}{2}\rho_s a^3 L L_z, \quad (\text{A.4})$$

Para podermos comparar com os resultados das simulações devemos dividir esse valor pela magnetização de saturação, já que medimos a magnetização por spin. Como o volume total do nano-disco é $V = \pi a^3 L_z L^2 / 4$, temos que $M_S = \rho_s \pi a^3 L_z \frac{L^2}{4}$. Contudo, a altura dos degraus nas curvas de histerese será de

$$\Delta m_x = \frac{\Delta M_x}{M_S} = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \frac{1}{L} \approx \frac{0,900}{L}. \quad (\text{A.5})$$

Repetindo a mesma conta para uma nano-partícula quadrada, ou seja, considerando a base dos triângulos $b = aL$ e o volume total da nano-partícula $V = a^3 L^2 L_z$, temos que

$$\Delta m_x = \frac{1}{L}. \quad (\text{A.6})$$

APÊNDICE B – Campo efetivo gerado pelo substrato

Podemos tratar a interação de uma nano-partícula depositada sobre um substrato antiferromagnético através de um campo efetivo. Aqui vamos demonstrar a dedução deste campo considerando os spins do substrato congelados, ou seja, fixados em um sentido. Como discutido, para se observar o EB as camadas do substrato devem ser intercaladas com spins apontando em sentidos opostos. Vamos fixar os spins na direção do campo aplicado, i.e. na direção $\hat{\mathbf{x}}$. Uma camada terá spins apontando no sentido $+\hat{\mathbf{x}}$ e outra no sentido $-\hat{\mathbf{x}}$. Sem perda de generalidade, vamos definir a primeira camada do substrato com spins no sentido $+\hat{\mathbf{x}}$.

Os termos de troca H_t^s , de anisotropia H_a e de campo aplicado nos spins do substrato H_z^s serão constantes neste caso (veja seção B.1). Como no método de Monte Carlo lidamos com variação de energia, esses termos constantes irão se cancelar, portanto, podem ser ignorados no modelo (equação 2.19).

A única contribuição do substrato será no termo de troca na interface, que pode ser escrita como

$$\mathcal{H}_t^{d-s} = -J_{d-s} \sum_{\langle i,j \rangle_{d-s}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = -n_{d-s} J_{d-s} \sum_k^{N_{d-s}} s_k^x, \quad (\text{B.1})$$

onde N_{d-s} é o número de sítios da nano-partícula que estão localizados na interface e n_{d-s} é o número de primeiros vizinhos que cada um desses sítios possui no substrato. Essa avaliação foi feita da seguinte forma: Suponha um spin qualquer da nano-partícula que esteja na interface, vamos chamá-lo de \mathbf{s}_n . Como definimos os spins da primeira camada do substrato apontando no sentido $+\hat{\mathbf{x}}$, temos que $\mathbf{s}_n \cdot \mathbf{s}_i = s_n^x$, $\forall \mathbf{s}_i$ vizinho de \mathbf{s}_n no substrato. Dessa forma, a contribuição de s_n para o termo de troca na interface será igual a $-n_{d-s} s_n^x$. Somando a contribuição dos N_{d-s} spins dessa região chegamos na equação B.1. Da forma que construímos a rede $n_{d-s} = 4$. Assim sendo, podemos considerar o hamiltoniano do sistema como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 4J_{d-s} \sum_k^{N_{d-s}} s_k^x + D \sum_{i \neq j} \frac{\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{u}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{u}_{ij})}{r_{ij}^3} - B \sum_i s_i^x. \quad (\text{B.2})$$

Voltamos para a notação antiga, já que neste modelo não precisamos nos preocupar em espe-

cificar os spins do substrato. De fato, este hamiltoniano é equação 2.14 acrescida do termo de troca na interface, que avaliado tomou forma similar ao termo Zeeman. Ou seja, o substrato gera um campo efetivo ($\mathbf{B}_{eff} = n_{d-s}J_{d-s}$) aplicado na primeira camada da nano-partícula.

B.1 Termos constantes

Os termos de anisotropia e de troca do substrato, mostrados no hamiltoniano do sistema (equação 2.19), para este caso são

$$\mathcal{H}_a = -4L^2L_z^s A \quad (\text{B.3})$$

e

$$\mathcal{H}_t^s = -16J_s L^2 (L_z^s - 1), \quad (\text{B.4})$$

respectivamente. Chegamos nestas constantes da seguinte forma: Por construção $s_x^2 = 1$ e $\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = -1$ para todos os spins do substrato. Pela forma com que os spins estão congelados, temos que

$$\mathcal{H}_a = -A \sum_i^{N_s} s_x^2 = -N_s A$$

e

$$\mathcal{H}_t^s = J_s \sum_{\langle i,j \rangle_s} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = -J_s N_{lv},$$

onde N_s é o número de sítios do substrato e N_{lv} é o número total de ligações entre primeiros vizinhos destes sítios. Como visto anteriormente, $N_s = 4L^2L_z^s$ (equação 2.20), assim sendo

$$\mathcal{H}_a = -N_s A = -4L^2L_z^s A$$

como afirmado. Para o termo de troca, devemos encontrar N_{lv} . Seja n_v o número de primeiros vizinhos que cada sítio possui. A princípio podemos pensar que, como cada spin possui n_v vizinhos e o substrato possui N_s spins, teremos $N_{lv} = n_v N_s$ ligações entre primeiros vizinhos no substrato. No entanto, a primeira e última camada possuem fronteira aberta na direção \hat{z} . Portanto, os $L_z^s = 4L^2$ sítios de cada uma dessas camadas possuem na verdade $n_v/2$ vizinhos. Ou seja, super-estimamos o valor em $2 \times 4L^2 n_v / 2$ ligações. Assim sendo, devemos subtrair essas ligações do número total já contabilizado, portanto, $N_{lv} = n_v N_s - 4n_v L^2$. Além disso, devemos dividir esse número por dois. Pois, como a ligação entre os sítios i e j é a mesma que a entre os sítios j e i , esse valor está duplicado. Dessa forma, $N_{lv} = n_v N_s / 2 - 2n_v L^2$. Substituindo a equação 2.20 ($N_s = 4L^2L_z^s$) nessa relação, temos que

$$N_{lv} = 2n_v L^2 (L_z^s - 1). \quad (\text{B.5})$$

Como, para a rede CCC, $n_v = 8$, temos que

$$\mathcal{H}_t^s = -J_s N_{lv} = -16J_s L^2 (L_z^s - 1),$$

como queríamos demonstrar.

Além desses termos, também será constante o termo Zeeman aplicado aos spins do substrato. Como consideramos um número par de camadas, essa constante será zero ($\mathcal{H}_z^s = -B \sum_i s_i^x = 0$), já que metade dos spins apontam no sentido $+\hat{x}$ e a outra metade no sentido $-\hat{x}$.

APÊNDICE C – Condição de espessura mínima

Quando consideramos o substrato com spins do tipo Ising, observamos que o fenômeno de exchange bias só irá acontecer para certos valores de espessura do substrato (L_z^s). Essa espessura deve obedecer uma relação entre diâmetro da partícula L e das constantes de troca J_s e J_{d-s} , dada por

$$L_z^s > \frac{J_{d-s} L}{J_s} \frac{1}{4}. \quad (\text{C.1})$$

Essa relação foi obtida da seguinte forma: Suponha que a magnetização da primeira camada do substrato aponte no sentido $-\hat{x}$ e aplicamos um campo magnético suficiente para saturar o nano-disco no sentido oposto, i.e. $+\hat{x}$ (veja figura C.1). A configuração de spins obtida quando a espessura obedece à condição acima é mostrada na figura C.1 (b), cujo esquema é apresentado na figura C.2 (a). Vamos chamar essa configuração de estado substrato-monodomínio. Esta configuração concorda com a condição para observamos o EB (figura 1.11 (b)). Já para espessuras que não obedecem a inequação C.1, os spins do substrato irão acompanhar o sentido de seus primeiros vizinhos no nano-disco. Assim sendo, uma região cilíndrica, logo abaixo do nanodisco, terá a sua magnetização de subrede invertida (veja figura C.1 (c) e esquema na figura C.2 (b)). Podemos entender essa região como um domínio AFM cilíndrico. Vamos chamar essa configuração de estado substrato-multidomínio. Devido a essa inversão no sentido dos spins, não é possível observar o efeito de EB neste caso. A condição de espessura mínima é obtida olhando para diferença de energia entre estes dois estados.

Seja $\{\mathbf{S}\}$ o conjunto dos spins ordenados na configuração do estado substrato-monodomínio, e $\{\mathbf{S}'\}$ o conjunto dos spins ordenados na configuração do estado substrato-multidomínio. A diferença de energia $\Delta\mathcal{H}$ entre esses dois estados é

$$\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\{\mathbf{S}\}) - \mathcal{H}(\{\mathbf{S}'\}),$$

onde $\mathcal{H}(\{\mathbf{Q}\})$ é o hamiltoniano mostrado na equação 2.22 avaliado para os spins do conjunto $\{\mathbf{Q}\}$. Portanto, $\mathcal{H}(\{\mathbf{S}\})$ é a energia do estado substrato-monodomínio e $\mathcal{H}(\{\mathbf{S}'\})$ é a energia do estado substrato-multidomínio.

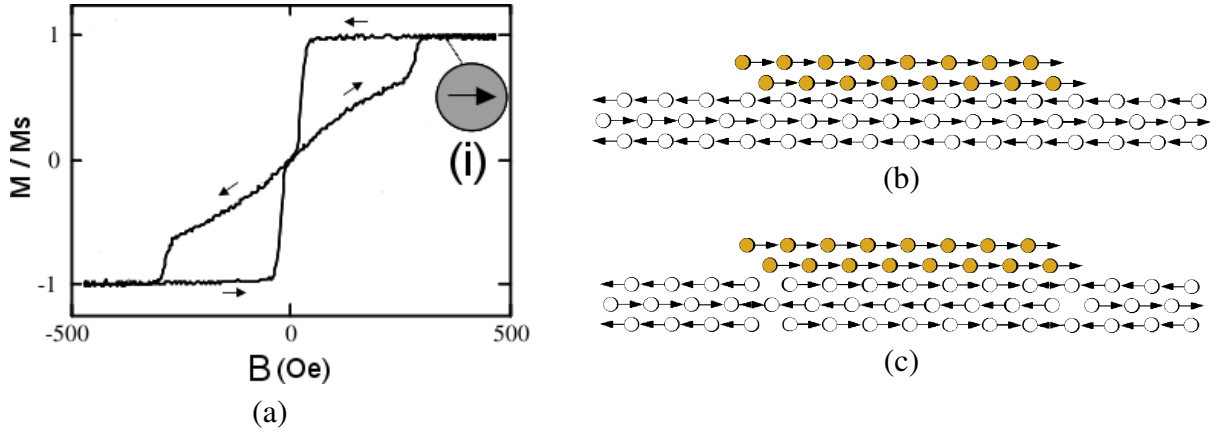


Figura C.1: Em (a) mostramos o ponto de interesse (i) na curva de histerese que usamos para a análise da espessura mínima. Em (b) e (c), mostramos a configuração de spins da nano-partícula e do substrato neste ponto, com um corte no plano- $\hat{x}\hat{z}$ passando pelo centro do nano-disco. Em (b) o substrato apresenta a primeira camada com magnetização no sentido oposto ao da saturação do nano-disco. Em (c) observamos que a região do substrato logo abaixo do nano-disco tem o sentido dos spins invertidos. A configuração de (b) é observada quando a condição de espessura mínima é obedecida e a de (c) caso contrário

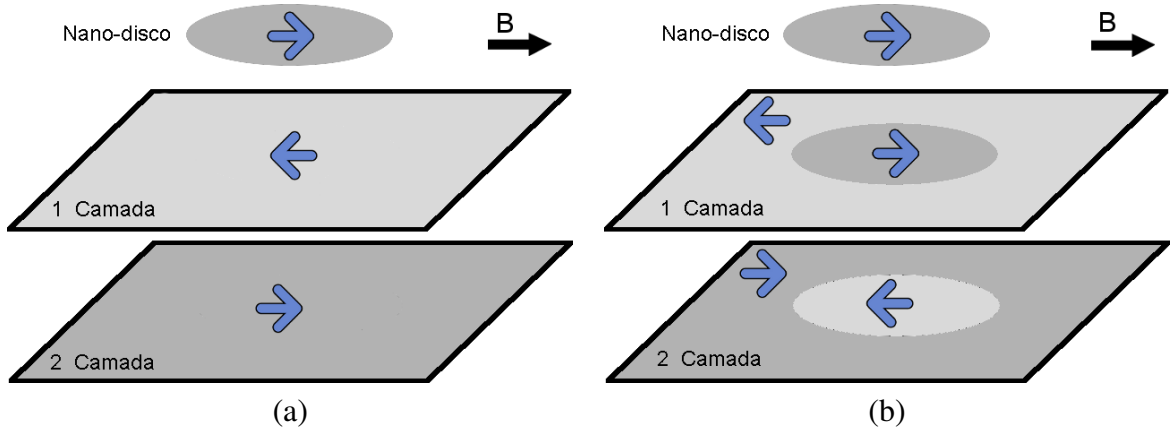


Figura C.2: Esquema da configuração de spins para as duas primeiras camadas atômicas do substrato tipo Ising com campo aplicado $\mathbf{H} = +H_s\hat{x}$. Em (a) mostramos a situação em que o substrato apresenta um monodomínio AFM, chamado de estado substrato-monodomínio. Em (b) observa-se um domínio magnético AFM cilíndrico no substrato, chamado de estado substrato-multidomínio. As demais camadas seguem o mesmo padrão de intercalação. A configuração de spins do nano-disco é representada por apenas uma camada atômica, já que todas as outras são similares.

Como $\{\mathbf{S}\}$ e $\{\mathbf{S}'\}$ diferem apenas pela região cilíndrica no substrato, somente os termos de troca do substrato \mathcal{H}_t^s e da interface \mathcal{H}_t^{d-s} serão distintos nas duas situações citadas, já que o termo de troca para o nano-disco e o termo dipolar dependem somente da configuração da nano-partícula. O termo Zeeman também será idêntico para ambos os estados, pois a inversão no sentido dos spins do substrato não altera a quantidade de spins na direção do campo, lembre-se que estamos considerando L_z^s par.

Assim sendo, podemos escrever que a diferença de energia é

$$\Delta\mathcal{H} = \Delta\mathcal{H}_t^S + \Delta\mathcal{H}_t^{d-s}, \quad (\text{C.2})$$

onde

$$\Delta\mathcal{H}_t^S = \mathcal{H}_t^S(\{\mathbf{S}\}) - \mathcal{H}_t^S(\{\mathbf{S}'\})$$

é a diferença de energia de troca do substrato e

$$\Delta\mathcal{H}_t^{d-s} = \mathcal{H}_t^{d-s}(\{\mathbf{S}\}) - \mathcal{H}_t^{d-s}(\{\mathbf{S}'\})$$

é a diferença de energia de troca da interface.

Diferença de energia de troca do substrato

Para o estado substrato-monodomínio todas os primeiros vizinhos tem sentidos opostos, assim sendo,

$$\mathcal{H}_t^S(\{\mathbf{S}\}) = -J_s N_{lv},$$

onde N_{lv} é o número total de ligações no substrato. Para avaliar $\mathcal{H}_t^S(\{\mathbf{S}'\})$, devemos contabilizar quantos primeiros vizinhos estão alinhados. Vamos chamar esse número de N_{lv_f} . Em seguida, devemos subtrair esse valor de N_{lv} na relação acima e somar a contribuição desses spins no hamiltoniano ($J_s N_{lv_f}$), ou seja,

$$\mathcal{H}_t^S(\{\mathbf{S}'\}) = J_s N_{lv_f} - J_s (N_{lv} - N_{lv_f}).$$

Além disso, podemos somar e subtrair $J_s N_{lv_f}$ da energia de troca do substrato-monodomínio

$$\mathcal{H}_t^S(\{\mathbf{S}\}) = -J_s N_{lv_f} - J_s (N_{lv} - N_{lv_f}).$$

Dessa forma,

$$\Delta\mathcal{H}_t^S = -2J_s N_{lv_f},$$

onde N_{lv_f} é o número de ligações entre os spins que estão dentro da região cilíndrica com os que estão fora. Assim sendo, N_{lv_f} será igual a área lateral do cilindro ($\pi L L_z^s$), vezes a densidade superficial de ligações σ_l , portanto

$$\Delta\mathcal{H}_t^S = -2\pi L L_z^s \sigma_l J_s. \quad (\text{C.3})$$

Diferença de energia de troca da interface

Agora devemos avaliar a diferença de energia de troca na interface. Olhando para o esquema mostrado na figura C.2, vemos que, para o substrato monodomínio, os spins da partícula são opostos aos do substrato. Para o substrato multidomínio, eles estão alinhados. Portanto, podemos afirmar que

$$\mathcal{H}_t^{d-s}(\mathbf{S}) = -\mathcal{H}_t^{d-s}(\mathbf{S}').$$

Dessa forma,

$$\Delta\mathcal{H}_t^{d-s} = -2\mathcal{H}_t^{d-s}(\{\mathbf{S}'\}). \quad (\text{C.4})$$

Por sua vez, $\mathcal{H}_t^{d-s}(\mathbf{S}')$ pode ser obtido contando o número de ligações de primeiros vizinhos na interface. Ou seja, a área da interface $\pi L^2/4$ (área da base da nano-partícula), vezes σ_l ,

$$\mathcal{H}_t^{d-s}(\mathbf{S}') = -\frac{\pi L^2}{4}\sigma_l J_{d-s}. \quad (\text{C.5})$$

Substituindo essa relação na equação C.4, temos que

$$\Delta\mathcal{H}_t^{d-s} = \frac{\pi L^2}{2}\sigma_l J_{d-s} \quad (\text{C.6})$$

Diferença de energia total

Finalmente, substituindo as equações C.3 e C.6 na equação C.2

$$\Delta\mathcal{H} = \frac{\pi L^2}{2}\sigma_l J_{d-s} - 2\pi L L_z^s \sigma_l J_s.$$

A condição de existência do EB é satisfeita quando $\Delta\mathcal{H} < 0$, ou seja, o estado substrato-monodomínimo minimiza a energia. Portanto,

$$\frac{\pi L^2}{2}\sigma_l J_{d-s} - 2\pi L L_z^s \sigma_l J_s < 0.$$

Isolando L_z^s , chegamos na inequação C.1.

APÊNDICE D – Limite para o campo aplicado

Considerando os spins do substrato como do tipo heisenberg clássico e eixo de magnetização fácil, devemos garantir que ele não irá saturar ou passar por uma fase do tipo spin-flop. Essa condição é obedecida se

$$B < \frac{K}{\mu_B g \sigma} \left(1 - \frac{1}{L_z^s}\right), \quad (\text{D.1})$$

onde μ_B é o magneton de Bohr, g é o fator de Landé e K é a rigidez de troca. Por sua vez, a rigidez de troca pode ser escrita como

$$K = \frac{n_{vs} J_s \sigma^2}{a},$$

onde n_{vs} é o número de primeiros vizinhos dos spins do substrato, a é o parâmetro de rede e σ o módulo do spin. Neste trabalho fizemos, $\mu_B = 1$, $g = 1$, $a = 1$ e $\sigma = 1$, portanto,

$$B_{max} = n_{vs} J_s \left(1 - \frac{1}{L_z^s}\right). \quad (\text{D.2})$$

Para a rede CCC $n_{vs} = 8$, portanto,

$$B_{max} = 8 J_s \left(1 - \frac{1}{L_z^s}\right). \quad (\text{D.3})$$

Na figura 2.32 mostramos um diagrama onde observamos as três configurações possíveis para o substrato: antiferromagnético (AFM), spin-flop (SF) e saturado (S), veja figura 2.31. Vamos chamar esses estados de substrato-AF, substrato-SF e substrato-S, respectivamente.

Para mostrar essas relações, vamos considerar o caso em que a primeira camada do substrato tem magnetização no sentido $+\hat{x}$ e aplicamos um campo até saturar o nano-disco no sentido oposto (veja figura D.1 (d)).

Vamos definir $\{\mathcal{S}\}$ como o conjunto dos spins ordenados na configuração do estado substrato-AF (veja figura D.1 (a)) e $\{\mathcal{S}'\}$ o conjunto dos spins ordenados na configuração do estado substrato-S (veja figura D.1 (c)).

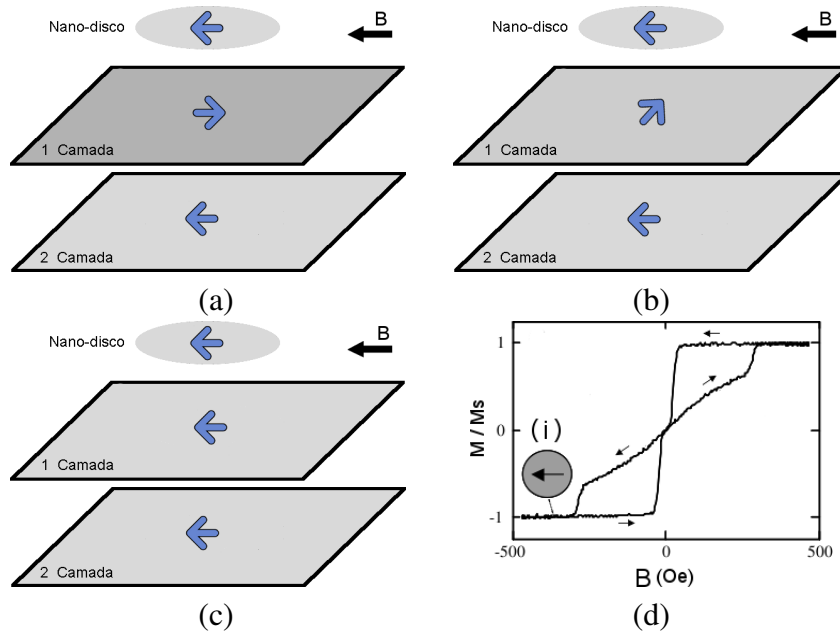


Figura D.1: Esquema da configuração de spins para o substrato tipo Heisenberg, eixo de magnetização fácil, integral de troca ferromagnética na interface e campo de saturação no sentido $-\hat{x}$. Em (a) mostramos o estado com substrato AFM, referente a figura 1.11 (a). Em (b) estado com substrato spin-flop e em (c) estado com substrato saturado.

Avaliando o hamiltoniano do sistema (veja seção D.1), temos que

$$\mathcal{H}(\{\mathbf{S}\}) = \alpha - J_s N_{lv} \sigma^2 + J_{d-s} N_{lv_I} \sigma^2 - AN_s \sigma^2,$$

e

$$\mathcal{H}(\{\mathbf{S}'\}) = \alpha + J_s N_{lv} \sigma^2 - J_{d-s} N_{lv_I} \sigma^2 - AN_s \sigma^2 - g\mu_B B N_s \sigma.$$

onde N_{lv} é o número de ligações entre primeiros vizinhos no substrato, N_{lv_I} o número de ligações entre primeiros vizinhos na interface e N_s o número total de spins do substrato.

Separação entre os estados substrato-AF e substrato-S

Para o substrato não saturar, devemos garantir que $\mathcal{H}(\{\mathbf{S}\}) < \mathcal{H}(\{\mathbf{S}'\})$, portanto

$$\alpha - J_s N_{lv} \sigma^2 + J_{d-s} N_{lv_I} \sigma^2 - AN_s \sigma^2 < \alpha + J_s N_{lv} \sigma^2 - J_{d-s} N_{lv_I} \sigma^2 - AN_s \sigma^2 - g\mu_B B N_s \sigma.$$

Isolando o campo magnético, temos que

$$B < 2 \frac{J_s \sigma^2}{g\mu_B \sigma} \frac{N_{lv}}{N_s} - 2 \frac{J_{d-s} \sigma^2}{g\mu_B \sigma} \frac{N_{lv_I}}{N_s}.$$

Como $N_s = 4L^2L_z^s$ (equação 2.20), $N_{lv} = 2n_{vs}L^2(L_z^s - 1)$ (equação B.5) e $N_{lv_l} = \pi L^2$, e para interação fraca na interface ($J_{d-s} \rightarrow 0$), temos que

$$B < \frac{n_{vs}J_s\sigma^2}{g\mu_B\sigma} \left(1 - \frac{1}{L_z^s}\right)$$

Lembrando que a integral de troca é escrita em unidades de parâmetros de rede, chegamos na equação D.1, i.e.

$$B < \frac{K}{\mu_B g \sigma} \left(1 - \frac{1}{L_z^s}\right),$$

onde

$$K = \frac{n_{vs}J_s\sigma^2}{a}.$$

D.1 Energia dos estados

A configuração de spins para o nano-disco é a mesma para os três casos, portanto, o termo de energia de troca \mathcal{H}_t^d , o termo dipolar \mathcal{H}_d e o termo Zeeman aplicado ao nanodisco \mathcal{H}_z^d , também serão idênticos nos três casos. Assim sendo, podemos definir uma constante

$$\alpha \equiv \mathcal{H}_t^d + \mathcal{H}_d + \mathcal{H}_z^d.$$

Como estamos calculando diferenças de energia, esse termo irá se cancelar. Dessa forma, devemos avaliar somente os termos de energia de troca do substrato, de troca da interface, de anisotropia e o termo Zeeman para os spins do substrato.

Energia do estado substrato-AF

Para o estado substrato-AF, os spins vizinhos estão alinhados em sentidos opostos na direção \hat{x} , portanto,

$$\mathcal{H}_t^s(\{\mathbf{S}\}) = -J_s N_{lv} \sigma^2,$$

onde N_{lv} é o número de ligações entre primeiros vizinhos no substrato,

$$\mathcal{H}_a(\{\mathbf{S}\}) = -AN_s\sigma^2,$$

onde N_s o número total de spins do substrato, e

$$\mathcal{H}_z^s(\{\mathbf{S}\}) = 0$$

Como a primeira camada do substrato tem magnetização oposta à da primeira camada da nanopartícula, temos que

$$\mathcal{H}_I^{d-s}(\{\mathbf{S}\}) = J_{d-s}N_{I_V}\sigma^2,$$

onde N_{I_V} é o número de ligações entre primeiros vizinhos na interface. Dessa forma, podemos escrever o hamiltoniano do sistema (equação 2.19) como

$$\mathcal{H}(\{\mathbf{S}\}) = \alpha - J_sN_{I_V}\sigma^2 + J_{d-s}N_{I_V}\sigma^2 - AN_s\sigma^2$$

Energia do estado substrato-S

Para o estado substrato-S, todos os primeiros vizinhos estão alinhados no sentido do campo magnético ($-\hat{x}$), portanto,

$$\mathcal{H}_I^s(\{\mathbf{S}'\}) = J_sN_{I_V}\sigma^2,$$

onde N_{I_V} é o número de ligações entre primeiros vizinhos no substrato,

$$\mathcal{H}_I^{d-s}(\{\mathbf{S}'\}) = -J_sN_{I_V}\sigma^2,$$

onde N_{I_V} é o número de ligações entre primeiros vizinhos na interface,

$$\mathcal{H}_a(\{\mathbf{S}'\}) = -AN_s\sigma^2,$$

onde N_s o número total de spins do substrato, e

$$\mathcal{H}_Z^S(\{\mathbf{S}'\}) = -g\mu_B BN_s\sigma$$

Dessa forma, podemos escrever o hamiltoniano do sistema (equação 2.19) como

$$\mathcal{H}(\{\mathbf{S}'\}) = \alpha + J_sN_{I_V}\sigma^2 - J_{d-s}N_{I_V}\sigma^2 - AN_s\sigma^2 - BN_s\sigma.$$

D.2 Anisotropia Mínima

Também devemos garantir que o termo de anisotropia gere uma barreira de potencial grande o suficiente para que o termo de troca da interface não tenha força suficiente para inverter a magnetização de sub-rede do substrato. Portanto,

$$\mathcal{H}_a(\{\mathbf{S}\}) < \mathcal{H}_I^{d-s}(\{\mathbf{S}\}),$$

ou seja,

$$-AN_s\sigma^2 < -J_{d-s}N_{I_V}\sigma^2,$$

portanto,

$$A > \frac{J_{d-s} N_{lv_l}}{N_s},$$

Como $N_s = 4L^2 L_z^s$ e $N_{lv_l} = \pi L^2$, temos que

$$A > \frac{\pi J_{d-s}}{4L_z^s}. \quad (\text{D.4})$$

APÊNDICE E – Artigos

E.1 Publicados

J.C.S.Rocha P.Z.Coura S.Leonel R.A.Dias and B.V.Costa. *Diagram for vortex formation in quasi-two-dimensional magnetic dots J. Appl. Phys.*, 107:053903, 2010.

D.Toscano, S.Leonel, R.A.Dias, P.Z.Coura, J.C.S.Rocha and B.V.Costa. *Magnetic vortex formation and gyrotropic mode in nanodisks J. Appl. Phys.*, 109:014301, 2011.

E.2 Aceitos para Publicação

J.C.S.Rocha P.Z.Coura S.Leonel R.A.Dias and B.V.Costa. *Magnetic behavior of a nano-disk constrained in an antiferromagnetic substrate J.M.M.M.*

E.3 Submetidos

J.C.S.Rocha P.Z.Coura S.Leonel R.A.Dias and B.V.Costa. *Shape Effect on Magnetic Behavior of Nanoparticles J. Appl. Phys.*

Referências Bibliográficas

- [1] PAS 71. *Vocabulary - Nanoparticles*. British Standards Institution (BSI), 2005.
- [2] Colin A. Ronan. *História Ilustrada da Ciência da Universidade de Cambridge*. Círculo do Livro, 1983.
- [3] Auterives Maciel Júnior. *Os Pré-Socráticos - A invenção da Razão*. Odysseus, 2003.
- [4] Antonio S.T. Pires. *Evolução das Idéias da Física*. Editora Livraria da Física, 2008.
- [5] B. Heinrich J.A.C. Bland. *Ultrathin Magnetic Structures III - Fundamentals of nanomagnetism*. Springer-Verlag, 1994.
- [6] B. Heinrich J.A.C. Bland. *Ultrathin Magnetic Structures IV - Application of Nanomagnetism*. Springer-Verlag, 1994.
- [7] Soshin Chikazumi. *Physics of Ferromagnetism - International Series of Monographs on Physics*. 94 edition.
- [8] V.Skumryev S.Stoyanov Y.Zhang G.Hadjipanayis D.Givord and J.Nogues. *Nature*, 423:850, 2003.
- [9] B.Van Waeyenberge A.Puzic H.Stoll K.W.Chou T.Tyliszczak R.Hertel M.Fahnle H.Bruckl K.Rott G.Reiss I.Neudecker D.Weiss C.H.Back and G.Schutz. *Nature*, 444:461, 2006.
- [10] D.Atkinson D.A.Allwood G.Xiong M.D.Cooke C.C.Faulkner and R.P.Cowburn. *Nat. Mater.*, 2:85, 2003.
- [11] R.P.Cowburn. *Nature Materials*, 6:255, 2007.
- [12] T. Shinjo T.Okuno R.Hassdorf K.Shigeto and T.Ono. *Science*, 289:930, 2000.
- [13] S.Hikami and T.Tsuneto. *Prog. Theor. Phys.*, 63:387, 1980.
- [14] S.Takeno and S.Homma. *Prog. Theor. Phys.*, 64:1193, 1980.
- [15] G.M. Wysin. *Phys. Rev. B*, 49:8780, 1994.
- [16] J.E.R.Costa and B.V. Costa. *Phys. Rev. B*, 54:994, 1998.
- [17] J.E.R.Costa B.V.Costa and D.P.Landau. *Phys. Rev. B*, 57:11510, 1998.
- [18] C.A.F.Vaz J.A.C.Bland and G.Lauhoff. *Rep. Prog. Phys.*, 71:056501, 2008.
- [19] Alberto P. Guimarães. *Principles of Nanomagnetism*. Springer, 2009.
- [20] R.P.Cowburn. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 33:R1–R16, 2000.

- [21] M.Hosokawa K.Nogi M.Naito T.Yokoyama. *Nanoparticle Technology Handbook*. Elsevier, Amsterdam, 2007.
- [22] J.Nogués J.Sort V.Langlais V.Skumryev S.Suriñach J.S.Muñoz and M.D.Baró. *Physics Reports*, 422:65, 2005.
- [23] Kai Liu J.L.Vicent Ivan K.Schuller J.I.Martín, J.Nogués. *JMMM*, 256:449, 2003.
- [24] K.S.Kim S.C.Yu¹ and K.V.Rao. *J. Appl. Phys.*, 81:4649, 1997.
- [25] Helmut Kronmüller. *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*, volume 2 Micromagnetism. John Wiley and Sons Ltd, 2007.
- [26] H.Kronmüller M.Fähnle. *Micromagnetism and the Microstructure of Ferromagnetic Solids*. Cambridge University Press, 2003.
- [27] N.Pinna S.Grancharov P.Beato P.Bonville M.Antonietti and M.Niederberger. *Chem. Mater.*, 17:3044, 2005.
- [28] C.Stamm F.Marty A.Vaterlaus V.Weich S.Egger U.Maier U.Ramsperger H.Fuhrmann and D.Pescia. *Science*, 282:449, 1998.
- [29] M.Jaafar R.Yanes D.P.Lara O.C.-Fesenko A.Asenjo E.M.Gonzalez J.V.Angueta M.Vazquez and J.L.Vicent. *Phys. Rev. B*, 81:054439, 2010.
- [30] J.Mejía-López¹ D.Altbir A.H.Romero X.Batlle I.V.Roshchin C.P. Li and I.K.Schuller. *J. Appl. Phys.*, 100:104319, 2006.
- [31] S.Y.Chou M.S.Weï P.R.Krauss and P.B.Fischer. *J.Appl.Phys.*, 76:6673, 1994.
- [32] M.Hehn K.Ounadjela J.-P.Bucher F.Rousseaux D.Decanini B.Bartenlian and C.Chappert. *Science*, 272:1782, 1996.
- [33] S.-B. Choe Y.Acremann A.Scholl A.Bauer A.Doran J.Stohr and H.A.Padmöre. *Science*, 304:420, 2004.
- [34] R.P.Cowburn. *JMMM*, 242-245:505, 2002.
- [35] W.H.Meiklejohn and C.P.Bean. *Phys. Rev.*, 102:1413, 1956.
- [36] W.H.Meiklejohn and C.P.Bean. *Phys. Rev.*, 105:904, 1957.
- [37] W.H.Meiklejohn. *J. Appl. Phys.*, 33:1328, 1962.
- [38] Amikam Aharoni. *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*. Clarendon Press - Oxford, 1998.
- [39] Lucas Alvares da Silva Mól. *Transições de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações dipolares*. PhD thesis, UFMG, 2009.
- [40] Julio Cesar Siqueira Rocha. Diagrama de fase do modelo de heisenberg antiferromagnético anisotrópico tri-dimensional. Master's thesis, UFMG, 2007.
- [41] Amikam Aharoni. *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*. Clarendon Press - Oxford, 1998.

- [42] J.J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics, Revised Edition*. Springer-Verlag, 1994.
- [43] B. Heinrich J.A.C. Bland. *Ultrathin Magnetic Structures I - An Introduction to the Electronic, Magnetic and Structural Properties*. Springer-Verlag, 1994.
- [44] Mathias Getzlaff. *Fundamentals of Magnetism*. Springer, 2008.
- [45] John David Jackson. *Classical Electrodynamics, 3rd ed*. John Wiley & Sons Inc, 1998.
- [46] David J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. Prentice-Hall, 1999.
- [47] S.A.Leonel I.A. Marques P.Z.Coura and B.V.Costa. *J. Appl. Phys.*, 102:104311, 2007.
- [48] H.Kachkachi D.A.Garanin. *Surface Effects in Magnetic Nanoparticles*. Springer, 2005.
- [49] N.Metropolis A.Rosenbluth M.Rosenbluth A.Teller and E.Teller. *J. Chem. Phys.*, 21:1087, 1953.
- [50] S.Kirkpatrick C.D.Gellat Jr. M.P. Vecchi. *Science*, 220:671, 1983.
- [51] David P. Landau and Kurt Binder. *A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2000.
- [52] S.Kirkpatrick C.D.Gellat Jr. M.P. Vecchi. *Jour. Mag. Mag. Mat.*, 212:23, 1999.
- [53] L.A.S.Mól and B.V. Costa. *Phys. Rev. B*, 79:054404, 2009.
- [54] J.C.S.Rocha P.Z.Coura S.Leonel R.A.Dias and B.V.Costa. *J. Appl. Phys.*, 107:053903, 2010.
- [55] D.Toscano S.A.Leonel R.A.Dias P.Z.Coura J.C.S.Rocha and B.V.Costa. *J. Appl. Phys.*, 109:014301, 2011.
- [56] J.A.C. Bland D.L. Mills. *Nanomagnetism: Ultrathin Films, Multilayers and Nanostructures*. Elsevier, 2006.
- [57] A. Hubert W. Rave, K. Fabian. *JMMM*, 190:332, 1998.
- [58] Anderson Barbosa Lima. *Simulação de Monte Carlo e percolação no modelo XY completamente frustrado*. PhD thesis, UFMG, 2005.
- [59] Marcella Rapini Braga. *Estudo de filmes magnéticos ultrafinos pelo método de monte carlo*. Master's thesis, UFMG, 2006.
- [60] X. Chen M. H. Qin and J. M. Liu. *Phys. Rev. B*, 80:224415, 2009.
- [61] J. W. Negele D. H. Lee, J. D. Joannopoulos and D. P. Landau. *Phys. Rev. B*, 33:450, 1986.