

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

José Henrique Silva

**Estudo via Simulação Computacional do Efeito de Impurezas
no Modo Girotrópico em Nanodisco Magnético**

Juiz de Fora
Novembro, 2011

José Henrique Silva

Estudo via Simulação Computacional do Efeito de Impurezas no Modo Girotrópico em Nanodisco Magnético

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre.

Orientador: Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel

Juiz de Fora

Novembro, 2011

Silva, José Henrique

Estudo via Simulação Computacional do Efeito de Impurezas no Modo Girotrópico em Nanodisco Magnético / José Henrique Silva. – 2011.

Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, 2011.

José Henrique Silva

Estudo via Simulação Computacional do Efeito de Impurezas no Modo Girotrópico em Nanodisco Magnético

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre.

Aprovada em 9 de Novembro de 2011.

Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel
Orientador

Prof. Dr. Fernando Sato
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Winder Alexander de Moura Melo
Universidade Federal de Viçosa

Dedico este trabalho a Deus, aos meus pais José e Celina, ao meu irmão Geraldo, a minha namorada Andréia e amigos que de muitas formas me incentivaram e ajudaram para que fosse possível a concretização deste trabalho.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todas as pessoas do meu convívio que acreditaram e contribuíram, mesmo que indiretamente, para a conclusão do Mestrado,

Aos meus pais José e Celina, a pessoa que sou hoje, quase tudo devo a vocês, obrigado por tudo,

Aos meus irmãos, Carlos, Maria Rita, Rozimara (*in memoriam*) e em especial o Geraldo, pelo incentivo e por toda ajuda prestada,

A minha namorada Andréia Carvalho, pelo amor, carinho, paciência ao longo dos últimos seis anos e por compreender a importância dessa conquista.

Ao meu orientador Dr. Sidiney de Andrade Leonel, pelo empenho, paciência e credibilidade, obrigado por tudo.

Aos amigos da faculdade, alguns mais próximos, outros nem tanto, mas que de alguma forma contribuíram para que eu chegasse até aqui. Em especial ao Danilo, Vanessa, Evandro e José Amâncio, muito obrigado.

Aos professores da banca, Dr. Fernando Sato e Dr. Winder Alexander de Moura Melo, por aceitarem participar da minha banca.

À CAPES, pelo auxílio financeiro, e a UFJF pelo espaço físico.

A todos meu carinho e muito obrigado.

Este é o nosso mundo:
O que é demais nunca é o bastante
E a primeira vez é sempre a última chance.
Ninguém vê onde chegamos:
Os assassinos estão livres, nós não estamos.

Vamos sair - mas não temos mais dinheiro
Os meus amigos todos estão procurando emprego
Voltamos a viver como há dez anos atrás
E a cada hora que passa
Envelhecemos dez semanas.

Renato Russo

RESUMO

Nos últimos anos, o estudo do comportamento da magnetização em nanodiscos magnéticos tem atraído à atenção de muitos pesquisadores da área de nanomagnetismo. Devido a possibilidade dos nanodiscos apresentarem um estado de magnetização em forma de vórtice com componente fora-do-plano no seu centro, estes podem ser os possíveis substitutos dos dispositivos de armazenamento magnético utilizados atualmente. Para que os nanodiscos possam ser utilizados para fins de armazenamento, precisa-se conhecer com detalhes o comportamento do vórtice em diversas situações. Em trabalho recente verificou-se experimentalmente que a frequência do modo girotrópico na presença de impureza é maior que a frequência caso não houvesse impureza no nanodisco e que a frequência diminui com o aumento do diâmetro. No presente trabalho estudamos o comportamento do modo girotrópico, quando colocamos a impureza numa distância, em relação ao centro do nanodisco, menor que o raio do Modo Girotrópico e também quando colocamos a impureza numa distância maior que o raio do modo girotrópico. A impureza magnética é definida a partir da constante de acoplamento J da interação de troca entre Spin-Spin. Se a constante de acoplamento J' da interação entre impureza-Spin vizinho for maior que J ($J' > J$), temos uma impureza repulsiva e para $J' < J$ a impureza é atrativa. Para estudar a influência de impurezas na frequência do modo girotrópico foram feitas simulações micromagnéticas em nanodiscos magnéticos usando valores conhecidos das constantes do Permalloy-79. Foram feitas simulações em nanodiscos com diversos diâmetros ($125nm$, $145nm$, $175nm$, $195nm$, $225nm$ e $275nm$), todos com $10nm$ de espessura. Nossos resultados mostram que existe uma flutuação na frequência do modo girotrópico na presença de impurezas magnéticas, o que está de acordo com resultados experimentais recentes.

Palavras-chave: Nanodiscos magnéticos, Simulação micromagnética, Modo girotrópico, Impurezas atrativas e repulsivas.

ABSTRACT

In recent years, to study the behavior of magnetization in magnetic nanodisks has attracted the attention of many researchers in nanomagnetism. Due to the possibility of nanodisks to present a state of magnetization with vortex-shaped component out-of-plane at its center, this can substitute the magnetic storage devices used today. For nanodisks that can be used for storage purposes, one needs to know in detail the behavior of the vortex in many situations. In a recent study, it was experimentally found that the frequency of the gyrotropic mode in the presence of impurities is greater than the frequency, if there were no impurity in nanodisks, so that the frequency decreases with increasing the diameter. In this paper we study the behavior of gyrotropic mode when we place the impurity at a distance from the center of the nanodisks, smaller than the gyrotropic radius mode and also when the impurity placed at a distance greater than the radius of the gyrotropic mode. The magnetic impurity is defined as the coupling constant J of the exchange interaction between the Spin-Spin interaction. If the coupling constant J' from the interaction between impurity-neighbor spin is greater than J ($J' > J$), we have a repulsive impurity and if $J' < J$ the impurity is attractive. To study the influence of impurities in the gyrotropic frequency mode, micromagnetic simulations were made in magnetic nanodisks using known values of constants of the Permalloy-79. Nanodisks simulations were made with different diameters ($125nm$, $145nm$, $175nm$, $195nm$, $225nm$ and $275nm$), all of with $10nm$ thick. Our results show that there is a fluctuation in the gyrotropic frequency mode in the presence of magnetic impurities, which is in agreement with recent experimental results.

Keywords: magnetic nanodisks, micromagnetic simulation, gyrotropic mode, attractive and repulsive impurities.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	(a) Uma micrografia eletrônica por transmissão de alta resolução mostrando a microestrutura de filme fino de cobalto-cromo-platina que é usado como meio de armazenamento magnético de alta densidade. A seta na parte superior da figura indica a direção do movimento do meio. Ampliação de 500.000×. (b) Uma representação da estrutura dos grãos da micrografia eletrônica mostrada em (a); as setas em alguns grãos indicam a textura ou a direção de magnetização. Figura retirada da referência [5].	17
Figura 1.2	Configurações de magnetização possíveis para materiais na nano escala na forma de disco.	18
Figura 1.3	Representação do estado de vórtice em um nanodisco com diâmetro 175nm e espessura 10nm.	19
Figura 1.4	Representação do núcleo do vórtice em cada tipo de superfície.	19
Figura 1.5	(a) Micrografia MFM de três discos de Permalloy com diferentes polaridades. (b) Sinal de MFM ao longo da linha tracejada em (a). Resultado da Microscopia de Força Magnética em três discos de Permalloy. Figura retirada da referência [7].	20
Figura 1.6	Representação Microscopia de Lorentz. Figura retirada da referência [7, 8].	21
Figura 1.7	As quatro combinações da polaridade com a quiralidade. Figura retirada da referência [9].	21
Figura 1.8	Comparação da energia total do nanodisco para as possíveis combinações da polaridade e quiralidade.	22
Figura 1.9	Representação do centro do vórtice (a) campo magnético aplicado $\vec{B}^{ext} < 0$, negativo; (b) campo magnético aplicado $\vec{B}^{ext} = 0$; (c) campo magnético aplicado $\vec{B}^{ext} > 0$, positivo	23
Figura 1.10	(a) Formação de monodomínio único com campo magnético aplicado negativo ($\vec{B}^{ext} < 0$) ; (b) Formação de monodomínio único com campo magnético aplicado positivo ($\vec{B}^{ext} > 0$). Figura retirada da referência [11].	23
Figura 1.11	A curva de histerese do nanodisco com diâmetro 200nm e espessura 10nm na presença de um campo magnético aplicado (\vec{B}^{ext}). As configurações a,b,c na curva de histerese estão	

	representado na figura 1.9. Figura retirada da referência [13].	24
Figura 2.1	Momento angular \vec{L} e momento de dipolo magnético \vec{m}_i do elétron na órbita de Borh.	27
Figura 2.2	Interação spin-órbita entre os momentos angulares \vec{L} e \vec{S} . Figura retirada da referência [17].	29
Figura 2.3	Spin orientados na direção do campo magnético externo. Figura retirada da referência [18].	30
Figura 2.4	Interação dipolar entre átomos	34
Figura 3.1	Modelo de uma célula da rede FCC.	47
Figura 3.2	Representação da nova célula da rede. Figura retirada da referência [24]	49
Figura 4.1	Representação de uma pequena parte do nanodisco com impureza magnética. O spin 13 representa a impureza do nanodisco.	57
Figura 4.2	Comportamento da energia de interação (E_{int}/J) entre o núcleo do vórtice e a impureza magnética em função da distância relativa (r/a) entre eles. Figura retirado da referência [32].	58
Figura 4.3	Representação do estado fundamental de um nanodisco com diâmetro de $145nm$ e impureza magnética (ponto preto) com constante de acoplamento $J' = 0,5J$	60
Figura 4.4	Representação do estado fundamental de um nanodisco com diâmetro de $145nm$ e impureza magnética (ponto preto) com constante de acoplamento $J' = 1,5J$	60
Figura 5.1	Configuração final de equilíbrio para um nanodisco com diâmetro $75nm$ e espessura $10nm$	62
Figura 5.2	O gráfico da energia total (fJ) do nanodisco para cada tipo de configuração inicial.	62
Figura 5.3	Configuração final de equilíbrio para um nanodisco com diâmetro $175nm$ e $10nm$ de espessura, para configuração inicial tipo aleatória e vórtice planar	64
Figura 5.4	O gráfico da energia total (fJ) do nanodisco para cada tipo de configuração inicial.	64
Figura 5.5	Representações das forças que atuam no núcleo do vórtice	66
Figura 5.6	Representação da trajetória do núcleo do vórtice	68
Figura 5.7	Representação da trajetória do núcleo do vórtice na camada mais externa, quando o modo girotrópico é excitado com campo externo $5mT$	71
Figura 5.8	Representação da trajetória do núcleo do vórtice na camada mais externa, quando o modo girotrópico é excitado com campo externo $5mT$	71
Figura 5.9	Representação do comportamento da média da magnetização no plano $m_x m_y$, quando o modo	

girotrópico é excitado com campo externo $5mT$.	73
Figura 5.10 Posições do núcleo do vórtice nas direções x e y em função do tempo em nanodiscos com $d = 225nm$.	73
Figura 5.11 No quadro acima temos a magnetização x e y no tempo em um nanodiscos com $d = 225nm$. Na outra parte, a frequência calculada usando a transformada de Fourier.	74
Figura 5.12 Gráfico da frequência do modo girotrópico em função do diâmetro do nanodisco de Permalloy-79 com espessura de $10 [nm]$.	75
Figura 6.1 Resultado da simulação em nanodisco com diâmetro $d = 225nm$ e espessura $10nm$ na presença de impureza magnética.	77
Figura 6.2 Comportamento da magnetização na direção x (M_x) em função do tempo. Resultado da simulação de nanodisco com diâmetro $d = 225nm$ na presença de impureza magnéticas.	79
Figura 6.3 Frequência dos modos girotrópicos na presença de impurezas com $J' = 0.7J$, $J' = J$ (puro), $J' = 1.3J$ e $J' = 1.5J$.	80
Figura 6.4 Comportamento da frequência em função do diâmetro do nanodisco com espessura constante de $10nm$	80
Figura 6.5 Resultado da comparação de um resultado experimental com uma simulação micromagnética, mostrando que a variação da frequência independe do diâmetro do disco. Figura retirado da referência [47].	81
Figura 6.6 Comportamento da frequência em função do diâmetro do nanodisco com espessura constante de $10nm$	82
Figura 6.7 Resultado da simulação em nanodisco com espessura $10nm$ na presença de impureza magnética com $J' > J$.	83
Figura 6.8 Resultado da simulação em nanodisco com espessura $10nm$ na presença de impureza magnética com $J' < J$.	84
Figura 6.9 Transformada de Fourier da trajetória do vórtice com diferentes impurezas magnéticas e diâmetro $d = 175nm$.	84
Figura 6.10 Comportamento da frequência do modo girotrópico para diferentes diâmetros e com impureza magnética $J' = 0,7J$.	85
Figura 6.11 Comportamento da frequência do modo girotrópico para diferentes diâmetros e com impureza magnética $J' = 1,5J$.	86

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Valores de susceptibilidade magnética χ_m e permeabilidade magnética relativa κ_m para algumas substâncias [18].	31
Tabela 4.1	Valores da energia de interação para cada constante de acoplamento J' com o núcleo do vórtice no centro do nanodisco, resultados retirados da referência [32].	59
Tabela 5.1	Tabela com os resultados das simulações em nanodisco com espessura $10nm$	74

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	História da Nanotecnologia	15
1.2	Aplicações Tecnológicas	16
1.2.1	Armazenamento Magnético	16
1.2.2	Nanodiscos Magnéticos	17
1.2.3	Curva de Histerese	23
2	MODELO TEÓRICO	26
2.1	Propriedades dos Materiais Magnéticos	26
2.1.1	Momento Magnético e Dipolo Magnético	26
2.1.2	Magnetização	29
2.1.3	Susceptibilidade Magnética	31
2.2	Modelo de Heisenberg	31
2.2.1	Interação de Troca	32
2.2.1.1	Anisotropia	33
2.2.2	Interação Dipolar	34
2.2.3	Interação Zeeman	36
2.3	Campo Efetivo em Cada Sítio	36
2.4	Evolução Temporal da Magnetização	39
3	MODELO COMPUTACIONAL PARA UM NANODISCO MAGNÉTICO	41
3.1	Dinâmica de Spins	41

3.2	O Limite Clássico	45
3.3	Estimativa do Número Total de Spins num Sistema Real	46
3.4	Simulação Micromagnética	47
3.5	Integração da Equação de Movimento	53
3.5.1	Método de Runge Kutta de Ordem 4	53
3.5.2	Método Preditor-corretor de Ordem 4	55
4	O MODELO DE IMPUREZA MAGNÉTICA	56
4.1	O Modelo de Impureza	56
4.2	Interação do Vórtice com uma Impureza Magnética	59
5	MODO GIROTRÓPICO	61
5.1	Formação do Vórtice	61
5.2	Dinâmica de Vórtices e Modo Girotrópico	64
5.2.1	Movimento do Núcleo do Vórtice (Modo Girotrópico)	69
6	INFLUÊNCIA DE IMPUREZAS MAGNÉTICAS NO MODO GIROTRÓPICO	76
6.1	Modo Girotrópico com Impureza Magnética	76
6.1.1	Impureza Magnética numa Posição $r_{imp} < r_{modo}$	77
6.1.2	Impureza Magnética numa Posição $r_{imp} > r_{modo}$	82
7	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	87
	APÊNDICE A -	89
A.1	Regras de Quantização	89
A.2	Operadores de Spin	90
	APÊNDICE B -	92
B.1	Conservação do módulo de \hat{m}_i	92

REFERÊNCIAS	94
--------------------------	-----------

1 INTRODUÇÃO

O magnetismo é uma parte da Física que, através de suas aplicações, fascina a todas as pessoas. Qual a criança que não fica maravilhada brincando com ímãs que se atraem ou se repelem dependendo de suas posições relativas, por meio de forças misteriosas que atravessam materiais? As vezes procurava alto falante velho com o técnico em eletrônica, para retirar os ímãs, para realizar brincadeiras de mover outros materiais. O mesmo, que é o fenômeno pelo qual os materiais impõem uma força ou influência de atração ou de repulsão sobre outros materiais, é conhecido há milhares de anos. Entretanto, os princípios e os mecanismos que estão por trás e que explicam o fenômeno magnético são complexos e sutis, e o seu entendimento iludiu os cientistas até tempos relativamente recentes. O primeiro estudo mais científico e menos místico sobre o magnetismo, foi escrito por Gilbert (1544 – 1600) com a publicação de "*De Magnete*", que é considerado o "*pai do magnetismo*" e nessa mesma época Galileu Galilei já desenvolvia os primeiros estudos sistemáticos do movimento uniformemente acelerado e do movimento do pêndulo. A partir daí estabelece a "*Nova Ciência*". Porém, os estudos do magnetismo só seriam realizados mais tarde, por Gauss, Coulomb, Faraday e Maxwell. Neste período surge a lei da indução criada por Faraday e o mais marcante é que escreveu a lei da indução, sem nunca escrever uma equação sequer!. Anos depois, Maxwell se propôs a elaborar uma teoria matemática para as descobertas de Faraday e, assim, conseguiu unificar matematicamente a eletricidade, o magnetismo e a óptica, mostrando que a luz é uma vibração do campo eletromagnético se propagando no espaço. No final do século XIX a eletrodinâmica era perfeitamente compreendida e já tinham inúmeras aplicações tecnológicas, das quais o motor e o gerador elétrico eram as mais importantes [1].

Com o surgimento da Mecânica Quântica, ainda no início do século XX, começa a ficar claro que fenômenos magnéticos têm, em última instância, explicação quântica. Com isso a antiga mecânica quântica explicou a origem dos momentos magnéticos atômicos com o modelo de Bohr que estabeleceu a unidade fundamental do momento magnético, o magneton de Bohr¹. Pouco depois com a descoberta do spin em 1922, surge a moderna mecânica quântica, onde

¹ $\mu_B = e\hbar/m_e$

se explica o que acontecia no interior de um material magnético. É neste período que surge a teoria do ferromagnetismo.

Na década de 1940 W. F. Brown publicou dois trabalhos pioneiros sobre a teoria do micromagnetismo de materiais ferromagnéticos. Nos anos 50 é estabelecida a teoria do micromagnetismo como uma ferramenta para compreender as propriedades e características do processo de magnetização e a curva de histerese [2]. O ferro, alguns aços e o mineral magnetita, de ocorrência natural, são exemplos bem conhecidos de materiais que exibem propriedades magnéticas. Sabemos que todas as substâncias citadas são influenciadas em maior ou menor grau, pela presença de um campo magnético. Anos depois, surge a teoria do nanomagnetismo, onde englobam os estudos das propriedades e aplicações do magnetismo de nanopartículas isoladas, nanofios, filmes finos e multicamadas.

1.1 História da Nanotecnologia

O termo "nanotecnologia" surgiu em uma conferência do físico Richard Feynman. Nessa conferência foi apresentada uma ideia de que poderíamos mover os átomos e ligá-los da maneira que quiséssemos. A nanotecnologia refere-se à tecnologia utilizada para manipular estruturas muito pequenas, geralmente entre 0,1 e 100 nanômetros. A partir disso Feynman imaginou um futuro com micro e nanomáquinas. Depois dessa conferência diversos pesquisadores começaram os estudos e experimentos com estrutura nano, mas esse avanço necessitava de novas técnicas e equipamentos para a fabricação de estrutura nano. Com isso novos trabalhos sobre a fabricação de materiais na escala nano foram surgindo e possíveis aplicações.

Nos anos 80 foi apresentado o microscópio de microsondas eletrônicas de varredura. Com esse microscópio era possível visualizar uma superfície na escala nano e manipular átomos. No início as nanoestruturas eram feitas por acaso, mas atualmente os novos nano-materiais são criados através do uso de métodos físicos e químicos, permitindo que uma determinada estrutura tenha uma propriedade especial através da manipulação de moléculas e átomos. A nanotecnologia pode ser aplicada em diversas áreas: A Física é a ciência que tem um papel muito importante, sendo a responsável pela elaboração de leis que explicam a física quântica que rege o nano universo. No campo da Biologia, os biólogos realizam inúmeros estudos com processos biológicos para tratamento de patologias através do nano transportes de drogas. Na Engenharia, os engenheiros são os responsáveis pelo desenvolvimento das nanomáquinas. Na

área da Ciência da Computação, são realizadas simulações para elaborar modelos e verificar se os resultados experimentais estão de acordo com a teoria nano.

A pesquisa com materiais magnéticos ganhou um grande impulso nos últimos quinze anos. O interesse em sistemas magnéticos com dimensões reduzidas tem sido estimulado pela rápida evolução das diversas técnicas de microfabricação. Essas nanoestruturas produzidas artificialmente podem ser modeladas em várias formas geométricas diferentes, tais como, cadeias de partículas finas, nanofios retangulares e cilíndricos, nanodiscos, nanotubos, nanoanéis, dentre outras. Por conta das aplicações dessas estruturas artificiais em equipamentos eletrônicos é agora um dos campos mais importantes do ponto de vista de aplicação tecnológica.

1.2 Aplicações Tecnológicas

A exploração de propriedades na escala nano, possibilitou um aumento na capacidade de armazenamento de dados, contribuiu com novas técnicas para exames médicos, onde houve uma melhor precisão no diagnóstico de doenças e redução no tamanho dos aparelhos eletrônicos. Existem milhares de aplicações, mas nesse trabalho, vamos direcionar nossa idéia na aplicação de nanodisco magnético em possíveis equipamentos de armazenamentos de dados do tipo: MRAM (*magnetic random access memory*) ou Disco Rígido [3].

1.2.1 Armazenamento Magnético

Ao longo dos últimos anos, os materiais magnéticos se tornaram cada vez mais importantes na área de armazenamento de informações; de fato, o arquivamento magnético se tornou virtualmente a tecnologia universal para o armazenamento de informações eletrônicas. Isso fica evidenciado pela preponderância das fitas de áudio, discos rígidos de computadores, cartões de créditos, etc. Enquanto nos computadores os elementos semicondutores servem como a memória principal, os discos magnéticos são usados como memórias secundárias. Além disso, as indústrias de gravação e de televisão dependem em larga escala das fitas magnéticas para armazenamento e reprodução de sequências de áudio e vídeo.

Essencialmente, os *bytes* de computador, o som ou as imagens são gravados em segmen-

tos muito pequenos do meio de armazenamento magnético - uma fita ou um disco. Sabemos que a tecnologia de armazenamento em filme fino é relativamente nova e proporciona maiores capacidades de armazenamento a menores custos. Ela é empregada principalmente em drives de disco rígido e consiste em uma estrutura em múltiplas camadas. Uma camada magnética na forma de filme fino é o verdadeiro componente de armazenamento [4].

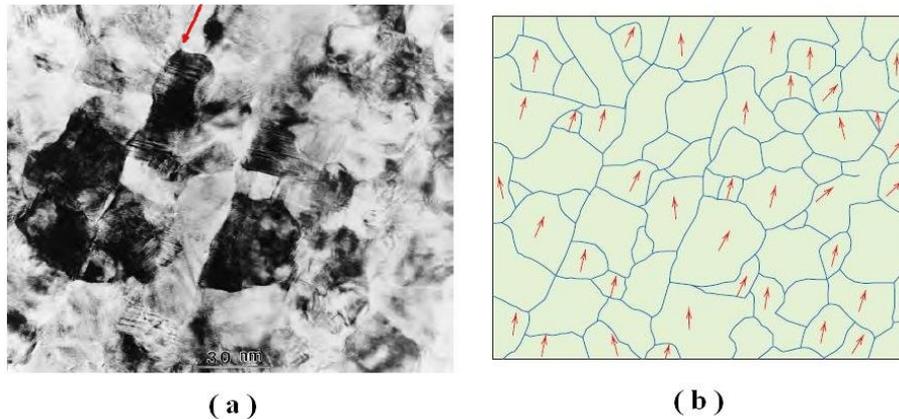


Figura 1.1: (a) Uma micrografia eletrônica por transmissão de alta resolução mostrando a microestrutura de filme fino de cobalto-cromo-platina que é usado como meio de armazenamento magnético de alta densidade. A seta na parte superior da figura indica a direção do movimento do meio. Ampliação de $500.000\times$. (b) Uma representação da estrutura dos grãos da micrografia eletrônica mostrada em (a); as setas em alguns grãos indicam a textura ou a direção de magnetização. Figura retirada da referência [5].

O filme fino, com espessura entre 10 e 50nm , é policristalino, tendo um tamanho médio de grão tipicamente entre 10 e 30nm . Cada grão dentro do filme fino é um único domínio magnético (ver figura 1.1). Sendo altamente desejável que a forma e o tamanho dos grãos sejam relativamente uniformes. Nos discos de armazenamento magnético que empregam esses filmes finos, a direção cristalográfica de fácil magnetização para cada grão está alinhada na direção do movimento do disco (ou na direção oposta).

1.2.2 Nanodiscos Magnéticos

Os nanodiscos magnéticos tem dimensões, largura d (Diâmetro) e espessura l , com dezenas de nanômetros. Uma característica do nanodisco magnético que o diferencia das outras nanoestruturas é a relação entre o diâmetro e a espessura, onde $d \gg l$. Os nanodiscos podem apresentar diversas configurações de magnetização que dependem dos valores das dimensões, classificadas em: um único domínio (monodomínio), o estado de vórtice e vários domínios (multidomínio). A figura 1.2 mostra de forma esquemática as configurações dos nanodiscos

com as variações dos diâmetros e espessura constante. Nosso trabalho é baseado em nanodiscos magnéticos feito com ligas de níquel e ferro ($\text{Ni}_{79}\text{Fe}_{21}$) conhecidas como Permalloy-79 (Py-79).

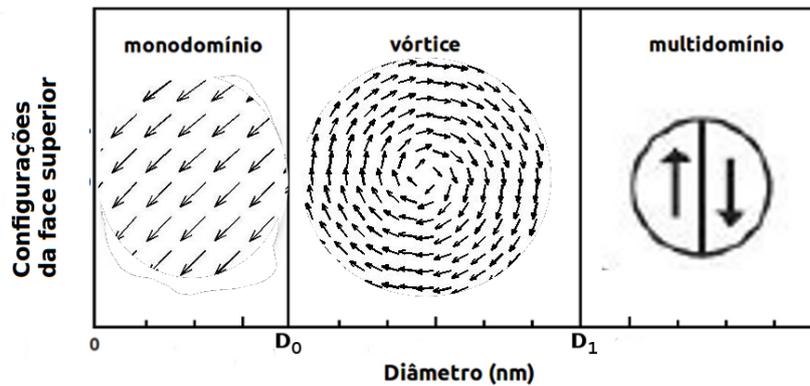
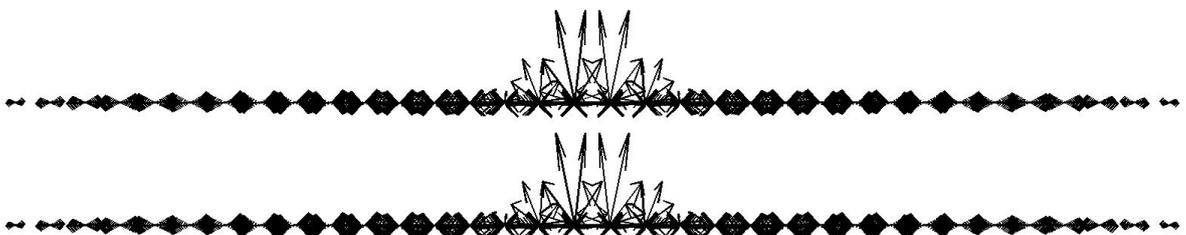


Figura 1.2: Configurações de magnetização possíveis para materiais na nano escala na forma de disco.

Um nanodisco com configuração de domínio único não tem a formação de paredes de domínios, isso acontece para nanodisco com diâmetro menores que D_0 ($\simeq 100 \text{ nm}$) como mostra a figura 1.2. Neste caso o estado fundamental do sistema é conhecido como configuração cebola. Essa configuração é o resultado da competição entre as interações de troca e magnetostática.

No caso de diâmetros maiores que D_0 e menores que $D_1 \simeq 100 \text{ nm}$ (ver figura 1.2) existe uma outra configuração magnética na qual os momentos magnéticos se arranjam em círculos concêntricos que é chamada de vórtice. Na região central, denominada núcleo do vórtice, os momentos magnéticos apresentam um ângulo diferente de zero em relação ao plano que passa pelos sítios e tornam-se cada vez maiores quando aproximamos do centro do núcleo vórtice. Essa mudança no ângulo é a responsável pelo aumento da energia de troca, com isso para minimizar a energia local os momentos começam a apontar para fora do plano. Além disso, percebemos que longe do núcleo do vórtice os momentos magnéticos ficam no plano da superfície do nanodisco (ver figura 1.3).



(a) Nanodisco com duas camadas, visto de lado.

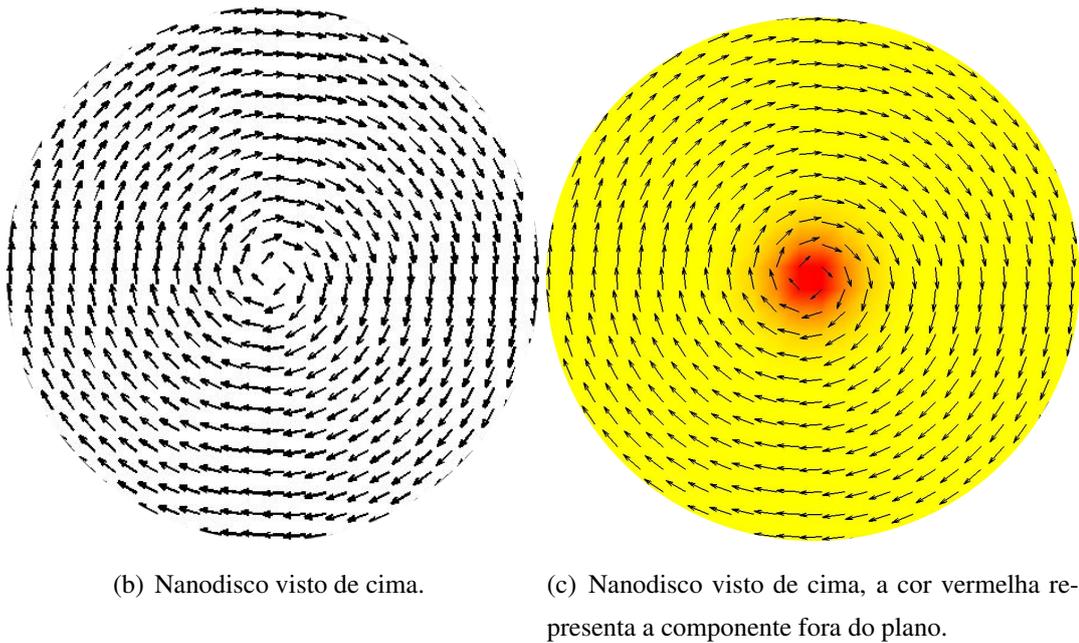


Figura 1.3: Representação do estado de vórtice em um nanodisco com diâmetro 175nm e espessura 10nm .

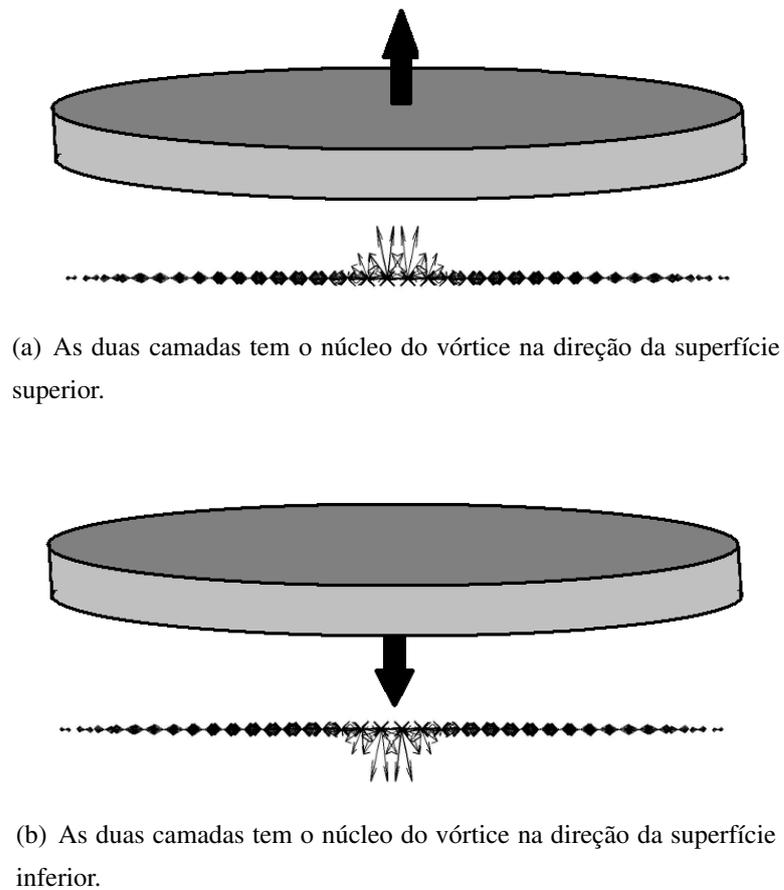


Figura 1.4: Representação do núcleo do vórtice em cada tipo de superfície.

A direção que os momentos magnéticos no centro do vórtice apontam, definem sua **polari-**

dade. A polaridade do vórtice pode ser para cima ($p = +1$, positivo) ou para baixo ($p = -1$, negativa), sempre perpendicular ao plano do nanodisco (ver figura 1.4). A polaridade pode ser observada utilizando técnica mais sofisticada de alta resolução espacial como a Microscopia de Força Magnética (MFM) [6, 7]. Esta técnica é derivada da microscopia de força atômica. Na MFM a ponteira é coberta com uma camada ferromagnética e previamente magnetizada. A imagem obtida é o resultado da interação da ponteira com a superfície magnética da amostra, como mostra a figura 1.5.

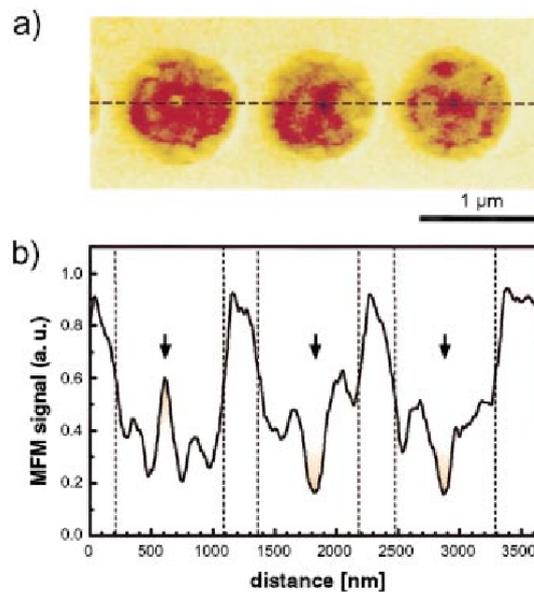
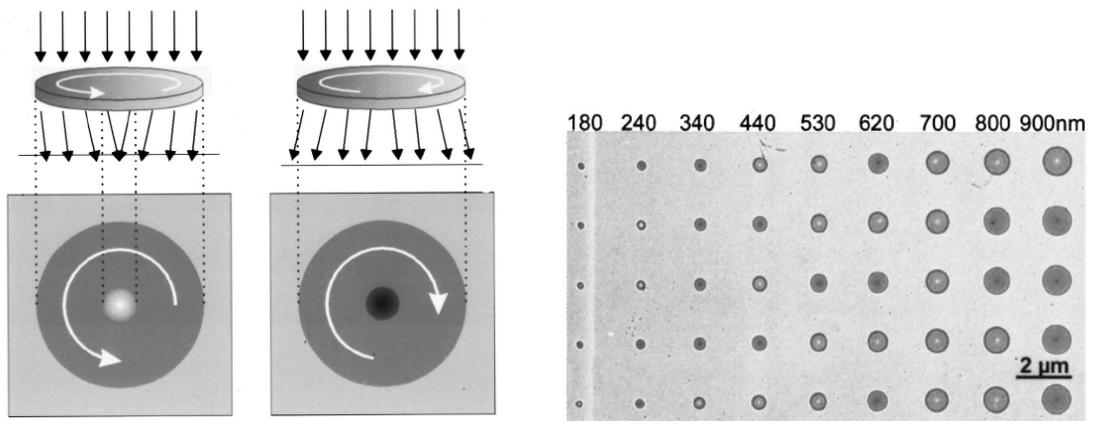


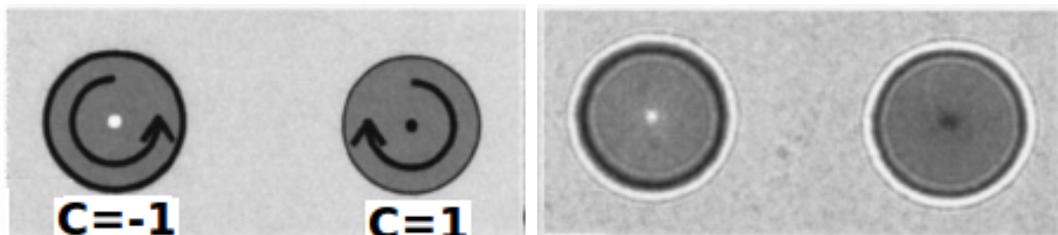
Figura 1.5: (a) Micrografia MFM de três discos de Permalloy com diferentes polaridades. (b) Sinal de MFM ao longo da linha tracejada em (a). Resultado da Microscopia de Força Magnética em três discos de Permalloy. Figura retirada da referência [7].

Sabe-se que a configuração de vórtice exibe um fluxo fechado da magnetização que é conhecida como **quiralidade**, podendo assumir dois sentido de circulação, horária ($c = 1$, positivo) ou anti-horária ($c = -1$, negativa). A quiralidade é observada experimentalmente pela Microscopia eletrônica de foto-emissão (PEEM - "photoemission electron microscopy") [7] ou pela Microscopia de Lorentz (L.M. - "Lorentz microscopy") [8]. No segundo caso o disco magnético é atravessado por um feixe de elétrons num microscópio eletrônico (ver a figura 1.6(a)), os momentos magnéticos do disco causam uma deflexão no feixe incidente via força de Lorentz. A figura 1.6 mostra micrografias de nanodiscos de Py [7, 8].



(a) Representação esquemática da deflexão sofrida por um feixe eletrônico ao atravessar um nanodisco no estado de vórtice.

(b) Imagens Fresnel de nanodiscos de diâmetro entre 180 - 900 nm.



(c) O sentido da rotação da magnetização deflete os elétrons incidentes para o centro do disco (ou para longe dele), conduzindo a um ponto claro (ou escuro) no centro do disco.

(d) Imagem Fresnel ampliada.

Figura 1.6: Representação Microscopia de Lorentz. Figura retirada da referência [7, 8].

Logo, escolhendo uma estrutura de spin tridimensional e o vórtice fora do plano do nanodisco, temos quatro possibilidades de combinar a quiralidade e a polaridade, como mostra a figura 1.7.

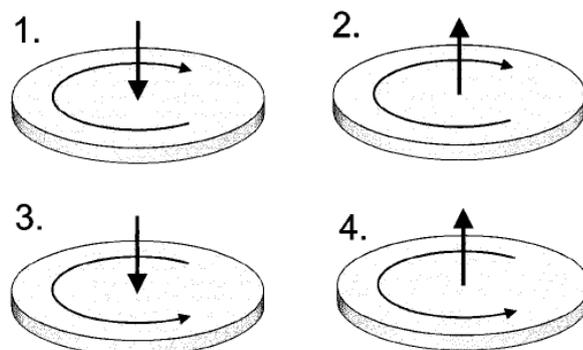


Figura 1.7: As quatro combinações da polaridade com a quiralidade. Figura retirada da referência [9].

Percebe-se que o estado de vórtice é quadruplamente degenerado. A figura 1.8 mostra a evolução temporal da energia total das quatro combinações da polaridade \mathbf{p} com a quiralidade \mathbf{c} . Percebemos que a energia total no final do processo de equilíbrio é a mesma para qualquer configuração inicial do nanodisco magnético no estado de vórtice. Esse resultado é importante para a escolha da configuração inicial do nanodisco a ser simulado em nosso trabalho. Neste caso, qualquer uma das configurações pode ser utilizada como configuração inicial, pois todas as quatro têm a mesma energia no estado de equilíbrio.

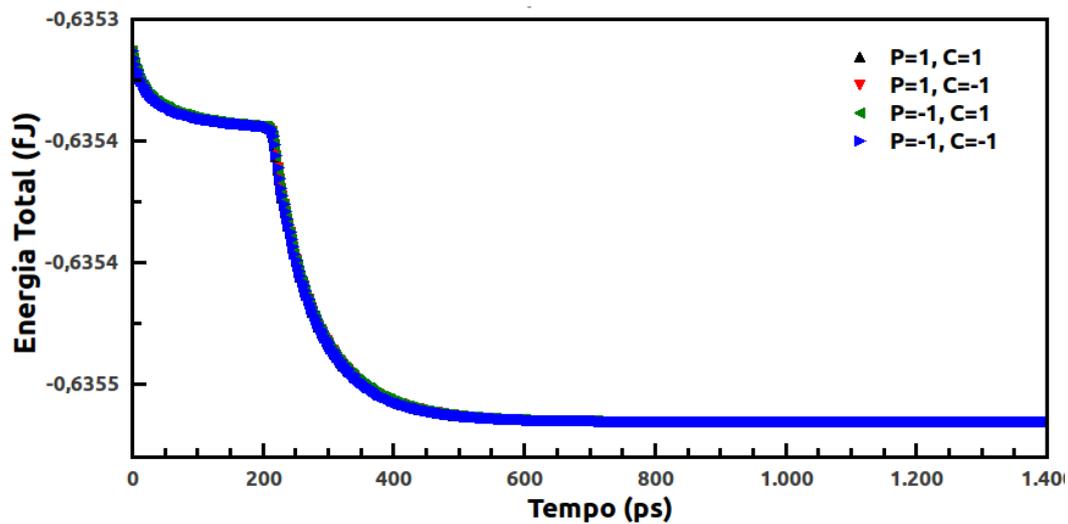


Figura 1.8: Comparação da energia total do nanodisco para as possíveis combinações da polaridade e quiralidade.

De modo geral, a compreensão das propriedades do estado de vórtice tem grande importância para aplicações tecnológicas, onde podemos utilizar a degenerescência para armazenar 2 bits de informações em um nanodisco, sendo 1 bit referente a polaridade e o outro a quiralidade. Estudos mostram que é possível alterar a quiralidade mantendo a polaridade constante, ou vice-versa. Este mecanismo é conhecido como *switching* (reversão da magnetização ou da direção de rotação). O entendimento do *switching* pode ser aplicado na gravação magnética em memória feita com nanodisco. Essa possível aplicação permitirá uma redução nos equipamentos de armazenamentos de dados atuais. Já existem propostas para a nova memória magnética de ultra alta densidade, conhecida como VRAM ("memória de Acesso aleatório de vórtice") [10].

1.2.3 Curva de Histerese

A variação da magnetização (\vec{M}) de um material em função do campo magnético aplicado (\vec{B}^{ext}) denomina-se curva ou ciclo de histerese. Quando um campo magnético variável é aplicado no nanodisco com anisotropia planar, este tende a atingir uma magnetização de saturação (\vec{M}_s); um campo magnético estático \vec{B}^{ext} , aplicado no plano do nanodisco no estado de vórtice faz o centro do vórtice mover ao longo de uma trajetória radial perpendicular ao campo \vec{B}^{ext} . Esse resultado é mostrado na figura 1.9 para $\vec{B}^{ext} < 0$, $\vec{B}^{ext} = 0$ e $\vec{B}^{ext} > 0$.

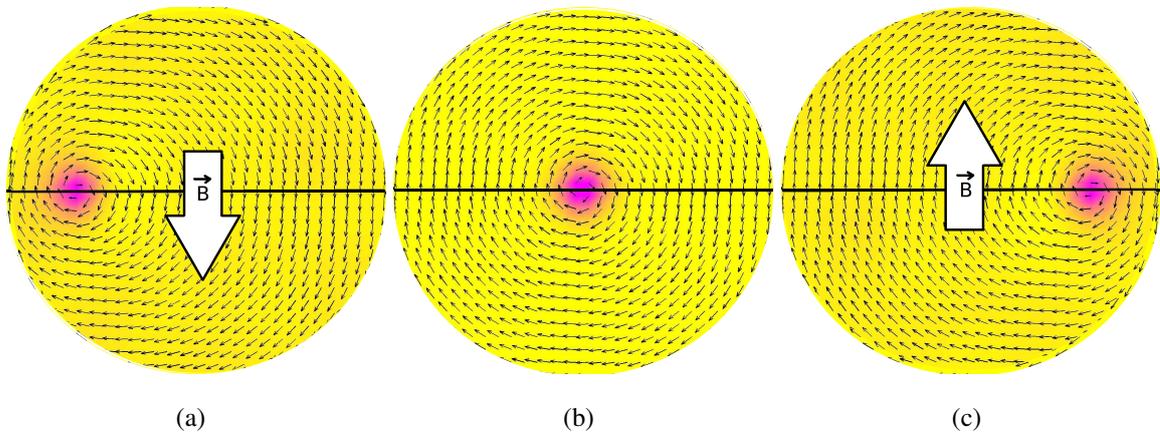


Figura 1.9: Representação do centro do vórtice (a) campo magnético aplicado $\vec{B}^{ext} < 0$, negativo; (b) campo magnético aplicado $\vec{B}^{ext} = 0$; (c) campo magnético aplicado $\vec{B}^{ext} > 0$, positivo .

Com o aumento da intensidade do campo magnético \vec{B}^{ext} , o centro do vórtice é forçado a sair do nanodisco, a configuração de domínio único será alcançada atingindo assim a magnetização de saturação (\vec{M}_s), como mostra a figura (1.10).

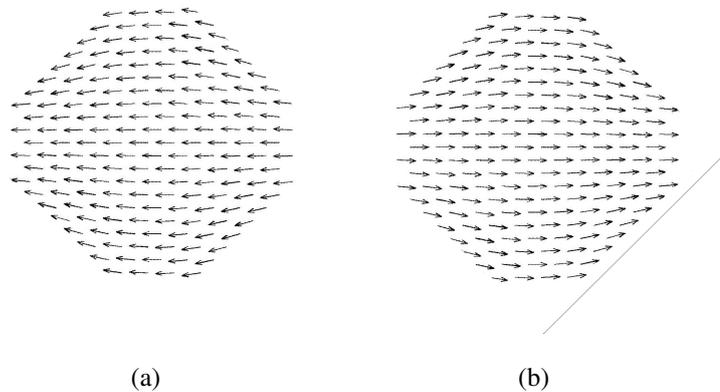


Figura 1.10: (a) Formação de monodomínio único com campo magnético aplicado negativo ($\vec{B}^{ext} < 0$) ; (b) Formação de monodomínio único com campo magnético aplicado positivo ($\vec{B}^{ext} > 0$). Figura retirada da referência [11].

Quando aplicamos um campo externo no sentido mostrado na figura 1.9(a), aumentamos lentamente o valor até que o nanodisco atinja a magnetização de saturação e em seguida diminuímos o mesmo até zero. Assim encontramos dois caminhos diferentes para a razão da magnetização do nanodisco pela magnetização de saturação, que pode ser visto na figura 1.11 no terceiro quadrante. O mesmo acontece quando aplicamos um campo no sentido mostrado na figura 1.9(c) que pode ser visto no primeiro quadrante da figura 1.11. A união desse caminho da razão da magnetização é conhecido como ciclo de histerese. o sentido do ciclo de histerese é representado pelas setas na figura 1.11

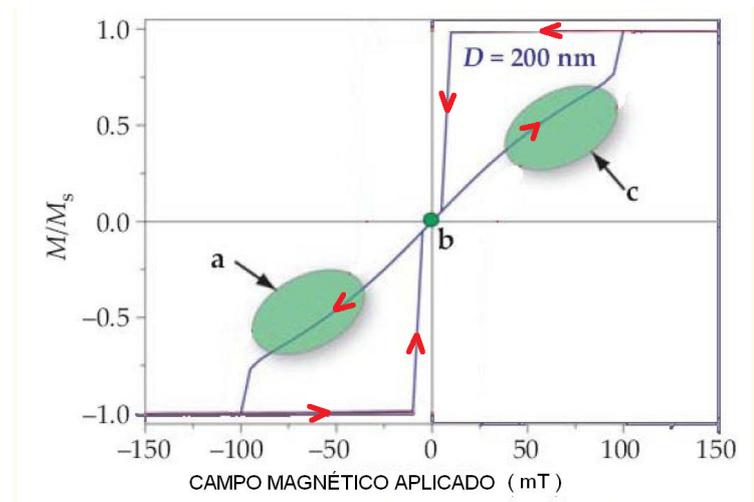


Figura 1.11: A curva de histerese do nanodisco com diâmetro 200nm e espessura 10nm na presença de um campo magnético aplicado (\vec{B}^{ext}). As configurações a,b,c na curva de histerese estão representado na figura 1.9. Figura retirada da referência [13].

O comportamento do núcleo do vórtice planar na presença de campo externo aplicado é diferente do vórtice com componente fora do plano. O movimento do núcleo no primeiro caso é dado na direção perpendicular do campo externo. Mas isso não acontece quando o núcleo tem uma componente fora do plano do disco. Após a aplicação de um campo externo, o núcleo do vórtice precessa em torno de sua posição de equilíbrio para um pulso de campo ou precessa em torno de sua nova posição de equilíbrio para um campo constante. O sentido de rotação do núcleo do vórtice é definido pela polaridade do vórtice. Esse movimento é conhecido como **modo girotrópico** [14, 15] que será objeto de estudo neste trabalho.

Na literatura, encontramos trabalhos recentes que estudam as propriedades do modo girotrópico e com isso tentam controlar o "switching", ou seja, o sistema pode assumir qualquer uma das configurações da quadrupla degenerescência, mediante alguma perturbação. Nesta dissertação, vamos estudar a geração do **modo girotrópico** em nanodiscos, verificar como a frequência natural do modo girotrópico varia com o diâmetro do nanodisco e observar a frequência do modo na presença de impureza. Tal impureza é propositalmente inserida próxima

da trajetória do vórtice. Muitos trabalhos de simulações de nanomagnetos utilizam o simulador micromagnético (OOMMF), mas aqui, optamos por um programa desenvolvido pela equipe do Laboratório de Simulação Computacional do Departamento de Física UFJF, escrito em linguagem Fortran 90. Foram utilizados parâmetros reais do Permalloy-79 para as simulações dos nanodiscos magnéticos.

No capítulo 2 será apresentado de forma resumida um estudo sobre as propriedades dos materiais magnéticos, modelo de Heisenberg com termo dipolar e campo efetivo local em cada sítio da rede.

No capítulo 3 faremos uma exposição do programa utilizado na simulação e como obter o modelo micromagnético partindo do modelo teórico.

No capítulo 4 apresentaremos o modelo de Impureza Magnética e suas propriedades [16].

No capítulo 5 apresentamos as propriedades do modo girotrópico e os resultados das simulações para o modo girotrópico na ausência de impureza magnética.

O capítulo 6 apresentará os resultados e as discussões obtidas através da simulação micromagnética da influência de impurezas magnéticas no modo girotrópico.

Por fim, o capítulo 7 será dedicado às conclusões e perspectivas futuras.

2 MODELO TEÓRICO

Neste capítulo, vamos resumir alguns conceitos básicos de magnetismo e o modelo de Heisenberg. Depois uma curta caracterização dos diferentes tipos de magnetismo. No final, veremos que as propriedades dos materiais magnéticos são, a princípio, completamente especificadas pela Mecânica Quântica.

2.1 Propriedades dos Materiais Magnéticos

2.1.1 Momento Magnético e Dipolo Magnético

No eletromagnetismo clássico, o momento magnético m_i pode ser explicado usando movimento circular de um elétron. Considere um elétron de carga $-e$, massa m e velocidade v , numa órbita de Borh circular de raio r . O elétron circulante gera uma corrente elétrica i , dada por

$$i = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r} \quad (2.1.1)$$

onde T é o período de revolução e $v = 2\pi r/T$. Essa corrente circulante gera um campo magnético \vec{B} , o que equivale a um campo gerado por um dipolo magnético localizado no centro da órbita e orientado perpendicularmente ao plano da circunferência.

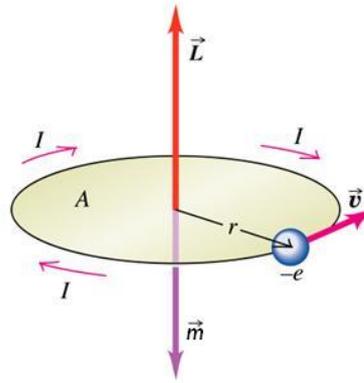


Figura 2.1: Momento angular \vec{L} e momento de dipolo magnético \vec{m}_i do elétron na órbita de Borh.

O dipolo magnético é equivalente a um momento magnético de uma corrente circulante no limite de pequena área, dado por

$$d\vec{m}_i = I.d\vec{A} \quad (2.1.2)$$

A direção do vetor área é dado pela regra da mão direita. Integrando a eq.(2.1.2), onde $A_T = \pi r^2$ (área total da circunferência), o módulo do momento de dipolo magnético orbital m_i , será dado por

$$m_i = IA = I\pi r^2 \quad (2.1.3)$$

A direção é perpendicular ao plano da circunferência. Como o elétron tem uma carga negativa, seu momento de dipolo magnético \vec{m}_i é antiparalelo a seu momento angular orbital

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

O módulo de \vec{L} será:

$$L = rp = mvr \quad (2.1.4)$$

As direções do momento angular e do momento de dipolo podem ser vistas na fig.(2.1). Substituindo as eqs. (2.1.1),(2.1.4) em (2.1.3), obtemos a seguinte equação:

$$m_i = i\pi r^2 = \frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{e}{2m} mvr = \frac{e}{2m} L \quad (2.1.5)$$

ou, na forma vetorial

$$\vec{m}_i = -\frac{e}{2m} \vec{L} \quad (2.1.6)$$

O importante é que o momento magnético é proporcional ao momento angular. Nesse caso, porque a carga foi tomada como negativa, os dois vetores se opõem. Se tomássemos uma carga

positiva, ambos os vetores teriam o mesmo sentido.

O fato da razão $|\vec{m}_i|/|\vec{L}|$ não depender dos detalhes da órbita, sugere que seu valor independe da mecânica usada para determiná-lo. Podemos determinar m_i utilizando a equação do momento angular quântico:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad (2.1.7)$$

onde L é o momento angular quântico, l^1 é o número quântico azimutal de momento angular, que pode ter como valores possíveis os números inteiros de 0 a $(n-1)$ e \hbar^2 é a constante de Planck normalizada.

A partir disso, conclui-se que a expressão quântica para eq.(2.1.5), pode ser escrita como

$$m_i = \frac{e}{2m} \sqrt{l(l+1)}\hbar = \frac{\mu_B}{\hbar} \sqrt{l(l+1)}\hbar = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$$

$$m_i = \frac{\mu_B}{\hbar} L \quad (2.1.8)$$

onde μ_B^3 é o magnéton de Bohr. Até agora consideramos apenas o movimento orbital do elétron.

Vamos inserir outro tipo de momento angular, sabendo que

$$S = m_s \hbar \quad (2.1.9)$$

onde S é chamado momento angular de *spin* e m_s^4 é o número quântico de spin.

Logo a eq.(2.1.6) pode ser reescrita como,

$$\vec{m}_i = -\frac{e}{2m} \vec{J} \quad (2.1.10)$$

Neste caso \vec{J} é a soma dos momentos angulares ($\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$). Na Figura 2.2 percebemos que em geral a direção \vec{J} é diferente da direção de \vec{L} ou \vec{S} , onde \vec{J} depende da combinação de \vec{L} e \vec{S} .

¹ $l = 0, 1, \dots, n-1$

² $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34} [J.s]$

³ $\mu_B = e\hbar/2m = 9,274 \times 10^{-24} [J/T] = 5,788 \times 10^{-5} [eV/T]$

⁴ $m_s = +1/2$ ou $-1/2$

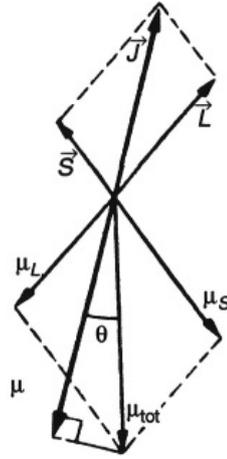


Figura 2.2: Interação spin-órbita entre os momentos angulares \vec{L} e \vec{S} . Figura retirada da referência [17].

A forma geral da eq.(2.1.8) é dado por

$$\vec{m}_i = g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{J} \quad (2.1.11)$$

onde g [adimensional] é denominado fator de Landé e definido pela regra de Hund [17]

$$g_j = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (2.1.12)$$

Apenas um número relativamente pequeno de elementos podem apresentar átomos ou íons com momento angular total não nulo e, conseqüentemente, um momento magnético atômico total diferente de zero. Os exemplos mais conhecidos são os elementos do grupo do ferro, como o cromo (Cr), o manganês (Mn), o próprio ferro (Fe), o cobalto (Co), e o níquel (Ni). Quando compostos atômicos ou íons apresentam momentos magnéticos da ordem de μ_B é chamado de material magnético.

2.1.2 Magnetização

Como foi dito acima, seja \vec{m}_i o momento magnético do átomo de índice i . A magnetização \vec{M} é uma quantidade vetorial macroscópica, podemos definir como soma de todos os momentos magnéticos num pequeno elemento de volume Δv e, então, dividiremos o resultado por Δv ; a quantidade resultante,

$$\vec{M} = \lim_{\Delta v \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta v} \sum_i \vec{m}_i \quad (2.1.13)$$

é denominada momento de dipolo magnético por unidade de volume, ou Magnetização. Com estas definições podemos chegar a relação entre \vec{j}_m e $\vec{M}(\vec{r})$ dada por:

$$\vec{j}_m = \nabla \times \vec{M}(\vec{r}) \quad (2.1.14)$$

Quando um campo magnético externo está desligado, a orientação dos dipolos intrínsecos é completamente aleatória por causa da agitação térmica. Quando ligamos o campo magnético externo, os dipolos tendem a se orientar de uma forma que minimiza a energia de interação, que é dada pela energia potencial magnética do dipolo (U)

$$U = -\vec{m}_i \cdot \vec{B}^{ext} \quad (2.1.15)$$

Assim, vemos que, para minimizar a energia de interação, os momentos magnéticos devem ficar paralelos ao campo externo (ver Figura 2.3).

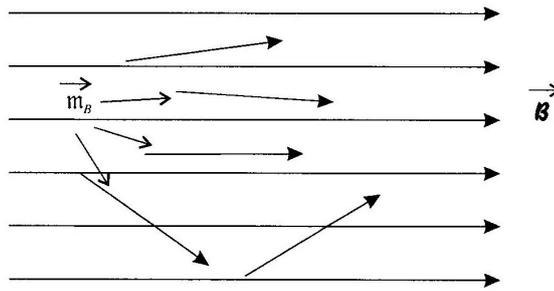


Figura 2.3: Spin orientados na direção do campo magnético externo. Figura retirada da referência [18].

Logo, o campo magnético dentro da amostra de material magnético é maior do que o campo externo, a esse fenômeno chamamos *Paramagnetismo*. No *Diamagnetismo* ocorre o contrário, onde o campo da amostra é menor.

Na eletrodinâmica, definimos um campo auxiliar \vec{H} , para obter uma nova equação com a mesma estrutura da equação Maxwell, dada por

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} (\vec{B} - \mu_0 \vec{M}) \quad (2.1.16)$$

onde $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} [N/A^2]$ é a permeabilidade magnética do vácuo.

Reescrevendo o campo magnético induzido no material em termo de \vec{H} e \vec{M} , temos

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}) \Rightarrow \text{vetor indução magnética} \quad (2.1.17)$$

2.1.3 Susceptibilidade Magnética

Se a magnetização \vec{M} é paralela a um campo magnético externo \vec{H} , podemos escrever

$$\vec{M} = \chi_m \vec{B}^{ext}, \quad (2.1.18)$$

com χ_m sendo a susceptibilidade magnética do material.

Essa relação vale para meios lineares e isotrópicos. Para os materiais diamagnéticos, $\chi_m < 0$, de modo que o campo magnético efetivo, seja menor. Quando o material é paramagnético, $\chi_m > 0$, de forma que o campo magnético efetivo, seja maior do que o campo externo. Nos dois casos, a susceptibilidade é, em geral, muito pequena, isto é, $|\chi_m| \ll 1$. Os materiais ferromagnéticos, em geral não são lineares, χ_m pode ser bastante grande.

A razão entre as permeabilidades magnéticas é chamada de permeabilidade magnética relativa κ_m , é

$$\kappa_m = \frac{\mu}{\mu_0}, \quad (2.1.19)$$

de modo que

$$\chi_m = \kappa - 1 \quad \text{ou} \quad \kappa = \chi_m + 1. \quad (2.1.20)$$

Na tabela 2.1 são apresentados alguns valores de χ_m e κ_m .

Material	χ_m	$\kappa_m (= \frac{\mu}{\mu_0})$
Vácuo	0	1
Alumínio	$1,67 \times 10^{-6}$	1,00000167
Magnésio	$9,55 \times 10^{-7}$	1,000000955
Titânio	$1,43 \times 10^{-5}$	1,0000143
Ferro (recozido)	~ 5500	5500
Permalloy	~ 50000	50000

Tabela 2.1: Valores de susceptibilidade magnética χ_m e permeabilidade magnética relativa κ_m para algumas substâncias [18].

2.2 Modelo de Heisenberg

A origem dos fenômenos magnéticos está na interação entre elétrons, ou mais exatamente, entre os spins de elétrons. A forma como os spins interagem determina o comportamento mag-

nético do material. Quem primeiro chamou atenção da energia de troca para explicar a ordem magnética nos materiais foi *Werner Heisenberg*, em 1928.

O *Modelo de Heisenberg* explica bem o ordenamento ferro e antiferro próximo do estado fundamental, ou seja, ocorrem apenas abaixo de uma temperatura crítica T_c . A maioria dos magnetos exibe comportamento paramagnético em altas temperaturas, mas à medida que a temperatura diminui, os spins começam a se alinhar paralela ou antiparalelamente, dependendo do sinal de J_{ij} , que é denominada constante de acoplamento entre spins da rede ou integral de troca.

2.2.1 Interação de Troca

A interação de troca entre dois elétrons localizados em sítios distintos da rede leva a uma expressão do tipo

$$J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j,$$

onde \vec{S}_i é o operador de spin no sítio i e J_{ij} é a constante de acoplamento entre sítios.

A interação de troca é a responsável pelo estabelecimento da ordem magnética dos materiais magnéticos. Ela é um resultado de um efeito quântico, sem análogo clássico, devido à indistinção dos elétrons. A representação do Hamiltoniano de troca do material é definido pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H^{exc} = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.2.1)$$

onde \vec{S}_i possui dimensão de momento angular e J_{ij} possui dimensão de energia.

Em redes com simetria cúbica, é comum utilizar a aproximação de primeiros vizinhos,

$$J_{ij} = J_{ji} = \begin{cases} J, & i, j \text{ vizinhos} \\ 0, & \text{outros casos.} \end{cases}$$

O Hamiltoniano de troca, então, se escreve:

$$H^{exc} = -\frac{J}{\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (2.2.2)$$

Usaremos o símbolo $\langle i, j \rangle$ para designar pares de vizinhos próximos. O Hamiltoniano de troca depende apenas da orientação relativa entre os spins. Para evitar a dupla contagem da

interação ij , igual a ji , vamos inserir na equação (2.2.2) um fator $1/2$.

$$H^{exc} = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -\frac{J}{2\hbar^2 \gamma^2} \sum_{\langle ij \rangle} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j, \quad (2.2.3)$$

sendo

$$\vec{m} = \gamma \vec{S} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \vec{S},$$

onde γ é a razão giromagnética e g é o fator de Landé.

Note que materiais ferromagnéticos são explicados, quando $J > 0$ favorece um alinhamento paralelos dos spins; quando $J < 0$ favorece um alinhamento antiparalelo dos spins, que é conhecido como antiferromagnético. Lembrando que o spin pode ter magnitude $s = 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$. A rede formada pelos sítios em que os spins estão localizados podem ser consideradas como a cadeia linear ($1D$), as redes quadradas ($2D$) e cúbicas ($3D$)[19].

2.2.1.1 Anisotropia

A energia de uma amostra magneticamente ordenada depende da direção dos eixos estruturais. No caso mais simples, o sistema tem um eixo ao longo do qual a energia é mínima. A anisotropia magnética pode ser de origem cristalina, ou devido à forma da amostra, ou induzida por campo externo, etc [11].

Neste trabalho estamos interessados em um modelo que descreva bem materiais isotrópicos, pois o Permalloy não apresenta anisotropia, ou seja, sem direções preferenciais para onde os spins devam apontar. O Modelo de Heisenberg Isotrópico explica o Ferromagnetismo ($J > 0$) que é caracterizado por uma magnetização espontânea, onde os spins não tem uma direção preferencial, lembrando que não existe aplicação de um campo magnético externo. Em $T = 0K$ todos os momentos magnéticos estão alinhados em paralelo, que é causada pela interação de troca. Em alguns matérias magnéticos moles, tais como Permalloy e amostras de Ni e Co, a anisotropia magnetocristalina, é desprezível e assim, nestes materiais, as possíveis configurações surgem devido à competição entre as energias de troca e magnetostática [20].

2.2.2 Interação Dipolar

A interação dipolar magnética básica é uma interação de origem clássica e é regida pela equação:

$$H^{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi r_{12}^3} \left[\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2 - \frac{3}{r_{12}^2} (\vec{m}_1 \cdot \vec{r}_{12})(\vec{m}_2 \cdot \vec{r}_{12}) \right] \quad (2.2.4)$$

onde \vec{m}_1 e \vec{m}_2 representam o dipolo magnético da partícula 1, 2 respectivamente e \vec{r}_{12} é a distância entre os dipolos magnéticos (ver Figura 2.4).

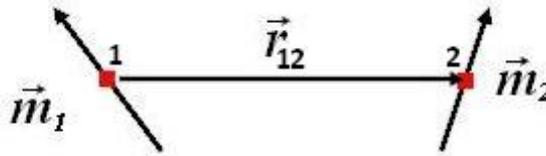


Figura 2.4: Interação dipolar entre átomos

Estamos interessados nos efeitos das interações entre vários dipolos magnéticos. Neste caso, podemos trocar o 2 por um índice 3 no qual teríamos a interação dipolar entre os dipolos 1 e 3, fazendo o mesmo para todos os dipolos, teríamos a interação do dipolo 1 com todos eles, dado por

$$H^{dip} = \sum_j^{N-1} \frac{\mu_0}{4\pi r_{1j}^3} \left[\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{1j}^2} (\vec{m}_1 \cdot \vec{r}_{1j})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{1j}) \right] \quad (2.2.5)$$

o somatório vai até (N-1), por que não contamos a interação do dipolo 1 com 1. Considerando que existe a interação do dipolo 1 com 1, sabemos que $r_{11} = 0$, neste caso a equação seria indeterminada, pois não existe zero no denominador.

Agora vamos generalizar a equação da interação dipolar para qualquer dipolo do sistema, onde i indica a posição \vec{r}_i do dipolo na rede, temos

$$H_i^{dip} = \sum_j^{N-1} \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right] \quad (2.2.6)$$

A energia devida a interação dipolar no sistema é a soma de todas H_i^{dip} , logo

$$H^{dip} = \sum_i^N \sum_j^{N-1} \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right] \quad (2.2.7)$$

Para resolver o problema de dupla contagem, vamos incluir um fator $1/2$ na eq.(2.2.7), logo

$$H^{dip} = \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right] \quad (2.2.8)$$

ou

$$H^{dip} = \frac{\mu_0}{8\pi} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right] \quad (2.2.9)$$

Sabemos que todas as distâncias relativas entre sítios podem ser escritas em termos do parâmetro de rede a_0 . Assim, reescreve-se a equação (2.2.9) como

$$H^{dip} = \frac{\mu_0}{8\pi} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right] \cdot \frac{a_0^3}{a_0^3}$$

$$H^{dip} = \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{a_0^3}{r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^2} (\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij}) \right] \quad (2.2.10)$$

Lembrando da definição de versor, onde

$$\hat{r}_{ij} = \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{\vec{r}_{ij}}{|r_{ij}|} \quad (2.2.11)$$

Podemos reescrever a equação 2.2.10 da seguinte forma:

$$H^{dip} = \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{a_0^3}{r_{ij}^3} [\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]$$

$$H^{dip} = \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \quad (2.2.12)$$

O primeiro termo da dipolar tende alinhar todos os spins paralelos uns aos outros, por causa da existência do produto escalar entre os momentos magnéticos. Enquanto que o segundo termo da dipolar tende alinhar todos os momentos magnéticos na direção que os unem. Percebemos que o segundo termo é o responsável pela minimização da energia dipolar. Com isso, os momentos magnéticos tenderão a ficar paralelos às bordas do nanodisco. Essa interação é de longo alcance, por que depende da distância relativa entre momentos e do somatório que é realizado sobre todos os momentos magnéticos do nanodisco. Observa-se um decaimento da interação com o inverso do cubo da distância entre os sítios.

O termo da interação dipolar é o responsável pela configuração dos momentos magnéticos na borda do nanodisco, esse termo é conhecido como anisotropia de forma.

2.2.3 Interação Zeeman

A interação do momento magnético com o campo magnético externo é conhecido como interação Zeeman. O Hamiltoniano Zeeman, representa o acoplamento do momento magnético com o campo magnético externo \vec{B}^{ext} . Tal Hamiltoniano é dado simplesmente por:

$$H^{ext} = - \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{B}^{ext} = - \sum_{i=1}^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}^{ext} \quad (2.2.13)$$

Este Hamiltoniano será a causa do alinhamento paralelo da magnetização com o campo externo para minimizar a energia [21]. A configuração de mínimo de energia ocorre quando o momento \vec{m} e o campo \vec{B}^{ext} estão paralelos e o máximo de energia quando estão anti-paralelos.

2.3 Campo Efetivo em Cada Sítio

Como foi visto na seção 2.2.1.1, as possíveis configurações surgem devido à competição entre as energias de troca e magnetostática [20]. Os momentos magnéticos tendem alinhar paralelamente a um campo externo para minimizar a energia do sistema. Para um nanodisco de Permalloy, não existe uma direção preferencial para o alinhamento do momento magnético de cada sítio. Em materiais na escala nano percebe-se um ordenamento magnético. Para explicar esse ordenamento surge o conceito de campo efetivo, que é o responsável pelo alinhamento desses momentos magnéticos. O campo efetivo é resultado da interação com todos os momentos magnéticos do nanodisco, o mesmo depende da posição de cada sítio da rede, ou seja, o vetor campo efetivo \vec{B}^{eff} que atua no sítio i no centro do disco não é o mesmo que atua na borda do disco.

Para encontrar esse campo efetivo, vamos considerar duas interações que são: interação de troca e interação dipolar. Assim o campo efetivo será uma combinação do campo gerado pela

interação de troca e o campo gerado pela dipolar.

$$\vec{B}^{eff} = \vec{B}^{dip} + \vec{B}^{exc} \quad (2.3.1)$$

onde \vec{B}^{eff} é o campo efetivo, \vec{B}^{dip} é o campo da interação dipolar e \vec{B}^{exc} é o campo da interação de troca (ou exchange)

Para entendermos melhor essa interação, vamos tomar como base a interação Zeeman. Observando a equação (2.2.13), podemos fazer um modelo análogo para o \vec{B}^{dip} e \vec{B}^{exc} , onde teríamos uma outra forma de expressar o hamiltoniano da dipolar e o hamiltoniano de troca, que seriam dadas pelas seguintes equações:

$$H^{dip} = - \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{B}_i^{dip} = - \sum_{i=1}^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{dip} \quad (2.3.2)$$

e

$$H^{exc} = - \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{B}_i^{exc} = - \sum_{i=1}^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{exc} \quad (2.3.3)$$

Para encontrar o campo \vec{B}_i^{exc} , vamos reescrever a equação (2.2.3)

$$\begin{aligned} H^{exc} &= - \frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = - \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = - \frac{1}{2} \sum_i^N \vec{S}_i \cdot \left(\sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_j \right) \\ &= - \frac{1}{2} \sum_i^N \vec{S}_i \cdot \left(\sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij}}{\hbar^2} \vec{S}_j \right) \frac{\gamma}{\gamma} = - \frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \left(\sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j \right) \\ &= - \frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{exc} \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

sendo

$$\vec{B}_i^{exc} = \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j \quad (2.3.5)$$

Fazendo o mesmo para o campo \vec{B}_i^{dip} , vamos reescrever a equação (2.2.12)

$$\begin{aligned}
H^{dip} &= \frac{\mu_0 \gamma^2}{8\pi a_0^3} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \\
&= \gamma \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \frac{\mu_0 \gamma}{8\pi a_0^3} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \\
&= -\gamma \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \frac{\mu_0 \gamma}{8\pi a_0^3} \left[\frac{3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \\
&= -\frac{\gamma}{2} \sum_i^N \vec{S}_i \cdot \left(\sum_{j \neq i}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \right) \\
&= -\frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{dip}
\end{aligned}$$

onde

$$\vec{B}_i^{dip} = \sum_{j \neq i}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] \quad (2.3.6)$$

Como foi mostrado anteriormente, o campo efetivo é uma combinação do campo de troca com o campo dipolar, substituindo as equações 2.3.5 e 2.3.6 na equação 2.3.1, obtemos o seguinte campo efetivo no sítio i

$$\vec{B}_i^{eff} = \sum_{j \neq i}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \sum_{j \neq i}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j \quad (2.3.7)$$

Agora, podemos escrever o hamiltoniano com campo efetivo na forma do hamiltoniano de Zeeman, dado por

$$\begin{aligned}
H^{eff} &= H^{exc} + H^{dip} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{exc} - \frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{dip} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \vec{B}_i^{eff}
\end{aligned} \quad (2.3.8)$$

Outra forma de encontrar o campo efetivo seria calculando

$$B_i^{eff} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i} = -\vec{\nabla}_i H \quad (2.3.9)$$

O hamiltoniano total tem uma parcela que é o termo de Zeeman, neste caso o campo efetivo local com o termo de campo externo é dado por

$$\vec{\mathcal{B}}_i = \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j + 2 B^{ext} \quad (2.3.10)$$

onde fator 2 no campo externo é colocado para anular o fator $\frac{1}{2}$ da dupla contagem.

Finalmente podemos escrever o hamiltoniano total que usaremos para descrever um nanodisco magnético e que interage com um campo externo da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot \left(\sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] + \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{J_{ij}}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_j \right) - \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot B^{ext} \quad (2.3.11)$$

ou

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0 \gamma^2}{8\pi a_0^3} \left[\frac{3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \sum_i^N \gamma \vec{S}_i \cdot B^{ext} \quad (2.3.12)$$

Enfatizando, esse Hamiltoniano será utilizado para descrever a Dinâmica de Spins no nanodisco magnético.

2.4 Evolução Temporal da Magnetização

A precessão da magnetização M em torno de um campo magnético aplicado, é causado pelo torque exercido por este campo $\vec{\mathcal{B}}$, que é dado por

$$-\gamma_e \mu_0 \vec{M} \times \vec{\mathcal{B}}$$

onde γ_e é a razão giromagnética do elétron e μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo. Assim, a equação que rege a evolução temporal da magnetização, na ausência de amortecimento, é definida por

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma_e \vec{M} \times \mu_0 \vec{\mathcal{B}} = -\gamma_G \vec{M} \times \vec{\mathcal{B}} \quad (2.4.1)$$

onde γ_G é a razão giromagnética de Gilbert, um número positivo, proporcional à razão giromagnética do elétron γ_e^5 , dada no sistema de unidades SI [22], por:

$$\gamma_G = \mu_0 \gamma_e = 2.2127606 \times 10^5 \text{ mA}^{-1} \text{ s}^{-1}.$$

A equação (2.4.1) descreve um movimento de precessão de M em torno da direção do campo aplicado; este campo não pode variar a componente da magnetização paralela a ele. Esta descrição aplica-se a momentos magnéticos isolados, ou seja, momentos magnéticos que não interagem ou trocam energia com outro sub-sistema, que funcionaria como um reservatório térmico. Este conjunto de momentos magnéticos só vai mudar a sua magnetização, atingindo uma outra configuração de equilíbrio, se existe um mecanismo para esta troca. Neste caso, a descrição fenomenológica que contém o amortecimento é a equação de *Landau-Lifshitz-Gilbert*:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma_G \vec{M} \times \vec{\mathcal{B}} - \frac{\alpha_G}{M_s} \vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \quad (2.4.2)$$

onde α_G é a constante de amortecimento de Gilbert, um parâmetro adimensional.

Outra forma de descrever o movimento da magnetização \vec{M} , que é matematicamente equivalente, mas tem um termo de relaxamento com uma forma diferente, pode ser derivada da anterior, e dada por [11]:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{\mathcal{B}}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{\mathcal{B}}_{eff}) \quad (2.4.3)$$

onde $\vec{\mathcal{B}}_{eff}$ é o campo efetivo.

As constantes de amortecimento fenomenológica em termos de α e da razão giromagnética utilizadas nas equações (2.4.1) e (2.4.3) estão relacionadas através de:

$$\gamma = \frac{\gamma_G}{1 + \alpha_G^2} \quad (2.4.4)$$

$$\alpha = \frac{\alpha_G \gamma_G}{1 + \alpha_G^2} \quad (2.4.5)$$

podemos escrever γ e α como γ_L e α_L .

A equação de *Landau-Lifshitz-Gilbert* (LLG) permite descrever como a magnetização evolui com o tempo. A evolução temporal da magnetização de uma amostra é dada pela resolução de um conjunto de equações acopladas de *Landau-Lifshitz-Gilbert*, cada uma correspondendo a um elemento de volume no qual a amostra é dividida. A solução das equações LLG é feita numericamente.

⁵ $\gamma_e = \frac{2\mu_e}{\hbar} = 1,760859 \times 10^{11} [\text{s}^{-1} \text{T}^{-1}]$

3 MODELO COMPUTACIONAL PARA UM NANODISCO MAGNÉTICO

Neste capítulo, será apresentado o modelo computacional para o estudo das propriedades dos nanodiscos magnéticos. De modo geral, a modelagem computacional de sistemas nano estruturados torna mais realística a comparação dos resultados das simulações com resultados experimentais em sistemas nesta escala. Aqui, será apresentado também a Dinâmica de Spins e a Teoria do Micromagnetismo.

3.1 Dinâmica de Spins

Quando um momento magnético está numa região em que existe um campo magnético externo \vec{B}^{ext} , ele fica sujeito à ação de uma força magnética produzida por \vec{B}^{ext} . A influência de um campo externo no momento magnético foi estudado na seção (2.2.3). Sabemos que o momento magnético tende alinhar com o \vec{B}^{ext} , mas esse alinhamento não é um movimento linear e sim um movimento de precessão em torno do campo aplicado. Isso significa que os momentos magnéticos descrevem círculos em torno de \vec{B}^{ext} , fazem uma volta completa no período T e com isso definimos uma frequência angular. Existem casos em que seu movimento é helicoidal, onde o raio do movimento diminui com o tempo, ou seja, o momento magnético alinha-se com o \vec{B}^{ext} . Para resolver esse problema, vamos utilizar a equação de movimento de Heisenberg, por que descreve muito bem a evolução temporal de cada momento magnético. A equação de Heisenberg é definida da seguinte forma:

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\vec{m}, H^{ext}] \quad (3.1.1)$$

onde \vec{m} é o operador momento magnético local e H^{ext} é o hamiltoniano de Zeemam.

Essa equação pode ser aplicada em sistema com milhares de momentos magnéticos. Em um nanodisco magnético sabemos que cada sítio da rede tem um campo efetivo local, ver na seção 2.3. Para encontrar uma nova configuração para o nanodisco, teremos que resolver N equações de movimento, onde N representa o número de sítios presentes no nanodisco. Até aqui, já temos uma ideia da complexidade do problema a ser resolvido.

Considerando que a equação (3.1.1) nos fornece a precessão de um momento magnético, podemos reescrevê-la na forma geral como

$$\frac{d\vec{m}_u}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\vec{m}_u, \mathcal{H}] \quad \text{ou} \quad \frac{d\vec{S}_u}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\vec{S}_u, \mathcal{H}] \quad (3.1.2)$$

onde o índice u refere-se a um sítio na rede e \mathcal{H} é o hamiltoniano do sistema, dado por (2.3.12):

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i \sum_{\substack{j \\ j \neq i}} \frac{\mu_0 \gamma^2}{8\pi a_0^3} \left[\frac{3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{(r_{ij}/a_0)^3} \right] - \sum_i \gamma \vec{S}_i \cdot \mathbf{B}^{ext} \quad (3.1.3)$$

Nosso objetivo agora é resolver essa equação de movimento para cada Spin; no apêndice A.2 encontramos algumas propriedades dos operadores de spin. Escrevendo a equação (3.1.2) em termo (2.2.3), (2.2.12) e (2.2.13), temos

$$\begin{aligned} \frac{dS_u^a}{dt} &= -\frac{i}{\hbar}[S_u^a, \mathcal{H}] = -\frac{i}{\hbar}[S_u^a, (H^{exc} + H^{dip} + H^{ext})] \\ i\hbar \frac{dS_u^a}{dt} &= [S_u^a, H^{exc}] + [S_u^a, H^{dip}] + [S_u^a, H^{ext}] \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

onde o índice a refere-se as componentes x, y, z .

Vamos resolver as parcelas dos comutadores acima, utilizando as regras de comutação e as expressões de cada hamiltoniano apresentado no apêndice A.2. O primeiro termo é dado da seguinte forma:

$$[S_u^a, H^{exc}] = \left[S_u^a, -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right] = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle ij \rangle} [S_u^a, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j] \quad (3.1.5)$$

Vamos resolver para componente $a = x$. A equação acima fica da seguinte forma,

$$\begin{aligned} [S_u^x, H^{exc}] &= -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle ij \rangle} [S_u^x, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j] \\ &= -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle ij \rangle} [S_u^x, S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[S_u^x, H^{exc}] &= -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle ij \rangle} \left([S_u^x, S_i^x S_j^x] + [S_u^x, S_i^y S_j^y] + [S_u^x, S_i^z S_j^z] \right) \\
&= -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle ij \rangle} \left(S_i^y [S_u^x, S_j^y] + [S_u^x, S_i^y] S_j^y + S_i^z [S_u^x, S_j^z] + [S_u^x, S_i^z] S_j^z \right) \\
&= -\frac{iJ}{2\hbar} \sum_{\langle ij \rangle} \left(\delta_{uj} S_i^y S_j^z + \delta_{ui} S_i^z S_j^y - \delta_{uj} S_i^z S_j^y - \delta_{ui} S_i^y S_j^z \right) \\
&= -\frac{iJ}{2\hbar} \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{uj} \left(S_i^y S_j^z - S_i^z S_j^y \right) - \frac{iJ}{2\hbar} \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{ui} \left(S_i^z S_j^y - S_i^y S_j^z \right) \\
&= -\frac{iJ}{2\hbar} \sum_i \left(S_i^y S_u^z - S_i^z S_u^y \right) - \frac{iJ}{2\hbar} \sum_j \left(S_u^z S_j^y - S_u^y S_j^z \right)
\end{aligned}$$

Substituindo os índice i e j do somatório para um k, temos

$$\begin{aligned}
[S_u^x, H^{exc}] &= -\frac{iJ}{2\hbar} \sum_k \left(S_k^y S_u^z - S_k^z S_u^y \right) - \frac{iJ}{2\hbar} \sum_k \left(S_u^z S_k^y - S_u^y S_k^z \right) \\
&= -\frac{iJ}{2\hbar} \sum_k \left(S_k^y S_u^z - S_k^z S_u^y + S_u^z S_k^y - S_u^y S_k^z \right) \\
&= -\frac{iJ}{2\hbar} \sum_k \left(S_k^y S_u^z + S_u^z S_k^y \right) + \frac{iJ}{2\hbar} \sum_k \left(S_k^z S_u^y + S_u^y S_k^z \right)
\end{aligned}$$

Utilizando a regra de anti-comutadores $\{A, B\} = AB + BA = \{B, A\}$, na equação acima, obtemos

$$[S_u^x, H^{exc}] = \frac{iJ}{2\hbar} \sum_{\substack{k \\ k \neq u}}^N \left(\{S_u^y, S_k^z\} - \{S_u^z, S_k^y\} \right) \quad (3.1.6)$$

Generalizado para as demais componentes, através do símbolo ε^{abc} , temos

$$[S_u^x, H^{exc}] = \frac{iJ}{2\hbar} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq u}}^N \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \varepsilon^{abc} \{S_u^b, S_k^c\} \quad (3.1.7)$$

Usando à relação de comutação (A.2.1), com $u \neq k$ temos que,

$$\begin{aligned}
[S_u^b, S_k^c] &= 0 \\
S_u^b S_k^c - S_k^c S_u^b &= 0 \\
S_u^b S_k^c &= S_k^c S_u^b
\end{aligned} \quad (3.1.8)$$

e usando à regra de anti-comutadores, temos

$$\{S_u^b, S_k^c\} = S_u^b S_k^c + S_k^c S_u^b = 2S_u^b S_k^c \quad (3.1.9)$$

Substituindo a equação (3.1.9) na equação (3.1.7), obtemos

$$\begin{aligned} [S_u^a, H^{exc}] &= \frac{iJ}{2\hbar} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq u}}^N \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \epsilon^{abc} 2S_u^b S_k^c \\ &= \frac{iJ}{\hbar} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq u}}^N \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \epsilon^{abc} S_u^b S_k^c \\ &= i\hbar \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \epsilon^{abc} \gamma S_u^b \left\{ \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq u}}^N \frac{J}{\gamma \hbar^2} S_k^c \right\} \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

na forma vetorial, temos

$$[\vec{S}_u, H^{exc}] = i\hbar \gamma \vec{S}_u \times \left\{ \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq u}}^N \frac{J}{\gamma \hbar^2} \vec{S}_k \right\} \quad (3.1.11)$$

ou

$$[\vec{S}_u, H^{exc}] = i\hbar \gamma \vec{S}_u \times \vec{B}_u^{exc} \quad (3.1.12)$$

onde \vec{B}_u^{exc} é o campo de troca.

Podemos fazer o mesmo desenvolvimento de forma análoga, para o hamiltoniano da interação dipolar e interação Zeeman, teremos os seguintes resultados:

$$[\vec{S}_u, H^{dip}] = i\hbar \gamma \vec{S}_u \times \vec{B}_u^{dip} \quad (3.1.13)$$

e

$$[\vec{S}_u, H^{ext}] = i\hbar \gamma \vec{S}_u \times \vec{B}_u^{ext} \quad (3.1.14)$$

Podemos reescrever a equação (3.1.2) da seguinte forma

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\vec{S}_u}{dt} = [\vec{S}_u, \mathcal{H}] &= i\hbar \gamma \vec{S}_u \times (\vec{B}_u^{exc} + \vec{B}_u^{dip} + \vec{B}_u^{ext}) \\ \frac{d\vec{S}_u}{dt} &= \gamma \vec{S}_u \times (\vec{B}_u^{exc} + \vec{B}_u^{dip} + \vec{B}_u^{ext}) \\ \frac{d\vec{S}_u}{dt} &= \gamma \vec{S}_u \times \vec{\mathcal{B}}_u \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

Dessa expressão, vemos que a variação do momento angular é sempre perpendicular tanto a ele próprio como ao campo magnético. Neste caso, o módulo do momento angular não muda, mas precessa em torno do campo $\vec{\mathcal{B}}$ com uma frequência angular. Essa equação diferencial envolvendo os operadores de momento angular, na representação de Heisenberg, é uma generalização da equação clássica descrevendo a precessão de Larmor.

3.2 O Limite Clássico

Nesta seção, vamos estudar o comportamento de sistemas quânticos no limite clássico. O estudo de sistemas quânticos torna-se muito complexo. Em alguns sistemas percebermos que os operadores de spins comportam-se como vetores clássicos. Isso acontece em sistemas com elevados números quânticos de spin. Com isso o número de estados discretos que o momento angular pode assumir torna-se grande. Logo, o resultado esperado no limite clássico é que os operadores de spins apresentem um contínuo de estados. Assim, o Princípio da Incerteza de Heisenberg é desprezado nos casos onde conhecemos as três componentes de spins simultaneamente. Essa mudança na representação de operadores de spin por vetores é importante em simulação, nos possibilita especificar uma condição inicial para o nanodisco magnético e estudar a evolução do sistema utilizando a dinâmica de spins.

A partir daí, representaremos todos os operadores de spins por vetores com módulo igual a $\hbar S$, mas mantendo os vetores com a mesma dimensão de momento angular dos operadores, ou seja, podemos reescrever os vetores fazendo a seguinte transformação

$$\vec{S}_u \rightarrow \hbar S \hat{S}_u \quad (3.2.1)$$

onde S é adimensional e os \hat{S}_u são versores, obedecendo o vínculo $|\hat{S}_u|^2 = \hat{S}_u \cdot \hat{S}_u = 1$ e $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2$.

Vamos alterar o momento angular pelo momento quântico na equação (2.3.10). Com essa substituição encontramos o campo efetivo clássico que atua em cada sítio da rede, dado por

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{B}}_u &= \sum_{\substack{v \\ v \neq u}}^N \left(\frac{\mu_0 \gamma}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{uv}(\hbar S \hat{S}_v \cdot \hat{r}_{uv}) - \hbar S \hat{S}_v}{(r_{uv}/a_0)^3} \right] + \frac{J}{\gamma \hbar} S \hat{S}_v \right) + 2B^{ext} \\ &= \sum_{\substack{v \\ v \neq u}}^N \left(\frac{\mu_0 \gamma \hbar S}{4\pi a_0^3} \left[\frac{3\hat{r}_{uv}(\hat{S}_v \cdot \hat{r}_{uv}) - \hat{S}_v}{(r_{uv}/a_0)^3} \right] + \frac{J S}{\gamma \hbar} \hat{S}_v \right) + 2B^{ext} \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

A equação (3.1.15) no limite clássico, torna-se

$$\frac{d\hat{S}_u}{dt} = \gamma \hat{S}_u \times \vec{\mathcal{B}}_u \quad (3.2.3)$$

O hamiltoniano (2.3.12) é definido no limite clássico da seguinte forma

$$\mathcal{H} = -\frac{JS^2}{2} \sum_{\langle u,v \rangle} \hat{S}_u \cdot \hat{S}_v + \frac{\mu_0(\gamma\hbar S)^2}{8\pi a_0^3} \sum_{\substack{u,v \\ v \neq u}}^N \left[\frac{\hat{S}_u \cdot \hat{S}_v - 3(\hat{S}_u \cdot \hat{r}_{uv})(\hat{S}_v \cdot \hat{r}_{uv})}{(r_{uv}/a_0)^3} \right] - \hbar\gamma S \sum_u^N \hat{S}_u \cdot B^{ext} \quad (3.2.4)$$

Definindo o parâmetro da interação dipolar como

$$D = \frac{\mu_0(\gamma\hbar)^2}{4\pi a_0^3} = \frac{\mu_0(g\mu_B)^2}{4\pi a_0^3} \quad (3.2.5)$$

onde D tem dimensão de energia [J], logo

$$\mathcal{H} = -\frac{JS^2}{2} \sum_{\langle u,v \rangle} \hat{S}_u \cdot \hat{S}_v + \frac{DS^2}{2} \sum_u^N \sum_{\substack{v \\ v \neq u}}^N \left[\frac{\hat{S}_u \cdot \hat{S}_v - 3(\hat{S}_u \cdot \hat{r}_{uv})(\hat{S}_v \cdot \hat{r}_{uv})}{(r_{uv}/a_0)^3} \right] - g\mu_B S \sum_u^N \hat{S}_u \cdot B^{ext} \quad (3.2.6)$$

Esse é o hamiltoniano de Heisenberg no limite clássico, com o termo de anisotropia de forma e interação do campo externo.

3.3 Estimativa do Número Total de Spins num Sistema Real

Nessa seção, vamos estimar a quantidade de spins existentes em um nanodisco feito de Permalloy-79 com raio $r = 100nm$ e espessura $l = 10nm$. O cálculo depende da condição da estrutura da rede. O Permalloy-79, apresenta uma estrutura FCC (Cúbica de faces centradas) ilustrada na figura (3.1), o parâmetro de rede de uma célula convencional de Py-79 é $a_0 = 0,355[nm]$, dados retirados do trabalho [23]. Lembre-se que uma rede FCC cada spin tem 12 vizinhos.

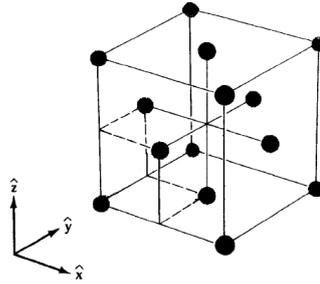


Figura 3.1: Modelo de uma célula da rede FCC.

Para calcular o número total de spin no nanodisco, vamos obter o número de células convencionais existentes no disco. Uma conta bem simples é dividir o volume do disco pelo volume da célula convencional, o número de célula é dado por:

$$N_{cel} = \frac{V_{disco}}{V_{cel}} = \frac{\pi r^2 \times 10}{0,355 \times 0,355 \times 0,355} = \frac{314000}{0,044738875} \approx 7,01 \times 10^6 \quad (3.3.1)$$

onde N_{cel} é o número total de célula na caixa.

Logo cada célula convencional contribui com $1/8 \times 8 + 1/2 \times 6 = 4$ momentos magnéticos, assim o número total de spins no nanodisco é aproximadamente

$$N_{spin} = 4 \times N_{cel} = 4 \times 7,01 \times 10^6 \approx 28,07 \times 10^6 \quad (3.3.2)$$

onde N_{spin} é o número total de spin no nanodisco.

Com esse resultado prevemos quantas vezes teremos que integrar a equação (3.2.3), mas o número total de spins é grande para calcularmos as interações entre spins. A simulação micromagnética reduz o sistema real em um sistema equivalente com algumas aproximações.

3.4 Simulação Micromagnética

Na simulação micromagnética o sistema é redividido em células de trabalho. Cada célula de trabalho representa N momentos magnéticos. Lembrando que as propriedades magnéticas do material serão as mesmas depois da nova divisão. O objetivo da divisão é diminuir o número de interações a serem calculada na simulação e a restrição de memórias disponíveis nos computadores atuais do Laboratório de Simulação Computacional do Departamento de Física UFJF.

Supondo que uma célula de trabalho tenha um volume, a^3 , o volume da FCC V_{FCC}^3 e que

cada célula FCC contribui com 4 momentos magnéticos. O número de spin que cada célula de trabalho representa é dado por:

$$N_{spin} = 4 \left(\frac{a^3}{V_{FCC}^3} \right) = 4 \left(\frac{a^3}{a_0^3} \right)$$

onde a_0 é o parâmetro de rede do material magnético (Py-79) e a é o parâmetro de rede da nova célula.

A configuração da célula de trabalho depende do comprimento de troca, λ_{exc} , que é dado por:

$$\lambda_{exc} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \quad (3.4.1)$$

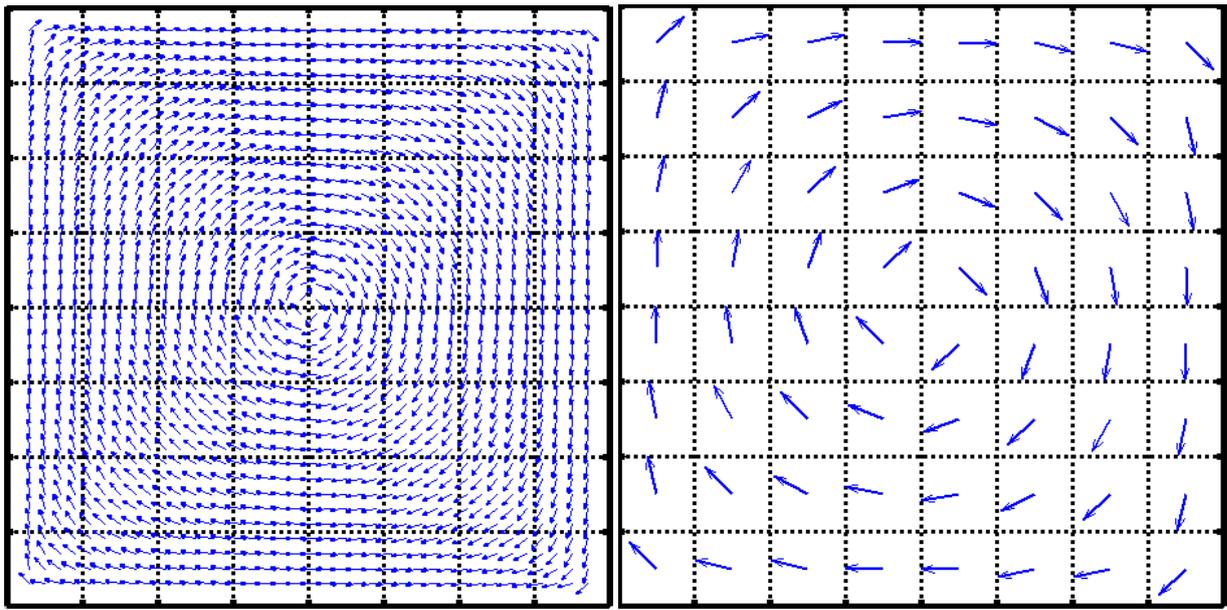
onde M_s é a magnetização de saturação do material e A é a constante de troca do material.

- 1) As células de trabalho com dimensão $a \leq \lambda_{exc}$ apresentam magnetização uniforme.
- 2) As células de trabalho com dimensão $a > \lambda_{exc}$ tendem a apresentar magnetização não uniforme.

A célula de trabalho representa um volume do material magnético no qual não há mudança considerável nos momentos magnéticos. O micromagnetismo descreve uma amostra magnética utilizando vetores para representar a magnetização $\vec{M}(\vec{r}, t)$. Logo as dimensões da célula devem ser inferiores ao comprimento de troca, tal que, os momentos dos spins pertencentes a célula tem a mesma direção e sentido.

Por exemplo, para Py-79 ¹, temos $\lambda \approx 5.3[nm]$. Assim, uma boa escolha para o novo parâmetro de rede seria $a = 5[nm]$. Na figura 3.2, temos um esquema da discretização em duas dimensões.

¹ $A = 1,3 * 10^{-11}[J/m]$ e $M_s = 8.6 * 10^5[A/m]$



(a) Sistema real

(b) Aproximação Micromagnética

Figura 3.2: Representação da nova célula da rede. Figura retirada da referência [24]

Nesta condição a magnetização da célula pode ser calculada da seguinte forma:

$$\vec{M}_i = \frac{1}{v_{cel}} \sum_k \vec{m}_k^{atom} = \frac{1}{v_{cel}} \vec{m}_i \quad (3.4.2)$$

onde v_{cel} é o volume da célula de trabalho, \vec{m}_i é o seu momento magnético e \vec{m}_k é o momento magnético de cada sítio da rede contido dentro da célula.

Reescrevendo a equação (3.4.2), temos

$$\vec{m}_i = v_{cel} \vec{M}_i = v_{cel} M_s \hat{m}_i = m_{cel} \hat{m}_i \quad (3.4.3)$$

onde M_s é o módulo da magnetização de saturação da célula de trabalho e \hat{m}_i é um versor que dá a direção e sentido dessa saturação.

As interações magnéticas permanecem essencialmente as mesmas, porém ao modificar o parâmetro de rede, devemos renormalizar as constantes das interações.

Os hamiltonianos micromagnéticos normalizados para cada tipo de interação são:

Hamiltoniano de troca:

$$H^{exc} = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j \quad (3.4.4)$$

onde $J_{cel} = 2aA$ é a constante de acoplamento entre as células de trabalho, que pode ser encontrada partindo do limite contínuo do modelo de Heisenberg isotrópico [24].

Hamiltoniano da dipolar:

$$H^{dip} = \frac{D_{cel}}{2} \left(\sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j>i}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right) \quad (3.4.5)$$

onde o parâmetro da interação dipolar fica:

$$D_{cel} = \frac{\mu_0 m_{cel}^2}{4\pi a^3}$$

e usando a relação do comprimento de exchange (3.4.1), obtêm-se

$$D_{cel} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 J_{cel}$$

Hamiltoniano de Zeeman:

$$H^{ext} = m_{cel} \mu_0 M_s \left(- \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} \right) \quad (3.4.6)$$

onde \vec{b}_i^{ext} é o campo externo adimensional, definido por

$$\vec{b}_i^{ext} = \frac{1}{\mu_0 M_s} \vec{B}_i^{ext}$$

Escrevendo a constante da interação Zeeman em termos de J_{cel} , temos

$$m_{cel} \mu_0 M_s = \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 J_{cel}$$

O hamiltoniano micromagnética é dado pela expressão

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - m_{cel} \mu_0 M_s \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} + \\ & + \frac{D_{cel}}{2} \sum_{\substack{j,i \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \end{aligned} \quad (3.4.7)$$

Na equação (3.4.7) colocaremos a constante de acoplamento da célula, J_{cel} , em evidência, por causa da dimensão de energia. Com isso teremos um hamiltoniano adimensional com versores unitários.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J_{cel} \left(-\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{m_{cel} \mu_0 M_s}{J_{cel}} \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} + \right. \\ & \left. + \frac{D_{cel}}{2J_{cel}} \sum_{\substack{j,i \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right) \end{aligned} \quad (3.4.8)$$

ou em termos do comprimento de troca, obtêm-se

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = J_{cel} & \left(-\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{8\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{\substack{j,i \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right) \end{aligned} \quad (3.4.9)$$

O termo entre parêntese é a hamiltoniana adimensional do sistema

$$\mathcal{H} = J_{cel} \mathcal{H}' \quad (3.4.10)$$

onde

$$\mathcal{H}' = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} + \frac{1}{8\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{\substack{j,i \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \quad (3.4.11)$$

Podemos escrever o hamiltoniano em termos do campo efetivo local, dado por

$$\mathcal{H} = -\sum_i \vec{m}_i \cdot \left\{ \frac{2aA}{m_{cel}} \vec{b}_i \right\} = -\sum_i \vec{m}_i \cdot \vec{B}_i \quad (3.4.12)$$

onde o campo efetivo local \vec{b}_i adimensional, é definido por:

$$\vec{b}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N C_{ij} \hat{m}_j + \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \vec{b}_i^{ext} - \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda_{exc}} \right)^2 \sum_{\substack{j \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{m}_j - 3\hat{r}_{ij}(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \quad (3.4.13)$$

onde a constante C_{ij} é dado por,

$$C_{ij} = \begin{cases} 1, & i, j \text{ vizinhos} \\ 0, & \text{outros casos.} \end{cases}$$

A dinâmica de spin para o micromagnetismo é governada por equações diferenciais fenomenológicas. A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (L.L.G) [25] é definida como

$$\frac{d\vec{m}_i}{dt} = \gamma \vec{m}_i \times \vec{B}_i - \frac{\alpha|\gamma|}{m_i} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{B}_i) \quad (3.4.14)$$

onde a constante α denomina parâmetro de amortecimento do sistema, que depende do tipo de material. Esse termo dissipativo faz com que os momentos magnéticos se alinhem na direção do campo efetivo. A constante γ é o fator da razão giromagnética. O γ pode ser positiva ou negativa, dependendo do tipo da carga, como foi mostrado no exemplo do elétron circulante em

um átomo. Para o exemplo do elétron temos

$$\gamma = \frac{g\mu_B}{\hbar} = -\frac{e}{m_e} \quad (3.4.15)$$

Substituindo o versor \hat{m} e o campo efetivo adimensional \vec{b}_i na equação (3.4.14), obtemos:

$$\frac{d\hat{m}_i}{dt} = |\gamma| \frac{J_{cel}}{m_{cel}} \left[\pm \hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \right] \quad (3.4.16)$$

$$= \omega_0 \left[\pm \hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \right] \quad (3.4.17)$$

onde ω_0 têm dimensão de inverso de tempo, [1/s], definido como frequência angular da precessão do spin, reescrito como

$$\omega_0 = |\gamma| \frac{J_{cel}}{m_{cel}} = \frac{2aA\gamma}{m_{cel}} \left[\frac{\mu_0 M_s}{\mu_0 M_s} \right] = \left[\frac{2A}{\mu_0 M_s^2} \right] \frac{\mu_0 M_s \gamma}{a^2} = \left(\frac{\lambda}{a} \right)^2 \mu_0 M_s \gamma$$

Podemos reescrever a equação (3.4.17) da seguinte forma:

$$\frac{1}{\omega_0} \frac{d\hat{m}_i}{dt} = \pm \hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \quad (3.4.18)$$

Definindo $\omega_0 dt$ como $d\tau$ e substituindo na equação acima, obtemos a forma adimensional da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, dado por

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = \pm \hat{m}_i \times \vec{b}_i - \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \quad (3.4.19)$$

onde $d\tau$ é o incremento de tempo computacional, adimensional. No apêndice B.1 vemos que o módulo do momento magnética é conservado.

Para converter intervalos de tempo computacional em intervalos reais, usa-se a seguinte relação

$$\Delta t = \frac{1}{\omega_0} \Delta \tau \quad (3.4.20)$$

A dinâmica dissipativa, evolui a configuração inicial para um outra na qual a energia é mínima (localmente).

3.5 Integração da Equação de Movimento

Nesta seção, estamos interessados em estudar métodos de integrações para resolvermos as equações (L.L.G). Existem vários métodos numéricos para resolver conjuntos de equações diferenciais ordinárias. Os métodos de integrações mais usados são o preditor-corretor e o método de Runge-kutta [26].

A equação (3.4.19) que devemos resolver para determinar a evolução temporal da magnetização no nanodisco magnético, apresenta a seguinte estrutura

$$\frac{d\vec{m}_i^a}{d\tau} = \vec{F}(m_i^a) \quad (3.5.1)$$

Na equação (3.5.1) o índice "a" representa as coordenadas espaciais e i o sítio da rede onde deseja encontrar a nova configuração do spin. Reescrevendo a equação para cada coordenada espacial, temos

$$\frac{d\vec{m}_i^x}{d\tau} = \vec{F}(m_i^x) = \vec{f}^x(\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z, \tau) \quad (3.5.2)$$

$$\frac{d\vec{m}_i^y}{d\tau} = \vec{F}(m_i^y) = \vec{f}^y(\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z, \tau) \quad (3.5.3)$$

$$\frac{d\vec{m}_i^z}{d\tau} = \vec{F}(m_i^z) = \vec{f}^z(\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z, \tau) \quad (3.5.4)$$

onde os vetores $\vec{m}^x, \vec{m}^y, \vec{m}^z$ são componentes dos campos efetivos locais. Lembrando que \vec{m}^x tem comprimento N, onde N é o número de sítios.

3.5.1 Método de Runge Kutta de Ordem 4

O método de Runge-kutta usa a média ponderada das inclinações no intervalo $[\tau, t + \tau]$. É um método de passo simples que requer apenas derivadas de primeira ordem e pode fornecer aproximações precisas com erros de truncamento de ordem $\mathcal{O}(\tau^5)$. O método de Runge-Kutta

tem a seguinte forma geral:

$$\begin{aligned} m_{p+1}^x &= m_p^x + \frac{\Delta\tau}{6} (k_{p1}^x + 2k_{p2}^x + 2k_{p3}^x + k_{p4}^x) \\ \tau_{p+1} &= \tau_p + \Delta\tau \end{aligned}$$

onde m_{p+1} é a aproximação por Runge-Kutta de $m(\tau_{p+1})$, $\Delta\tau$ é o incremento de tempo, $p = 1, 2, 3, \dots$ é o número de passos computacionais e

$$\begin{aligned} k_{p1}^x &= f(\tau_p, m_p^x) & k_{p2}^x &= f\left(\tau_p + \frac{\Delta\tau}{2}, m_p^x + \frac{\Delta\tau}{2}k_{p1}^x\right) \\ k_{p3}^x &= f\left(\tau_p + \frac{\Delta\tau}{2}, m_p^x + \frac{\Delta\tau}{2}k_{p2}^x\right) & k_{p4}^x &= f(\tau_p + \Delta\tau, m_p^x + \Delta\tau k_{p3}^x) \end{aligned}$$

Então, o próximo valor de m_{p+1}^x é determinado pelo valor atual de m_p^x somado com o produto do tamanho do incremento de tempo (τ).

Para o início do método é necessário $3N$ condições iniciais para começar a evolução da magnetização do nanodisco magnético, definida por

$$\vec{m}^x(\tau_0) = \vec{m}^{x_0} \quad (3.5.5)$$

$$\vec{m}^y(\tau_0) = \vec{m}^{y_0} \quad (3.5.6)$$

$$\vec{m}^z(\tau_0) = \vec{m}^{z_0} \quad (3.5.7)$$

Lembrando que a configuração inicial do sistema pode ser escolhida de várias formas: aleatória, monodomínio, vórtice planar, vórtice fora do plano do nanodisco.

Com essas condições podemos resolver equações diferenciais de primeira ordem. Logo, calcula-se o campo efetivo dessa configuração e os coeficientes k_{p1}^x , k_{p2}^x , k_{p3}^x e k_{p4}^x são determinados. Com os valores dos coeficientes é possível encontrar as novas coordenadas espaciais. Essa nova configuração do nanodisco no tempo $t + \tau$ é utilizada para calcular novos coeficientes k_{p1}^x , k_{p2}^x , k_{p3}^x e k_{p4}^x e em seguida encontramos uma outra configuração do nanodisco que corresponde ao instante $t + 2\tau$. Assim sucessivamente até atingir o tempo desejado.

3.5.2 Método Preditor-corretor de Ordem 4

A implementação do método começa pelo algoritmo explícito de Adams-Bashforth de quarto passos, que é conhecido como método preditor,

$$m_i^x(t + \tau)_{pred} = m_i^x + \frac{\tau}{24}[55\vec{F}(m_i^x(t)) - 59\vec{F}(m_i^x(t - \tau)) + 37\vec{F}(m_i^x(t - 2\tau)) - 9\vec{F}(m_i^x(t - 3\tau))] \quad (3.5.8)$$

Com essa equação é possível prever a configuração da magnetização do nanodisco no instante $t + \tau$ usando quatro configurações anteriores. A equação (3.5.8) costuma errar para mais o valor de $m_i^x(t + \tau)$. Para corrigir parte desse erro para menos, utilizaremos o algoritmo corretor abaixo.

$$m_i^x(t + \tau)_{cor} = m_i^x(t) + \frac{\tau}{24}[9\vec{F}(m_i^x(t + \tau)) + 19\vec{F}(m_i^x(t)) - 5\vec{F}(m_i^x(t - \tau)) + \vec{F}(m_i^x(t - 2\tau))] \quad (3.5.9)$$

O valor obtido na equação (3.5.9) é mais preciso. O método preditor-corretor não pode ser iniciado apenas com a condição inicial. O mesmo necessita de mais três configurações além da configuração inicial, uma forma de proceder é usar o método de Runge-Kutta, para encontrar as três configurações necessária para iniciar o método preditor-corretor.

Neste trabalho, utilizaremos o método preditor-corretor com os procedimento citado acima, para resolver as equações de movimento do hamiltoniano do nanodisco magnético. Este método foi escolhido, por que na simulação de nanodisco magnético, mostrou-se mais rápido do que o método de Runge-Kutta. Com esse método podemos calcular as derivadas temporais em um instante τ com as configurações anteriores. Com isso o método reduz uma parte do tempo comparada com outros métodos numéricos. Essa diferença no tempo está relacionado ao cálculo do termo da dipolar, o método de Runge-Kutta exige quatro cálculos do campo efetivo em cada passo, enquanto que o método preditor-corretor exige apenas duas.

A precisão do método é proporcional à potência do incremento de tempo τ . Um método de integração é definido como um algoritmo de ordem n quando o erro local de truncamento, por passo de tempo, é de $\mathcal{O}(\tau^{n+1})$. Logo utilizando um método de 4^ª ordem e incremento de tempo $\tau = 0.01$, encontramos um erro de truncamento igual $\mathcal{O}(10^{-10})$. Quanto mais alta a ordem, maior o número de vezes que se necessita calcular a $\vec{F}_i(m_i^a)$ por passo de integração. Por isso na maioria dos problemas não compensa, em tempo, ir além da 4^a ordem.

4 O MODELO DE IMPUREZA MAGNÉTICA

Neste capítulo, apresentaremos o modelo de impureza magnética utilizada na simulação de nanodisco magnético de Permalloy-79. Existem diversos trabalhos [12, 27, 28, 29, 30, 31] que apresentam modelos para defeitos estruturais, defeitos tipo-buraco e experimentos aplicando tais defeitos. Também temos casos onde os nanodiscos são constituídos de dois semi-discos de materiais diferentes [12]. O autor mostra que na configuração de equilíbrio o núcleo é deslocado para o lado do semi-disco, que tem menor constante de acoplamento.

Nosso modelo de impureza é sugerido pelos colaboradores [32]. No modelo proposto, o potencial de interação da impureza com o vórtice apresenta um perfil gaussiano. O modelo propõe a mudança na constante de troca entre o sítio da impureza e seus vizinhos. As impurezas em sistemas reais podem ser consideradas imperfeições na rede, materiais diferentes e outros. Os colaboradores estudaram o caso de uma impureza magnética pontual. Em simulação micromagnética uma impureza pontual corresponde a uma célula de trabalho.

4.1 O Modelo de Impureza

Consideramos que a interação spin-spin tenha uma constante de acoplamento J e a interação spin-impureza tenha uma constante de acoplamento J' . Neste caso, a presença da impureza no sistema altera a constante de acoplamento na sua vizinhança. Logo a constante de acoplamento da impureza com seus vizinhos pode assumir valores menores ou maiores que J . Como queremos estudar o efeito da impureza no modo girotrópico, precisamos escrever uma nova hamiltoniana que tenha um termo representando as interações spin-impureza. O novo modelo

para a hamiltoniana de um nanodisco com impureza magnética, é dada por

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i \neq i', j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{J'}{2} \sum_{\langle i', j \rangle} \vec{S}_{i'} \cdot \vec{S}_j + \frac{D}{2} \sum_{i \neq j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (4.1.1)$$

onde i' é a posição da impureza na rede e i é a posição do spin na rede.

O primeiro termo da hamiltoniana representa a interação de troca spin-spin. O segundo termo é uma interação de troca spin-impureza, só vale quando for uma interação da impureza magnética com os spins vizinhos. Por último, temos o termo da interação dipolar que não depende da constante de acoplamento de troca. O termo de campo externo é o mesmo da hamiltoniana sem impureza. Para compreender a equação (4.1.1), vamos observar a figura 4.1 que representa uma parte do nanodisco com uma impureza magnética na posição 13. Por exemplo, a constante J' é válida quando $i' = 13$ e $j = 8, 12, 14$ ou 18 .

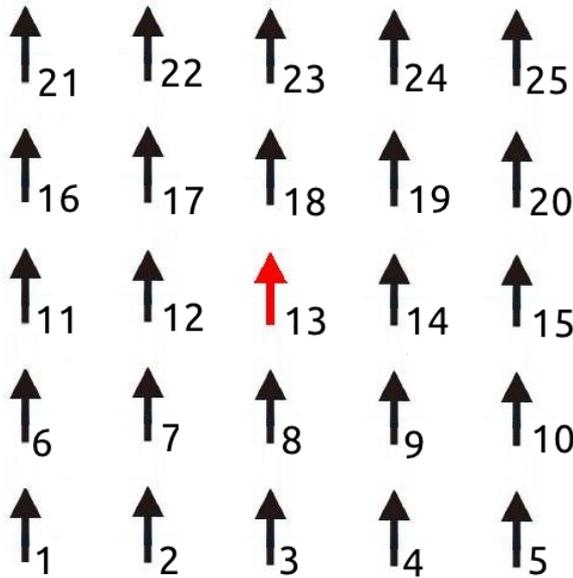


Figura 4.1: Representação de uma pequena parte do nanodisco com impureza magnética. O spin 13 representa a impureza do nanodisco.

Os resultados da figura 4.2 foram obtidos utilizando a hamiltoniana (4.1.1) em métodos numéricos para calcular a energia de interação por sítio (E_{int}) entre o núcleo do vórtice e a impureza magnética em função da distância relativa, (r/a), entre eles. O núcleo do vórtice foi colocado no centro do nanodisco com diâmetro $d = 30a$ para calcular as distâncias relativas.

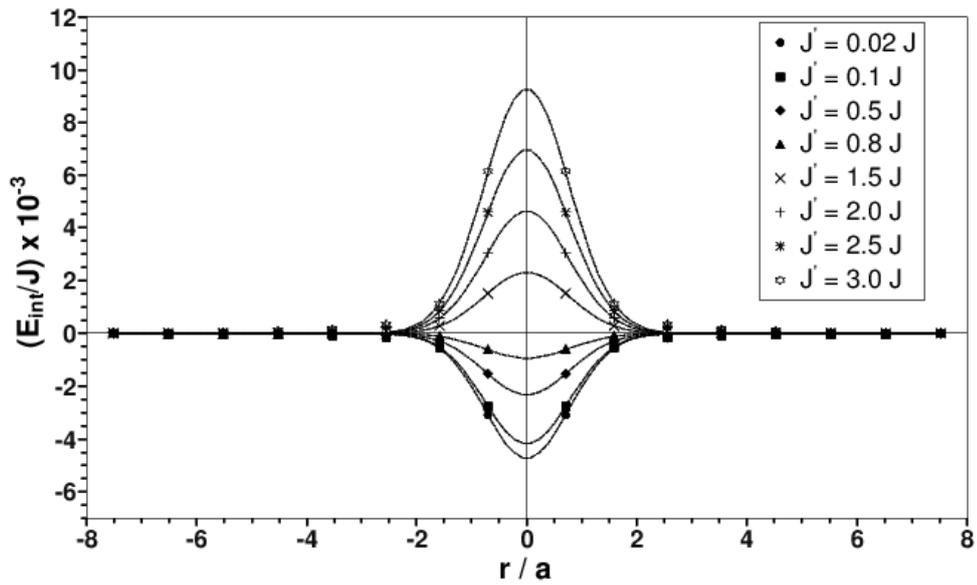


Figura 4.2: Comportamento da energia de interação (E_{int}/J) entre o núcleo do vórtice e a impureza magnética em função da distância relativa (r/a) entre eles. Figura retirado da referência [32].

Na figura 4.2 foi observado que cada J' está associado a uma única gaussiana e que essa gaussiana representa a razão da energia potencial por J , que pode ser expressa pela seguinte equação:

$$\frac{E_{int}}{J} = \frac{E_0}{J} \exp[-0,5(r/\sigma)^2] \quad (4.1.2)$$

onde $\sigma = 0.77a$ para todos J'/J e a é o parâmetro de rede.

Considerando o núcleo do vórtice e a impureza magnética localizadas no centro do nanodisco ($r = 0$) e usando os valores conhecidos dos parâmetros do Permalloy-79, estima-se uma energia de interação (E_0) para cada valor de J' , como mostra a tabela 4.1. Os resultados da tabela 4.1 estão de acordo com medidas experimentais.

J'	$(E_0/J) \times 10^3$
0,02	-4,70
0,1	-4,18
0,5	-2,32
0,8	-0,93
1,5	2,32
2,0	4,63
2,5	6,96
3,0	9,29

Tabela 4.1: Valores da energia de interação para cada constante de acoplamento J' com o núcleo do vórtice no centro do nanodisco, resultados retirados da referência [32].

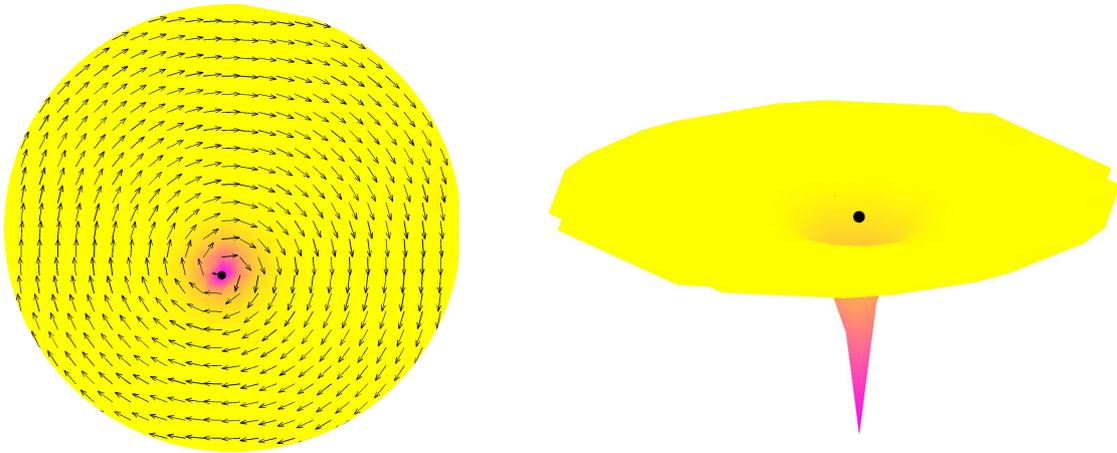
Na figura 4.2 mostra que essa gaussiana tem uma largura de até dois parâmetros de rede. Existe uma diferença na gaussiana que tem uma razão de $\frac{J'}{J} > 1$ com a outra que tem $\frac{J'}{J} < 1$. Essa diferença na gaussiana alterou o estado de equilíbrio do sistema. As impurezas magnéticas com razão menor que 1 apresentam gaussianas com picos negativos. Neste caso, o núcleo do vórtice é atraído pela impureza, que são consideradas impurezas atrativas e na outra o núcleo do vórtice é repelido pela impureza, que são consideradas como impurezas repulsivas.

4.2 Interação do Vórtice com uma Impureza Magnética

Nesta seção, vamos estudar o comportamento do núcleo do vórtice na presença de impurezas atrativas e repulsivas. A interação do núcleo do vórtice com uma impureza magnética é observado na simulação micromagnética de nanodisco, definido pela equação (4.1.1), onde escolhemos uma configuração inicial de vórtice no centro para iniciar o método numérico. As propriedades de atração e repulsão das impurezas magnética são observada, quando a distância relativa entre o núcleo do vórtice e a impureza for menor ou igual a dois parâmetros de rede.

O movimento do núcleo do vórtice acontece quando o sistema evolui para uma configuração final de equilíbrio mais estável. Depois que o sistema atingir uma energia próximo da energia da configuração de mínimo, o núcleo do vórtice mantém-se parado para os passos seguintes. Com isso, observamos que o núcleo do vórtice é atraído para $J'/J < 1$ (figura 4.3(a)) e repelido para $J'/J > 1$ (figura 4.4(a)). As figuras 4.3(b) e 4.4(b) são as configurações obtidas em simulações,

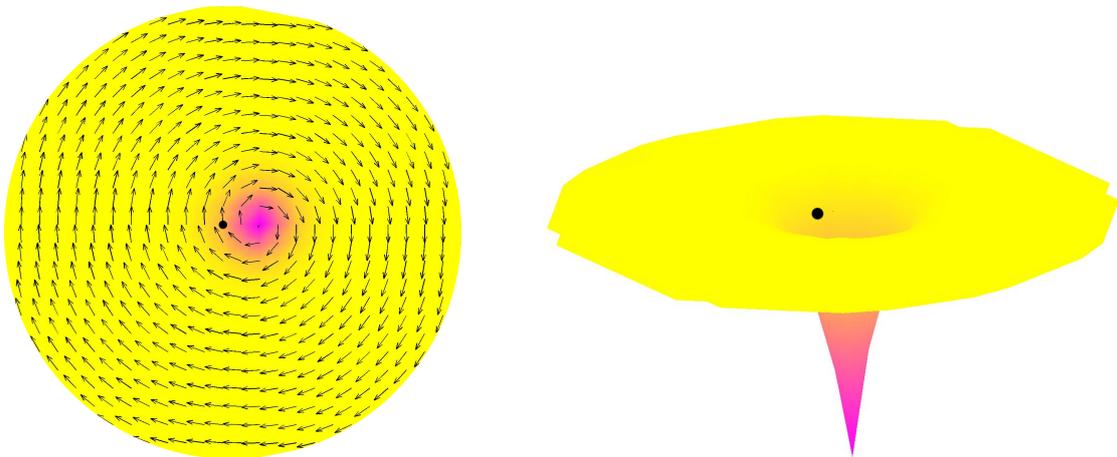
usando impureza atrativa e repulsiva respectivamente.



(a) Configuração do nanodisco plano xy.

(b) Configuração do nanodisco tridimensional.

Figura 4.3: Representação do estado fundamental de um nanodisco com diâmetro de $145nm$ e impureza magnética (ponto preto) com constante de acoplamento $J' = 0,5J$.



(a) Configuração do nanodisco plano xy.

(b) Configuração do nanodisco tridimensional.

Figura 4.4: Representação do estado fundamental de um nanodisco com diâmetro de $145nm$ e impureza magnética (ponto preto) com constante de acoplamento $J' = 1,5J$.

Já sabemos que o núcleo do vórtice interage com a impureza magnética e que essa interação ocorre quando a distância relativa é menor que dois parâmetros de rede. Logo, para estudar o modo girotrópico em nanodisco com impureza magnética, devemos escolher qualquer posição para a impureza próxima da trajetória do centro do vórtice no modo girotrópico.

5 MODO GIROTRÓPICO

Neste capítulo, discutiremos alguns resultados das simulações juntamente com uma breve revisão teórica. Mostraremos a formação do vórtice e o modo girotrópico para diversas configurações. Também será discutido as técnicas utilizadas para escolhermos as configurações iniciais do nanodisco.

O modo girotrópico em nanodiscos magnéticos pode ser excitado pela aplicação de um campo magnético externo. Em um nanodisco de Permalloy, a frequência do modo girotrópico depende da razão de aspecto l/d onde l é a espessura e d é o diâmetro. Para estudar o modo girotrópico, vamos considerar a configuração tipo vórtice com componente fora do plano [33].

5.1 Formação do Vórtice

O estado ou configuração de vórtice com magnetização fora do plano é observado em nanodiscos de Permalloy, pois a anisotropia magnetocristalina desse material é desprezível. Para estudar o estado fundamental foram feitas simulações para observar a configuração final de equilíbrio mais estável. As simulações tiveram dois tipos de configurações iniciais: em uma os spins de cada célula de trabalho eram escolhidos de forma aleatória e na outra os spins eram colocados na configuração de vórtice planar. Com isso, a equação de L.L.G é utilizada para se chegar a configuração de equilíbrio do sistema; foram usados os valores reais do Permalloy [24]. Inicialmente consideramos nanodisco com diâmetro $75nm$ e $10nm$ de espessura, constante de amortecimento de $\alpha = 0,05$ e incremento de tempo $\Delta\tau = 0.01$. Sabemos que a evolução do sistema com o termo de amortecimento, pode levar a uma configuração de um mínimo local ou global.

A configuração de equilíbrio para a configuração inicial aleatória pode ser observado na

figura 5.1(a). Essa configuração é conhecida na literatura como estado cebola. Já a configuração de equilíbrio para a configuração inicial tipo vórtice pode ser vista na figura 5.1(b).

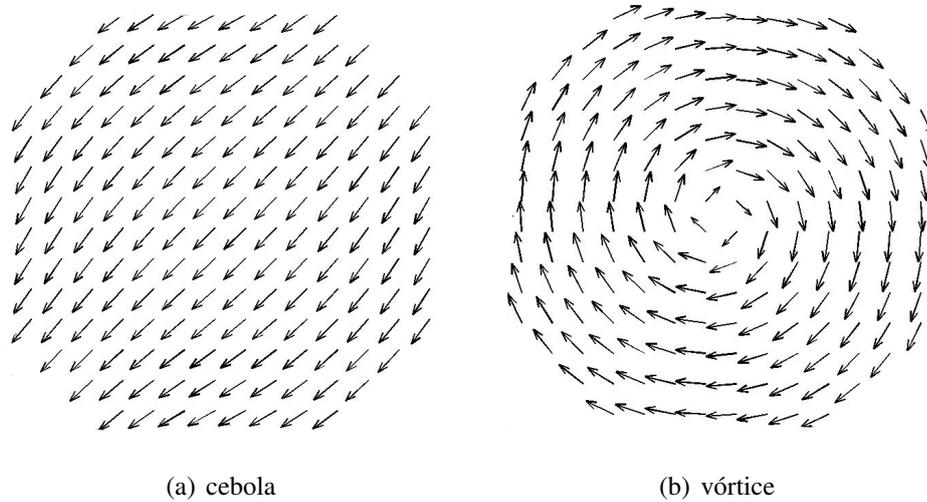


Figura 5.1: Configuração final de equilíbrio para um nanodisco com diâmetro $75nm$ e espessura $10nm$

Neste caso, observamos que a energia do estado cebola é a mais baixa. O comportamento da energia no decorrer do tempo está representado na figura 5.2.

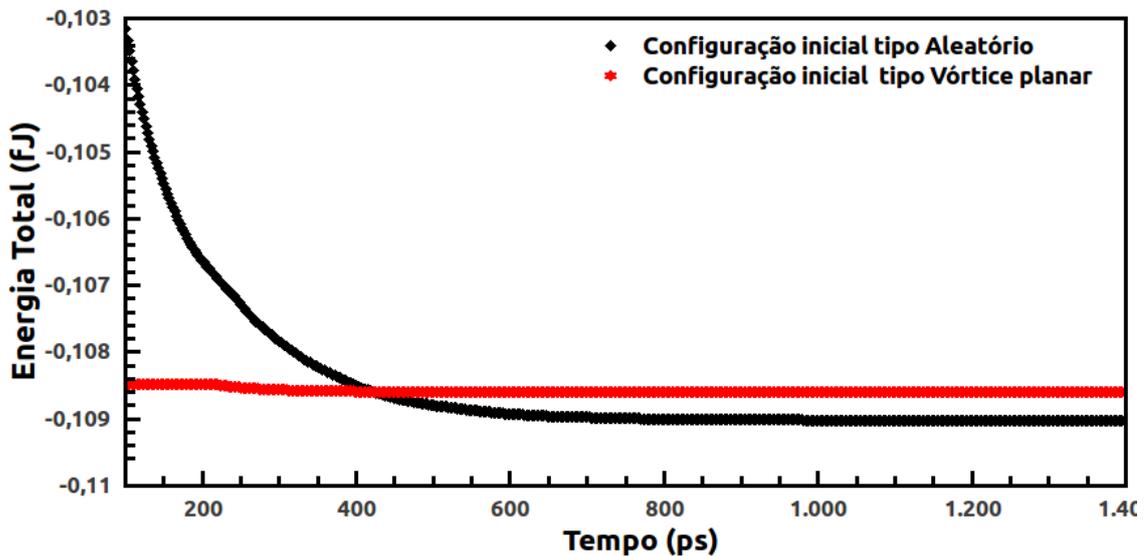
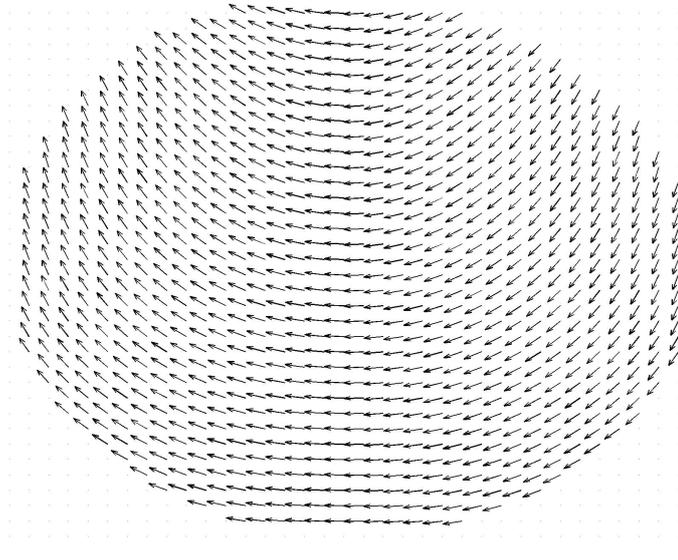


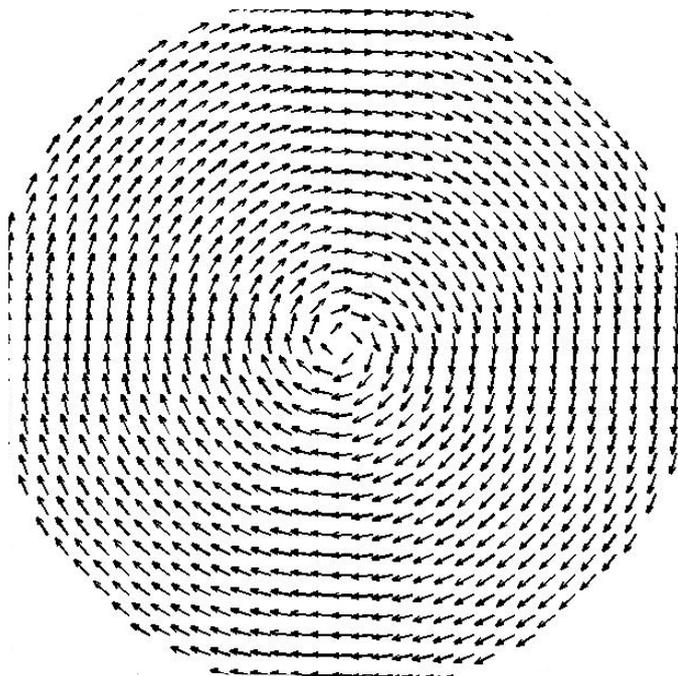
Figura 5.2: O gráfico da energia total (fJ) do nanodisco para cada tipo de configuração inicial.

No trabalho [24] foi mostrado que discos de Permalloy com diâmetros no intervalo $100nm \leq d \leq 400nm$ e espessura $10nm$ estão no estado de vórtice com magnetização fora do plano. Baseado nisso simulamos um outro nanodisco com as mesmas condições anteriores, apenas alterando o diâmetro para $175nm$. A configuração final de equilíbrio obtido para a configuração inicial aleatória é um pouco diferente do caso 5.1(a), onde encontramos o estado de meio

vórtice (figura 5.3(a)). Já a configuração de equilíbrio para a configuração inicial tipo vórtice planar é um estado de vórtice com magnetização fora do plano no centro, como mostra a figura 5.3(c).



(a) meio vórtice



(b) Configuração de vórtice com magnetização fora do plano no centro visto de cima.



(c) Configuração de vórtice com magnetização fora do plano no centro visto de lado.

Figura 5.3: Configuração final de equilíbrio para um nanodisco com diâmetro 175nm e 10nm de espessura, para configuração inicial tipo aleatória e vórtice planar

O comportamento da energia no decorrer do tempo é apresentado na figura 5.4.

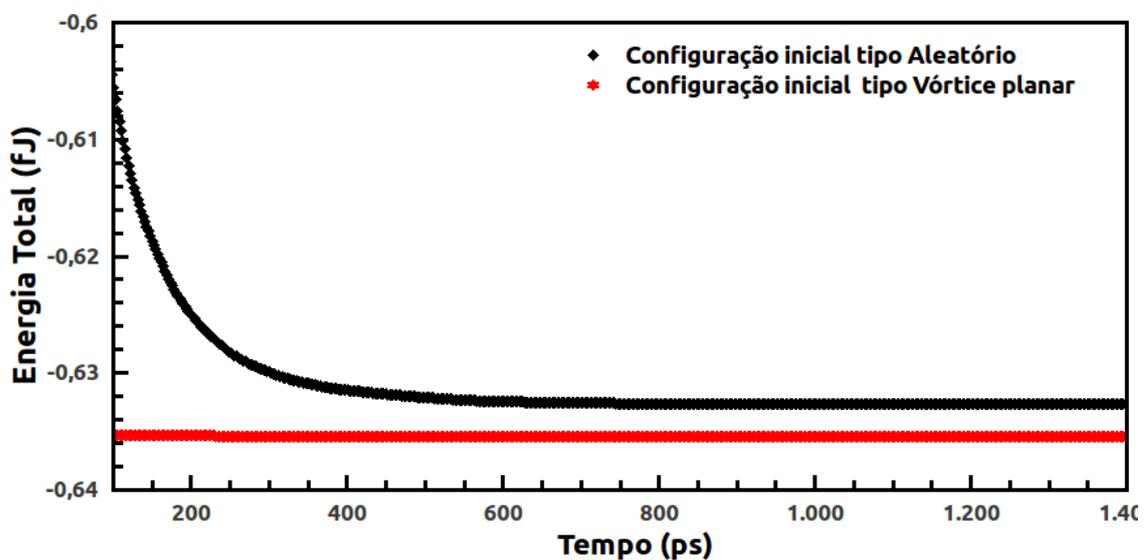


Figura 5.4: O gráfico da energia total (fJ) do nanodisco para cada tipo de configuração inicial.

Para estudar o modo girotrópico, utilizaremos nanodiscos com diâmetros no intervalo $100\text{nm} \leq d \leq 400\text{nm}$ e espessura 10nm , pois neste caso teremos o estado fundamental com configuração de vórtice fora do plano, que é de interesse para aplicações tecnológicas.

5.2 Dinâmica de Vórtices e Modo Girotrópico

O modo girotrópico em nanodiscos magnéticos vem sendo intensamente estudado nos últimos anos devido a possibilidade de aplicações tecnológicas [14, 15, 33, 34, 35, 36]. Estudos mostram que pequenas perturbações excitam o modo girotrópico. Para excitar o modo girotrópico utilizamos um campo externo senoidal aplicado no plano do disco na direção y , em

tesla[T], do tipo:

$$\vec{B}^{ext} = \hat{y}B_{0y} \cdot \sin(2\pi \cdot f_d \cdot \tau) \quad (5.2.1)$$

onde B_{0y} é a amplitude do campo externo, $f_d \approx 0.5 \cdot 10^9 [\tau^{-1}]$ frequência natural do disco e τ tempo computacional. A frequência natural possui uma dependência linear com a razão entre a espessura e o diâmetro do nanodisco l/r [37].

O campo externo \vec{B}^{ext} aplicado deve ser fraco para não aniquilar o núcleo do vórtice. O movimento do núcleo pode ser no sentido horário (SH) ou anti-horário (SAH), essa mudança no sentido do movimento está relacionada a polaridade do vórtice[38, 39, 40].

Para compreender o sentido do modo girotrópico, Thiele formulou uma teoria para explicar o movimento do núcleo, supondo que o módulo da velocidade seja constante e a trajetória não se deforma [41, 42]. A equação de movimento que descreve o modo girotrópico é conhecida como **equação de Thiele**[41, 43, 44], dada por

$$\vec{F} + \vec{F}_G + \vec{F}_D = 0 \quad (5.2.2)$$

onde \vec{F} é a força restauradora, \vec{F}_G é a força girotrópica e \vec{F}_D é a força de amortecimento.

Vamos discutir um pouco sobre a influência de cada força no modo girotrópico. Em primeira instância falaremos da força restauradora, que é uma força que aparece quando deslocamos o núcleo do vórtice do centro. Ao retirar o núcleo do centro estamos perturbando o sistema, modificando a sua energia. Com isso, o mesmo induz uma força central para voltar à posição de equilíbrio (figura 5.5(a)), que é dada por.

$$\vec{F} = -\nabla U \quad (5.2.3)$$

A energia potencial U que atua no núcleo do vórtice pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} U(\vec{r}) &= U(0) + U_{mag} + U_{ext} \\ &= U(0) + \frac{\kappa}{2} |\vec{r}|^2 - \mu (\hat{z} \times \vec{B}^{ext}) \cdot \vec{r} \end{aligned} \quad (5.2.4)$$

onde $U(0)$ é a energia potencial na posição zero, U_{mag} é a energia relacionado ao deslocamento do núcleo do vórtice do centro, onde o coeficiente κ é análogo à constante elástica na lei de Hooke, e por último a energia aplicada pelo campo externo, onde

$$\mu = \frac{2}{3} \pi c r_d l M_s$$

em termo da quiralidade c , raio do disco r_d , espessura l e da magnetização de saturação M_s .

Reescrevendo a equação (5.2.3) em termos das componentes X e Y , temos

$$\begin{aligned}\vec{F} &= \vec{F}_x + \vec{F}_y \\ &= -(\kappa|x| + \mu |x B^{ext}|)\hat{x} - \kappa|y|\hat{y}\end{aligned}\quad (5.2.5)$$

onde x e y são posições do centro do vórtice.

A segunda força é a girotrópica. Surge quando o núcleo do vórtice tem uma velocidade diferente de zero. Essa força é análoga à força magnética experimentada por uma carga em movimento num campo magnético. A mesma aponta para fora da trajetória, ver figura 5.5(b), e é dada por:

$$\vec{F}_G = \vec{G} \times \vec{V} \quad (5.2.6)$$

onde \vec{V} é a velocidade tangencial à trajetória e o \vec{G} é conhecido como girovetor.

O girovetor para um nanodisco de raio r_d e espessura l , é dado por

$$\vec{G} = -G\hat{z} = -\frac{2\pi q p l M_s}{|\gamma|} \hat{z} \quad (5.2.7)$$

onde q é carga topológica, p é a polaridade, M_s é a magnetização de saturação do nanodisco, γ é a razão giromagnética e \hat{z} é o versor normal ao plano do nanodisco. Agora vamos definir o sentido do girovetor, a direção é dada pelo versor \hat{z} . Como foi visto na seção 1.2.2, a carga topológica pode assumir qualquer valor pertencente a \mathbb{Z} , mas para $q = 1$ o sistema corresponde ao estado de menor energia, que será utilizado neste trabalho. O termo que indica o sentido de \vec{G} é a polaridade, quando $p = 1 \rightarrow \vec{G} = -G\hat{z}$, o girovetor está no sentido negativo de \hat{z} e para $p = -1 \rightarrow \vec{G} = G\hat{z}$, o girovetor está no sentido positivo de \hat{z} . O sentido da velocidade do vórtice é dado pela análise do produto vetorial entre \vec{G} e \vec{V} que resulta em \vec{F}_G (regra da mão direita), ver figura 5.5(b).

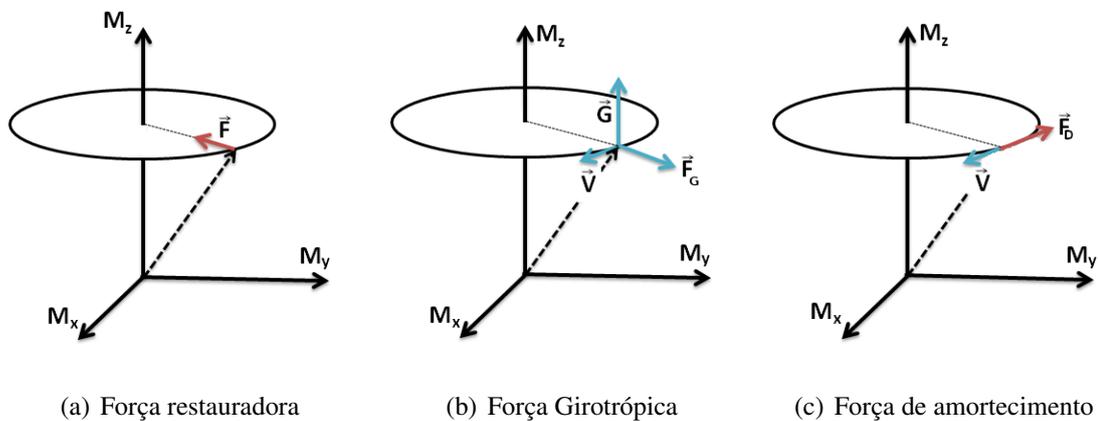


Figura 5.5: Representações das forças que atuam no núcleo do vórtice

A equação (5.2.2) descreve o modo girotrópico para sistema conservativo ou dissipativo. O termo responsável pela dissipação da energia é a força de amortecimento \vec{F}_D que é dado por

$$\vec{F}_D = D\vec{V} \quad (5.2.8)$$

onde D é um tensor de amortecimento, mas neste trabalho ele pode ser considerado como uma constante, definida da seguinte forma:

$$D = -\alpha_{LLG} \frac{\pi l M_s}{|\gamma|} \left[2 + \ln \left(\frac{r_d}{r_v} \right) \right] \quad (5.2.9)$$

onde α_{LLG} é o parâmetro de amortecimento da equação Landau-Lifshitz-Gilbert e r_v é o raio da órbita do núcleo do vórtice.

Essa força de amortecimento é análoga a força de atrito, pois o sentido da força é oposta ao movimento do núcleo do vórtice, ver figura 5.5(c).

A equação de Thiele sem o termo de amortecimento α_{LLG} , faz o núcleo do vórtice girar em torno de um ponto crítico em uma trajetória elíptica, ver figura 5.6(a). Sabemos que esse ponto crítico depende do valor do campo externo, ou seja, para campo externo nulo o ponto crítico coincide com o centro do disco e para campo externo diferente de zero, o ponto crítico depende da intensidade e da direção. Nesta caso, percebemos que o vórtice fica em uma trajetória fixa, isso acontece porque o sistema é conservativo. A energia inicial do sistema sofre uma pequena perturbação no momento em que aplicamos o campo externo para excitar o modo girotrópico. Depois de excitar o modo girotrópico a energia total não muda no tempo. O mesmo não acontece quando colocamos o termo de amortecimento α_{LLG} na equação de Thiele. O núcleo do vórtice tem uma tendência de perder energia no tempo, com isso o vórtice apresenta uma trajetória natural na forma de uma espiral em torno do ponto crítico, como mostra a figura 5.6(b).

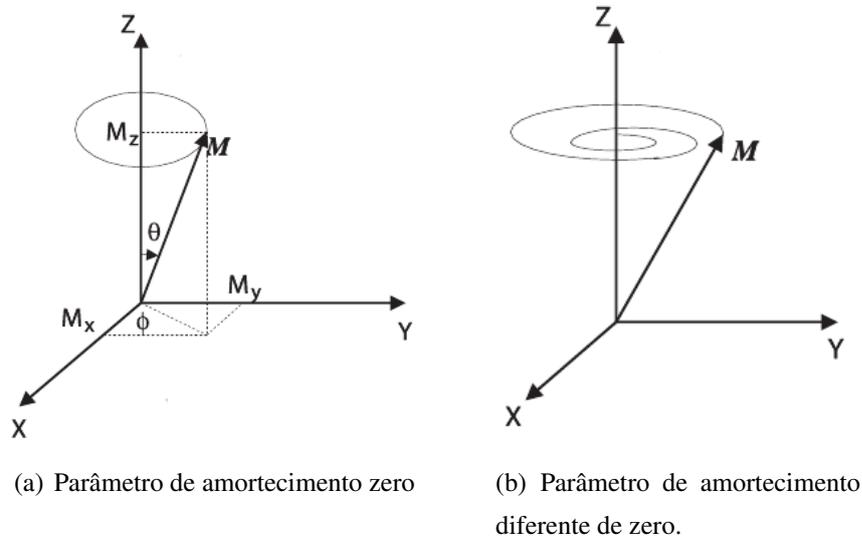


Figura 5.6: Representação da trajetória do núcleo do vórtice

Outro resultado que pode ser visto na equação de Thiele é que vórtices planares não exibem modo girotrópico, por causa de:

$$S^z = 0 \rightarrow p = 0 \rightarrow \vec{F}_G = 0$$

onde S^z é a componente fora do plano.

Como estamos interessado no modo girotrópico, vamos reescrever a equação (5.2.2) sem o termo de amortecimento, porque essa configuração apresenta uma trajetória bem comportada para o núcleo do vórtice.

$$\vec{F} + \vec{F}_G = 0 \quad (5.2.10)$$

Substituindo as equações (5.2.5) e (5.2.6) em (5.2.10), depois separando as componentes e isolando o termo velocidade, encontramos

$$V_x(\tau) = -\frac{\kappa y(\tau)}{G} \quad (5.2.11)$$

$$V_y(\tau) = -\frac{\kappa x(\tau) + \mu B^{ext}(\tau)}{G} \quad (5.2.12)$$

logo, a velocidade do núcleo do vórtice é dada por

$$\begin{aligned} \vec{V}_{vortice} &= V_x(\tau) \hat{x} + V_y(\tau) \hat{y} \\ \vec{V}_{vortice} &= -\frac{\kappa y(\tau)}{G} \hat{x} - \frac{\kappa x(\tau) + \mu B^{ext}(\tau)}{G} \hat{y} \end{aligned} \quad (5.2.13)$$

A equação (5.2.13) mostra como a velocidade do núcleo altera com aplicação de campo

externo. Essa equação é válida para campo aplicado na direção y . Como foi exposto antes, vamos aplicar um pulso de campo para excitar o modo girotrópico e em seguida este campo será desligado. Quando o campo é desligado teremos a equação que descreve a velocidade, dada por

$$\begin{aligned}\vec{V}_{vortice} &= V_x(\tau) \hat{x} + V_y(\tau) \hat{y} \\ \vec{V}_{vortice} &= -\frac{\kappa y(\tau)}{G} \hat{x} - \frac{\kappa x(\tau)}{G} \hat{y}\end{aligned}\quad (5.2.14)$$

O período T_v do movimento do núcleo do vórtice é definido por

$$T_v = \frac{2\pi r_v}{|V_{vortice}|} = \frac{2\pi\kappa}{G}\quad (5.2.15)$$

Chama-se frequência f_v o inverso do período:

$$f_v = \frac{G}{2\pi\kappa}\quad (5.2.16)$$

A frequência de ressonância do núcleo ω_v pode ser escrita como [27]

$$\omega_v = 2\pi f_v = \frac{G}{\kappa}\quad (5.2.17)$$

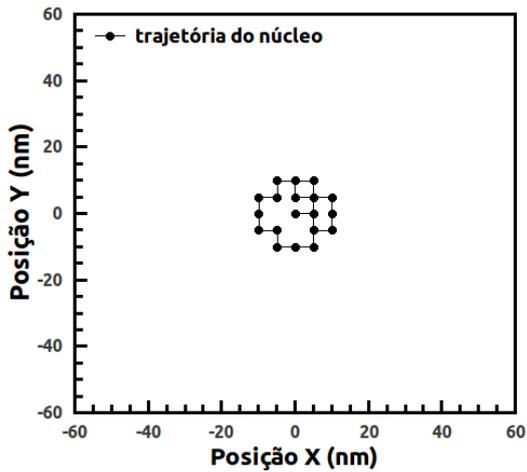
As condições acima são válidas quando a trajetória for determinada pelo balanço das forças girotrópica e restauradora, com força de amortecimento desprezível. A mesma possui uma dependência linear com a razão entre a espessura e o diâmetro do nanodisco (l/r_d) [12]. Para compreender a relação da frequência do modo girotrópico com o diâmetro, simulamos vários nanodiscos com espessura $10nm$ (2 camadas) e com os seguintes diâmetros (d) 125, 145, 175, 195, 225 e 275 [nm].

5.2.1 Movimento do Núcleo do Vórtice (Modo Girotrópico)

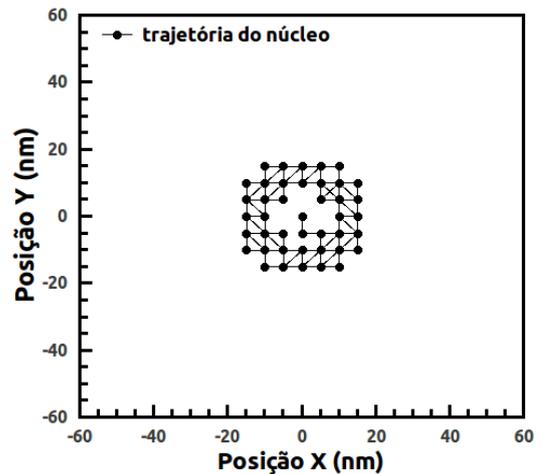
Para investigar o comportamento do núcleo do vórtice foram utilizados parâmetros do Permalloy ($Ni_{79}Fe_{21}$): constante de troca $A = 13 \times 10^{-12}[J/m]$, comprimento de troca $\lambda_{exc} = 5,3[nm]$, magnetização de saturação $M_S = 8,6 \times 10^5[A/m]$, parâmetro de rede da célula de trabalho $a = 5[nm]$ e uma razão $D/J = 0,0708$, onde D é o parâmetro da interação dipolar da célula de trabalho e J é a constante de acoplamento de troca entre as células de trabalho.

Para este estudo, utilizamos programa próprio em linguagem FORTRAN 90 [24]. Uma primeira análise foi sobre o comportamento do núcleo do vórtice em função do diâmetro dos nanodiscos. A trajetória observada para o núcleo do vórtice não é contínua, por causa da dis-

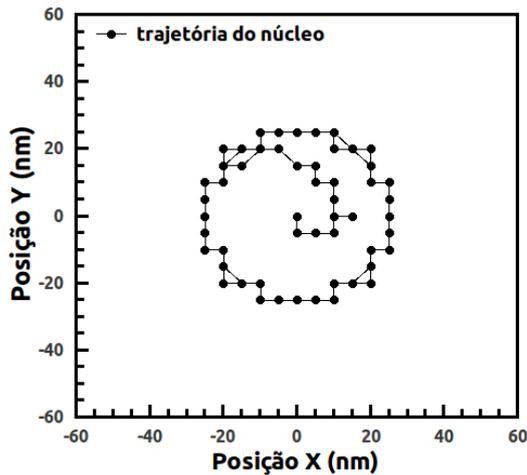
cretização da rede. Na figura 5.7, podemos observar que o raio r_v da trajetória do núcleo é proporcional ao diâmetro do nanodisco magnético. O modo girotrópico é no sentido anti-horário para os seis casos mostrados na figura 5.7. Esse sentido anti-horário é porque escolhemos uma polaridade positiva ($p = +1$), na configuração inicial tipo vórtice com componente fora do plano para o nanodisco.



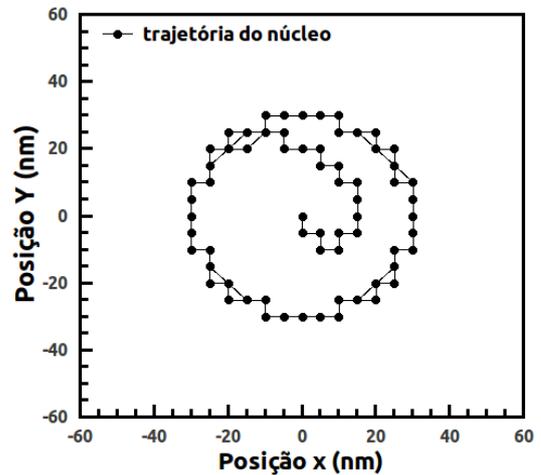
(a) Trajetórias do núcleo em um nanodisco com diâmetro $d = 125nm$



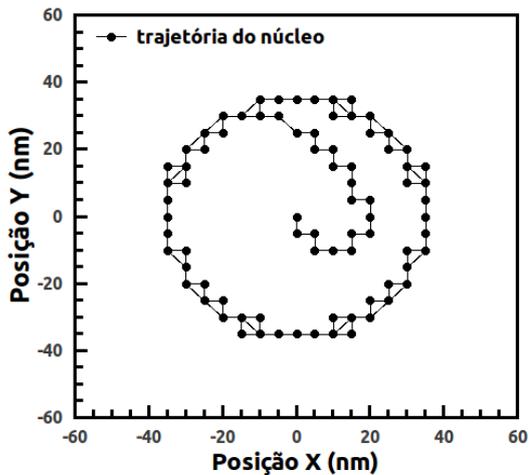
(b) Trajetórias do núcleo em um nanodisco com diâmetro $d = 145nm$



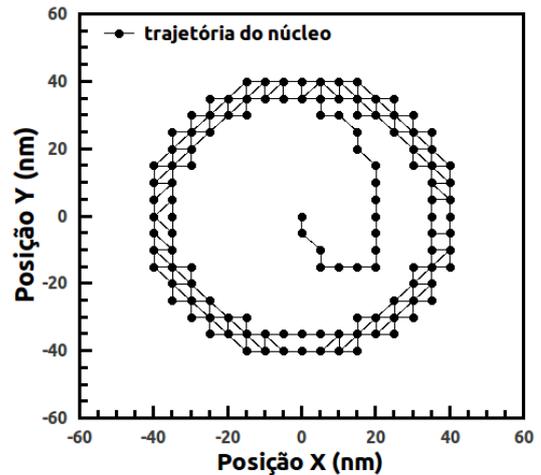
(c) Trajetórias do núcleo em um nanodisco com diâmetro $d = 175nm$



(d) Trajetórias do núcleo em um nanodisco com diâmetro $d = 195nm$



(e) Trajetórias do núcleo em um nanodisco com diâmetro $d = 225\text{nm}$



(f) Trajetórias do núcleo em um nanodisco com diâmetro $d = 275\text{nm}$

Figura 5.7: Representação da trajetória do núcleo do vórtice na camada mais externa, quando o modo girotrópico é excitado com campo externo $5mT$.

A figura 5.8 mostra a dependência do raio r_v da trajetória do vórtice com o diâmetro do nanodisco. Na figura representamos os pontos encontrados na simulação com triângulo vermelho. Ajustamos uma reta do tipo $aX + b$, onde $a = 0,20568$ e $b = -13,24693$. Logo, podemos dizer que esse comportamento é linear. Uma previsão teórica seria que para $d < 64[\text{nm}]$ não existiria modo girotrópico. Na referência [24], observou-se que a configuração de vórtice com uma magnetização fora do plano é dada como estado fundamental em nanodiscos magnéticos, quando o diâmetro do nanodisco pertencer ao intervalo $100[\text{nm}] < d < 400[\text{nm}]$. Para casos que $d < 100[\text{nm}]$ existe a configuração de vórtice, mas não representam um estado fundamental, ver figura 5.2.

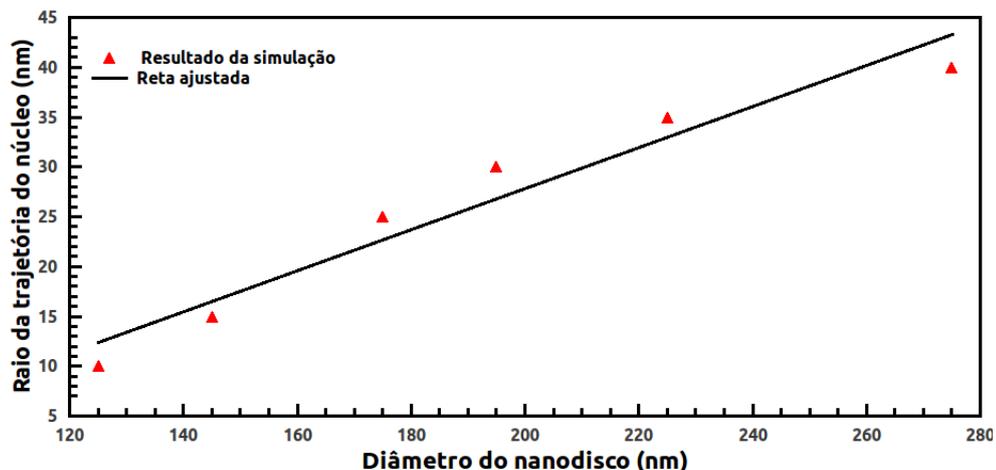
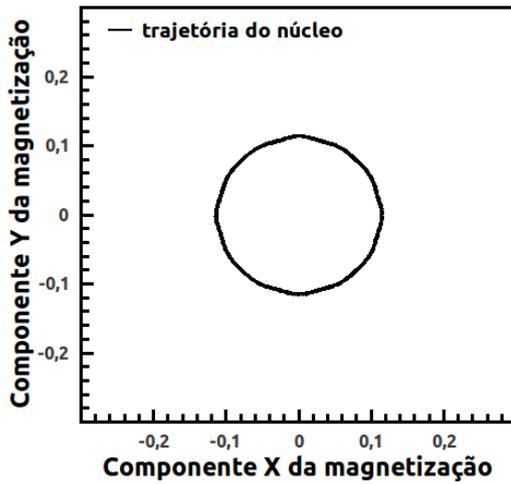
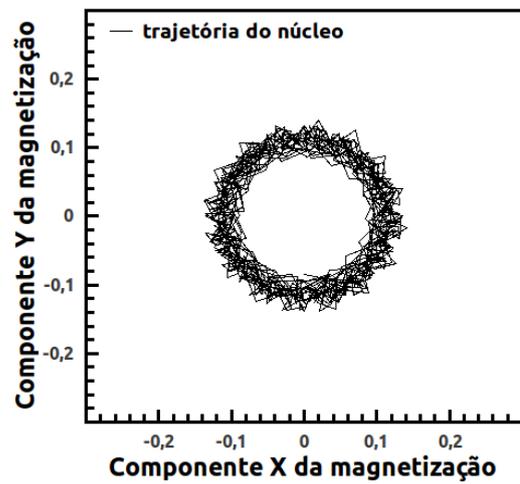


Figura 5.8: Representação da trajetória do núcleo do vórtice na camada mais externa, quando o modo girotrópico é excitado com campo externo $5mT$.

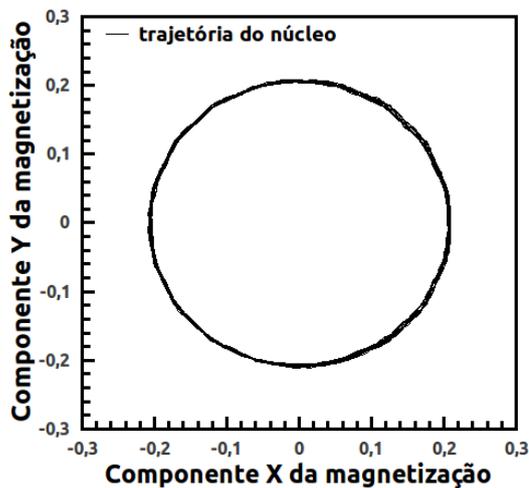
Para fazer uma análise mais detalhada do movimento, vamos observar o comportamento da média da magnetização na plano $m_x m_y$. Na figura 5.9, percebemos que a trajetória do núcleo do vórtice no espaço da magnetização é bem definida. Isso acontece porque a mesma não é discretizada.



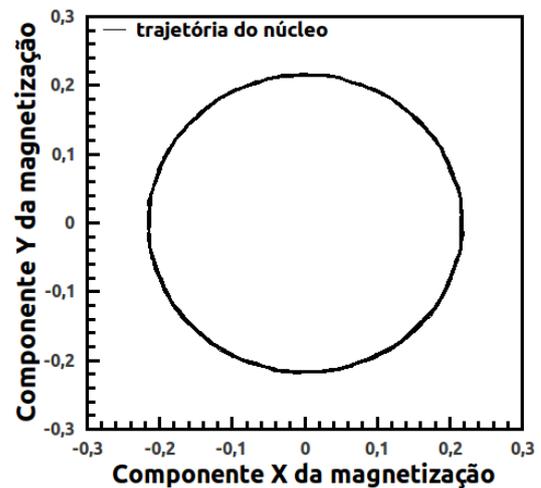
(a) Espaço das magnetizações em nanodiscos com diâmetro $d = 125nm$



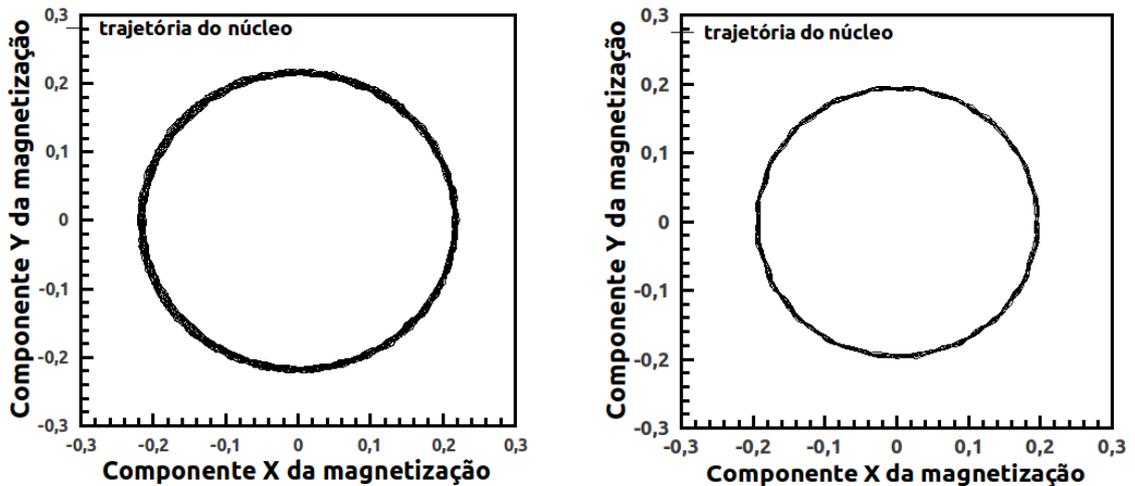
(b) Espaço das magnetizações em nanodiscos com diâmetro $d = 145nm$



(c) Espaço das magnetizações em nanodiscos com diâmetro $d = 175nm$



(d) Espaço das magnetizações em nanodiscos com diâmetro $d = 195nm$



(e) Espaço das magnetizações em nanodiscos com diâmetro $d = 225nm$

(f) Espaço das magnetizações em nanodiscos com diâmetro $d = 275nm$

Figura 5.9: Representação do comportamento da média da magnetização no plano $m_x m_y$, quando o modo girotrópico é excitado com campo externo $5mT$.

Agora vamos calcular a frequência do modo girotrópico em função do diâmetro d dos nanodiscos. Na figura 5.10 temos a representação da posição x e y , em $[nm]$, no tempo $[ns]$. A equação 5.2.16 mostra como encontrar o valor da frequência do modo girotrópico, com as constantes κ e G . Nós não vamos resolver a equação citada. O método utilizado para calcular a frequência é simples, podemos calcular a transformada de Fourier em um intervalo de tempo. O mesmo pode ser feito para magnetização m_x e m_y . Como exemplo, mostraremos a frequência calculada em um disco com $d = 275nm$, lembrando que a transformada pode ser feita para posição do núcleo ou com a magnetização.

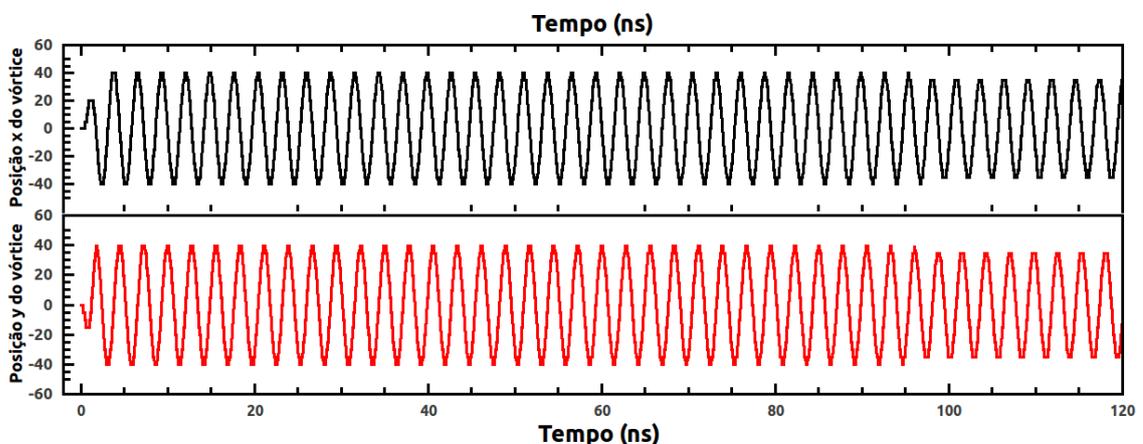


Figura 5.10: Posições do núcleo do vórtice nas direções x e y em função do tempo em nanodiscos com $d = 225nm$.

Observa-se que, a oscilação da posição x e y ocorrem de forma periódica e defasada de $\pi/2$. O mesmo é encontrado na oscilação da média da magnetização m_x e m_y . Na figura 5.11, calculamos as frequências para magnetização m_x e m_y . Esse resultado foi obtido com a transformada de Fourier em um intervalo de tempo 60 à 120[ns]. Pode-se ver que em ambos os casos, o pico da transformada de Fourier de m_x e m_y tem o mesmo valor.

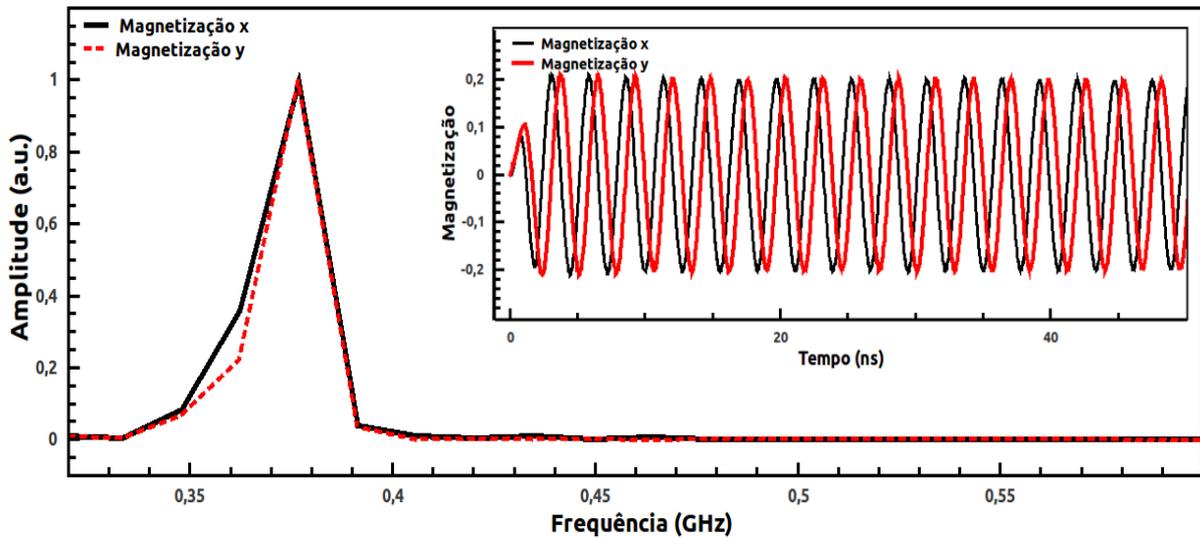


Figura 5.11: No quadro acima temos a magnetização x e y no tempo em um nanodisco com $d = 225nm$. Na outra parte, a frequência calculada usando a transformada de Fourier.

Então, podemos dizer que o espectro da f_v independe da escolha de x , y , m_x e m_y . Mas percebemos que o espectro da média da magnetização é mais definida que o espectro da posição, porque na média da magnetização tem-se uma "trajetória" contínuo. Para obter um resultado mais refinado, calcularemos a frequência do núcleo do vórtice utilizando m_x . Na tabela 5.1 apresentamos os valores da frequência com os seus respectivos diâmetros.

Diâmetro do nanodisco (nm)	Frequência do modo girotrópico (GHz)
125	0,76466
145	0,66811
175	0,57783
195	0,50941
225	0,44011
275	0,37093

Tabela 5.1: Tabela com os resultados das simulações em nanodisco com espessura 10nm.

A figura 5.12 mostra o comportamento da frequência do modo girotrópico em função do diâmetro. Na literatura encontramos gráficos que mostram a frequência do núcleo em função de β , onde $\beta = l/r_d$, essa relação é quase linear [24, 45, 46, 47]. Nesta dissertação, definimos

uma espessura constante ($l = 10[nm]$) para todos os diâmetros. Por sua vez, o valor de β é dado em função do raio do nanodisco.

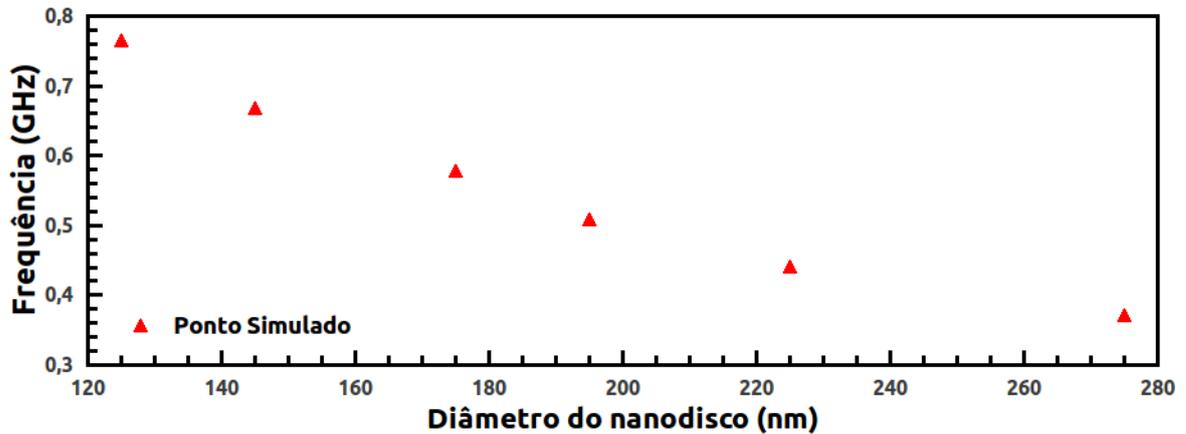


Figura 5.12: Gráfico da frequência do modo girotrópico em função do diâmetro do nanodisco de Permalloy-79 com espessura de 10 [nm].

Esse resultado está de acordo com as observações experimentais e com as previsões teóricas. Daí, podemos utilizar o raio da trajetória para definir a posição onde colocar a impureza magnética. Na seção 4.2, vimos que em alguns casos o núcleo do vórtice ficava preso no potencial da impureza. Nessa situação aplicaremos campo externo maiores para excitar o modo girotrópico.

6 INFLUÊNCIA DE IMPUREZAS MAGNÉTICAS NO MODO GIROTRÓPICO

Nos capítulos anteriores apresentamos todos os aparatos teóricos para o estudo da influência de impurezas magnéticas no modo girotrópico. Neste capítulo, apresentamos os resultados de simulações para este estudo. Nosso objetivo é investigar a influência da impureza magnética no modo girotrópico, com esse resultado compreenderemos como a mesma altera a frequência natural do modo girotrópico.

6.1 Modo Girotrópico com Impureza Magnética

Nesta seção, desenvolvemos um estudo do modo girotrópico na presença de impureza magnética. A referência [47] apresenta um resultado experimental em que a frequência do modo girotrópico na presença de impureza, f_{imp} , é maior que a frequência caso não houvesse impureza no nanodisco, f_{nat} , e que a frequência diminui com o aumento do diâmetro. Outro resultado apresentado é que a diferença entre as frequências ($\Delta f = |f_{imp} - f_{nat}|$), em função do diâmetro do nanodisco permanece aproximadamente constante.

Como foi apresentado no capítulo 4, vamos analisar a frequência do modo girotrópico com impurezas atrativas e repulsivas na mesma posição e estudar o efeito sobre a frequência quando colocamos a impureza numa distância, em relação ao centro do nanodisco (r_{imp} ¹), menor que o raio do Modo Girotrópico(r_{modo} ²) ou numa distância maior que r_{modo} .

¹ r_{imp} → posição da impureza em relação ao centro do nanodisco.

² r_{modo} → raio do Modo Girotrópico (distância do centro do nanodisco até o núcleo do vórtice no modo girotrópico).

6.1.1 Impureza Magnética numa Posição $r_{imp} < r_{modo}$

Apresentaremos a seguir os resultados das simulações em nanodisco com diâmetro $d = 225nm$ e espessura $10nm$ com impurezas $r_{imp} < r_{modo}$. A posição inicial da impureza magnética foi escolhida de acordo com o resultado obtido no capítulo 5, ficando a dois ou menos parâmetros de rede da trajetória.

As trajetórias no espaço das magnetizações encontradas na simulações para diversos valores de J' , que é a constante de acoplamento impureza-spin vizinho, podem ser vistas na figura 6.1.

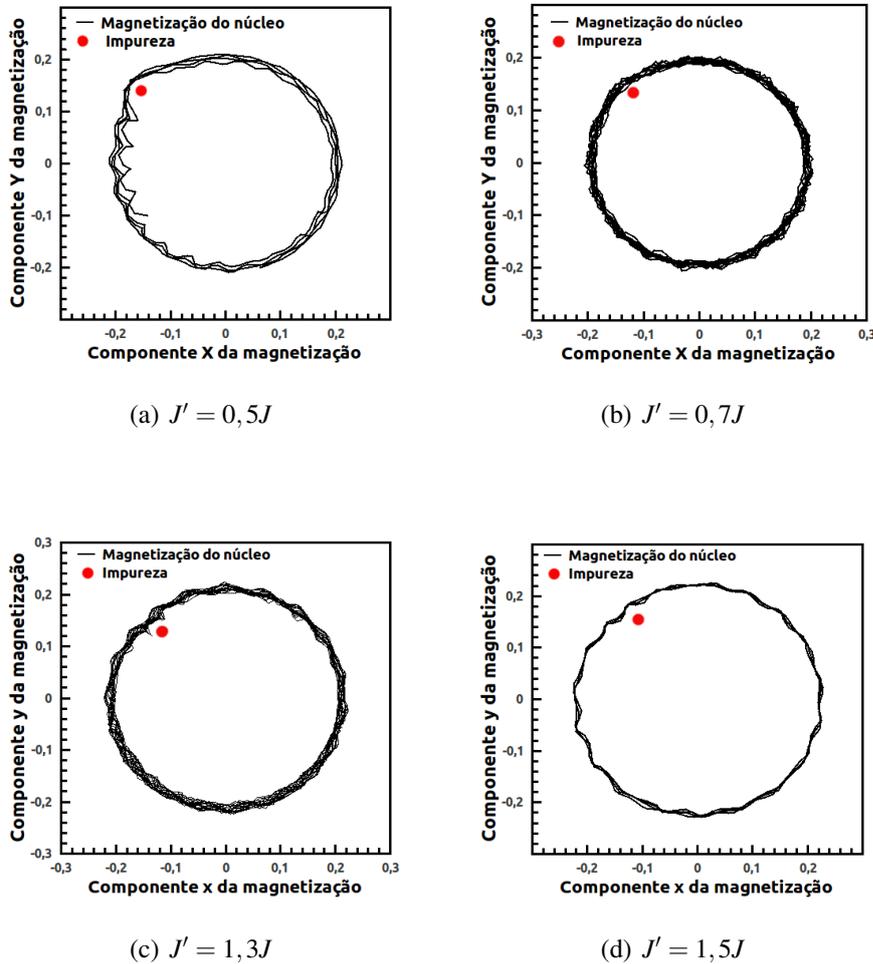


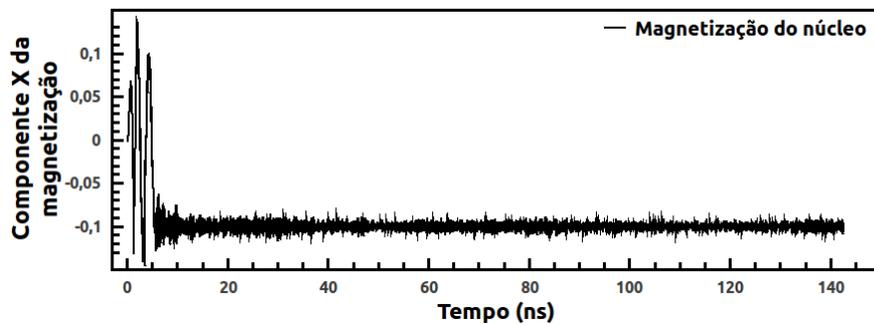
Figura 6.1: Resultado da simulação em nanodisco com diâmetro $d = 225nm$ e espessura $10nm$ na presença de impureza magnética.

Observamos que a trajetória do núcleo muda dependendo do tipo de impureza. Neste caso, quando $J' < J$ o núcleo do vórtice sofre uma força de atração. Isso acontece por que J' menores apresentam um potencial atrativo

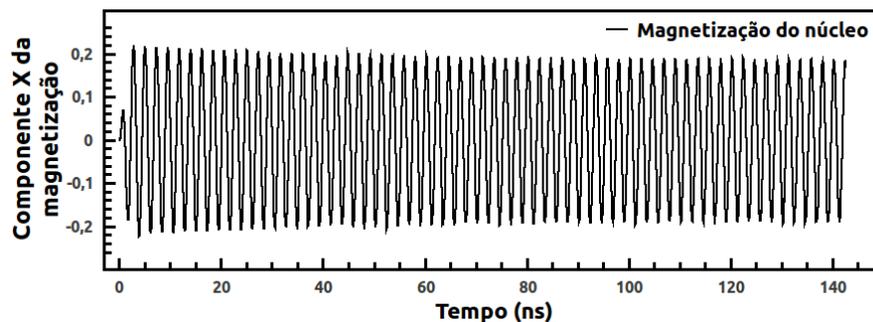
Na figura 6.1(a), temos o comportamento do modo girotrópico no espaço da magnetização, para uma impureza atrativa $J' = 0,5J$. Neste caso a impureza atrai o núcleo para dentro da trajetória e depois de um certo tempo o núcleo fica preso no potencial da impureza (ver figura 6.2(a)).

Na figura 6.1(d), temos o comportamento do modo girotrópico no espaço da magnetização, para uma impureza repulsiva $J' = 1,5J$. Aqui, observamos que o núcleo do vórtice é expulso para fora da trajetória natural.

Apresentamos na figura 6.2 o comportamento da componente M_x da magnetização média em função do tempo, para quatro tipos de impurezas: dois para impureza atrativa $J' = 0,5J$ e $J' = 0,7J$ e dois para impureza repulsiva $J' = 1,3J$ e $J' = 1,5J$.



(a) Impureza atrativa ($J' = 0,5J$)



(b) Impureza atrativa ($J' = 0,7J$)

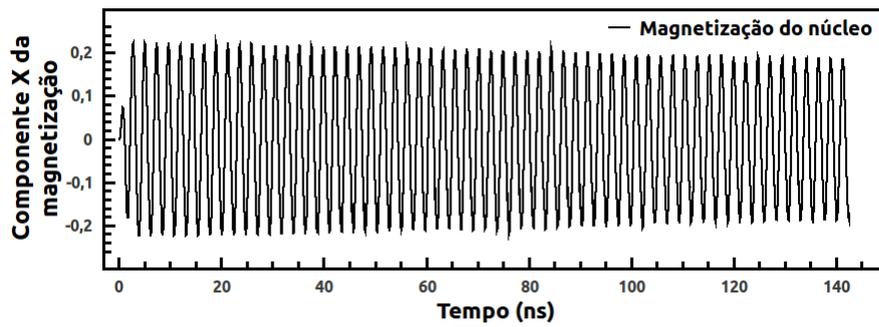
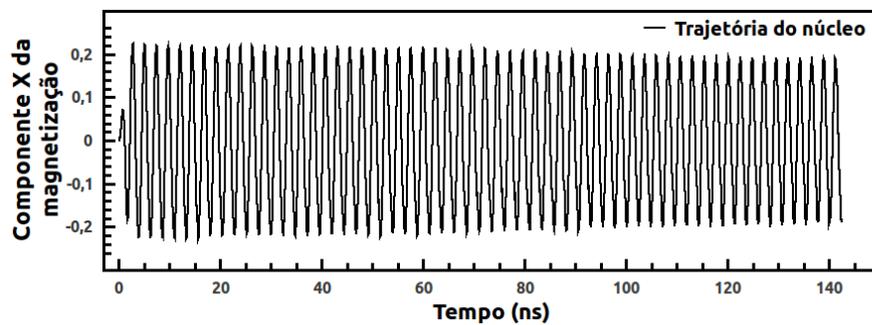
(c) Impureza repulsiva ($J' = 1,3J$)(d) Impureza repulsiva ($J' = 1,5J$)

Figura 6.2: Comportamento da magnetização na direção x (M_x) em função do tempo. Resultado da simulação de nanodisco com diâmetro $d = 225nm$ na presença de impureza magnéticas.

Na figura 6.2(a) com impureza atrativa ($J' = 0,5J$), o núcleo do vórtice fica preso no potencial da mesma. Nesta situação aplicamos um campo externo maior que $8mT$ para excitar o modo girotrópico em uma trajetória maior e com isso o número de voltas antes de ficar preso no potencial será maior, tornando-se possível o cálculo da transformada de Fourier. Para encontrar a frequência do modo girotrópico, calcularemos a transformada de Fourier.

Da transformada de Fourier para impureza $J' = 0,7J$, obtemos um pico bem definido em $f = 0,46485 GHz$, para impureza $J' = 1,3J$ temos um pico bem definida em $f = 0,43981 GHz$ e para $J' = 1,5J$ temos um pico bem definida em $f = 0,42604 GHz$. A figura 6.3 mostra o comportamento dos valores de cada frequência encontrada comparada com a frequência para o sistema puro que é $f = 0,44569 GHz$. Encontramos flutuações na frequência, devido à presença de impurezas atrativa e repulsiva, que está em concordância com os resultados experimentais da referência [47].

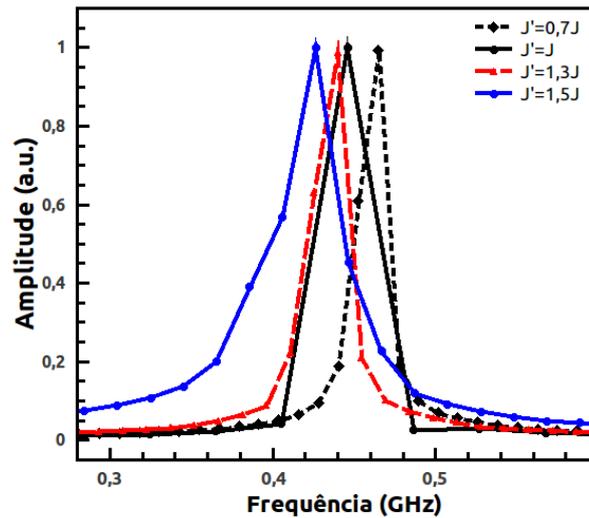


Figura 6.3: Frequência dos modos girotrópicos na presença de impurezas com $J' = 0,7J$, $J' = J$ (puro), $J' = 1,3J$ e $J' = 1,5J$.

Observamos que a frequência do modo girotrópico diminuiu com o aumento do valor da constante de acoplamento J' , quando colocamos uma impureza com $r_{imp} < r_{modo}$.

Na figura 6.4 apresentamos os resultados de simulações do comportamento da frequência do modo girotrópico na presença de impureza atrativa $J' = 0,7J$ em função do diâmetro do nanodisco, mantendo-se a espessura constante.

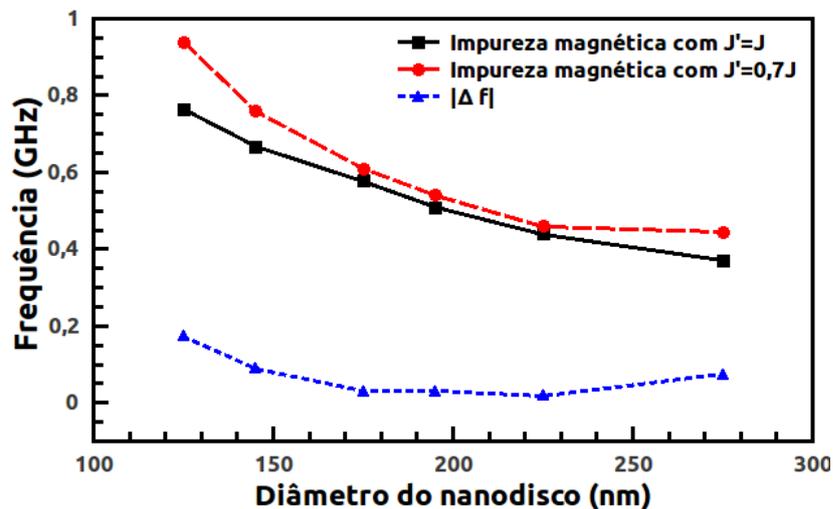


Figura 6.4: Comportamento da frequência em função do diâmetro do nanodisco com espessura constante de $10nm$

Os resultados obtidos apresentam o mesmo comportamento dos resultados experimentais da referência [47].

A figura 6.5(a) mostra o resultado experimental da ref.[47] da frequência em função do

diâmetro com espessura constante. O autor sugere uma diferença Δf constante que independe do diâmetro, onde define-se $\Delta f = |f_{max} - f_{ideal}|$ e além disso estima-se um valor de aproximadamente $0,20 \text{ GHz}$ para a diferença. Depois realiza uma simulação micromagnética (figura 6.5(b)) para comparar com seu resultado experimental.

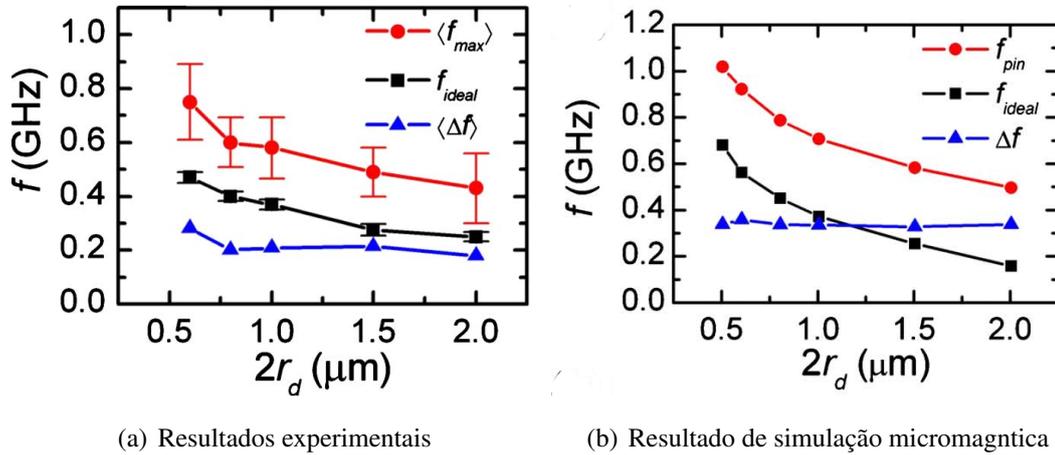


Figura 6.5: Resultado da comparação de um resultado experimental com uma simulação micromagnética, mostrando que a variação da frequência independe do diâmetro do disco. Figura retirado da referência [47].

Observamos que os nossos resultados simulados para impureza $J' < J$, estão mais coerentes com os resultados experimentais do que os resultados das simulações da referência [47].

Na figura 6.6 apresentamos resultados de simulações do comportamento da frequência do modo girotrópico na presença de impureza repulsiva $J' = 1,3J$, em função do diâmetro. Percebemos que para $J' = 1,3J$ a frequência do modo girotrópico fica menor que a frequência do modo girotrópico. Observamos que o fato da frequência ser menor, ela continua sendo uma função semelhante a do modo girotrópico sem impureza, mas transladada no eixo y .

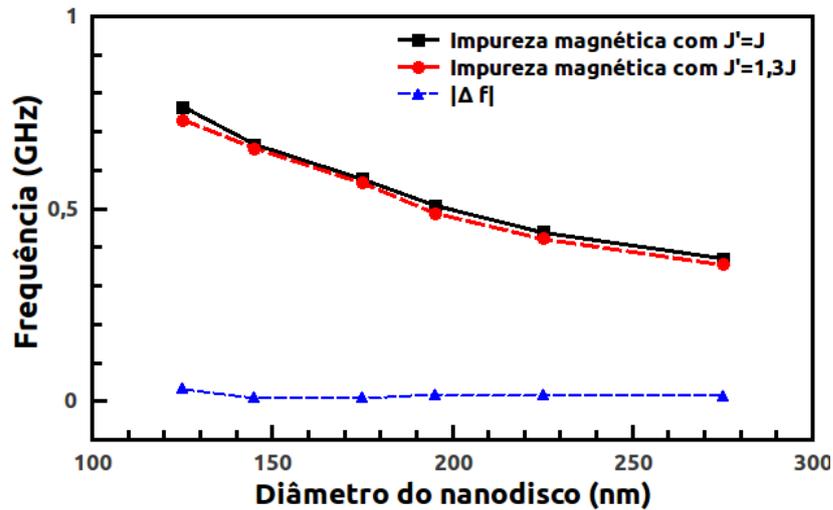
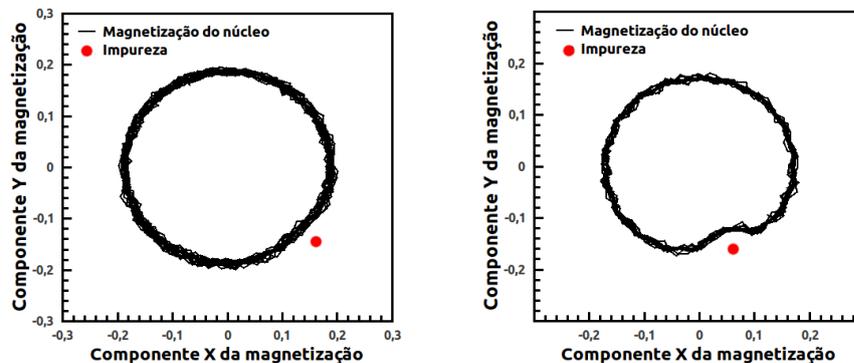


Figura 6.6: Comportamento da frequência em função do diâmetro do nanodisco com espessura constante de $10nm$

Com os resultados obtidos nas figuras 6.2, 6.4 e 6.6. Verificamos que $J' < J$ produz uma frequência maior que a natural do nanodisco sem impureza. No caso em que $J' > J$ produz uma frequência menor que a natural do nanodisco sem impureza.

6.1.2 Impureza Magnética numa Posição $r_{imp} > r_{modo}$

Aqui serão apresentados os resultados ainda não realizados experimentalmente, onde analisamos o comportamento da frequência com uma impureza numa posição $r_{imp} > r_{modo}$. A impureza magnética é localizada até dois parâmetros de rede fora da trajetória do núcleo. A figura 6.7 mostra o comportamento da magnetização no plano XY .



(a) $d = 195nm$ e $J' = 1,3J$

(b) $d = 195nm$ e $J' = 1,5J$

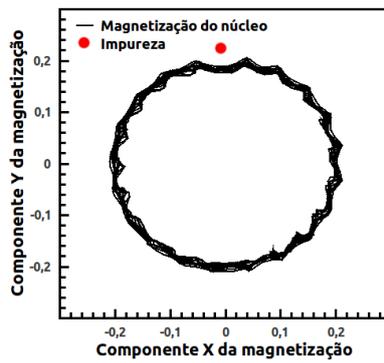
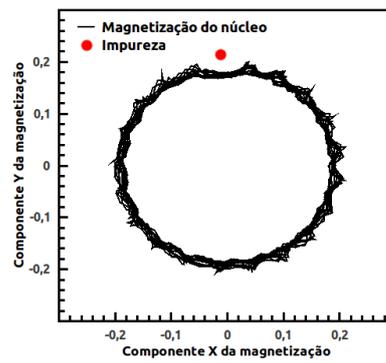
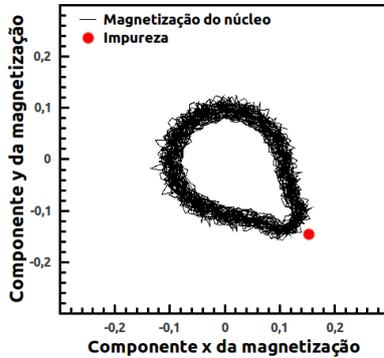
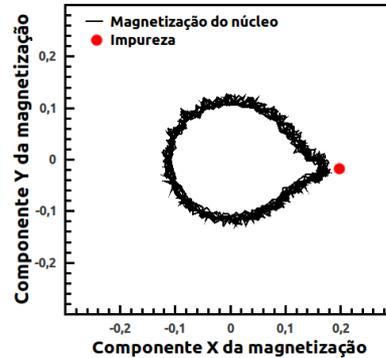
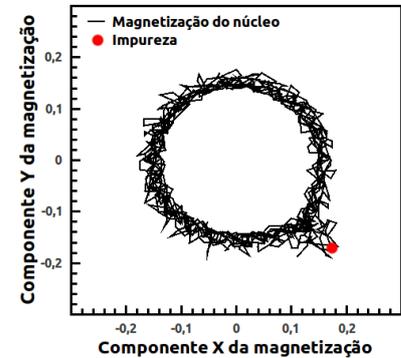
(c) $d = 275nm$ e $J' = 1,3J$ (d) $d = 275nm$ e $J' = 1,5J$

Figura 6.7: Resultado da simulação em nanodisco com espessura $10nm$ na presença de impureza magnética com $J' > J$.

A figura 6.8 apresenta a trajetória do núcleo do vórtice para valores de $J' < J$. A trajetória do vórtice é deformada na região próxima a impureza magnética. Essa deformação pode ser no sentido do centro do nanodisco para impureza repulsiva (Figura 6.7) ou no sentido oposto para impureza atrativa (Figura 6.8)

(a) $d = 145nm$ e $J' = 0,7J$ (b) $d = 175nm$ e $J' = 0,7J$ (c) $d = 195nm$ e $J' = 0,5J$

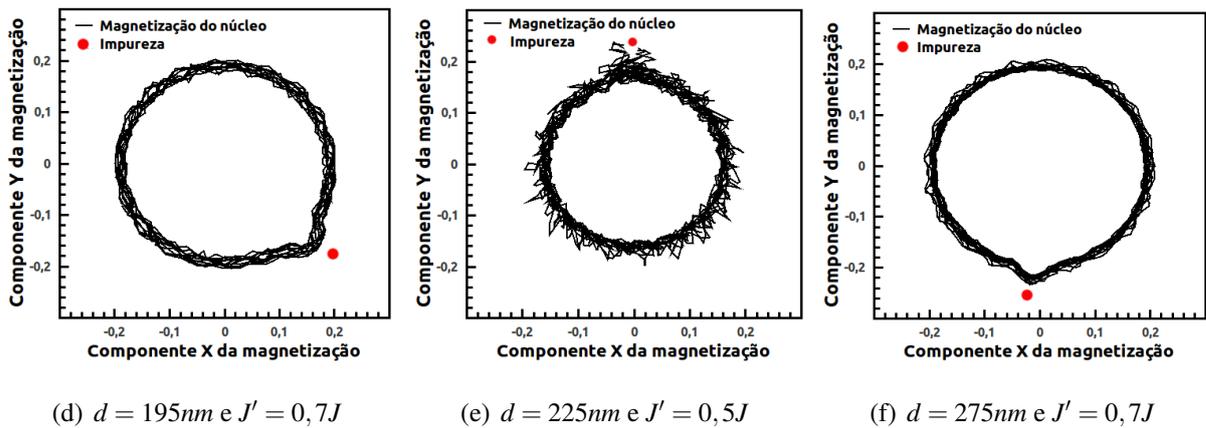


Figura 6.8: Resultado da simulação em nanodisco com espessura $10nm$ na presença de impureza magnética com $J' < J$.

Para verificarmos o comportamento da frequência do modo girotrópico na presença de impureza, vamos analisar a transformada de Fourier para a trajetória da magnetização em função do tempo, como foi feito nos casos anteriores. Teoricamente espera-se que a frequência do modo girotrópico seja menor que a natural do nanodisco para $J'/J < 1$ e maior que a natural do nanodisco para $J'/J > 1$. Esse resultado seria oposto da impureza localizada no interior da trajetória porque a interação do vórtice com a impureza tem um efeito contrário. Por exemplo, uma impureza atrativa no interior do movimento aumenta a velocidade do vórtice na região da impureza. A mesma na parte externa do movimento diminui a velocidade do vórtice na região da impureza.

Neste caso os resultados obtidos para as frequências são apresentados nas figuras a seguir.

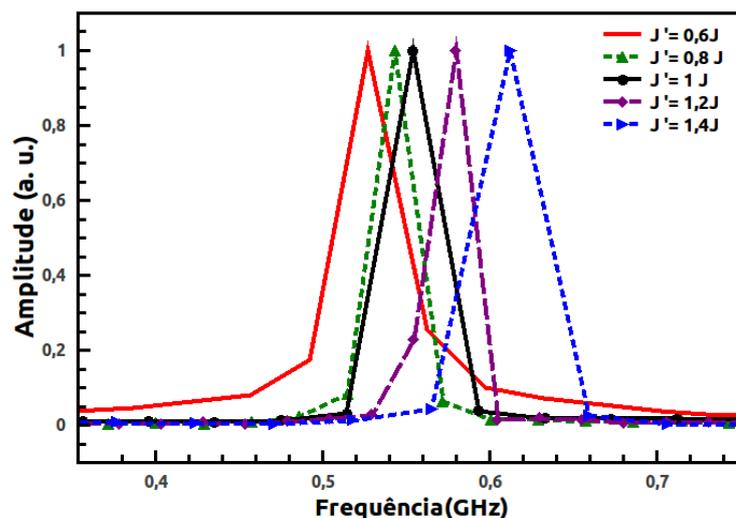


Figura 6.9: Transformada de Fourier da trajetória do vórtice com diferentes impurezas magnéticas e diâmetro $d = 175nm$.

Podemos ver que a transformada de Fourier para impureza $J' = 0,6J$, apresenta um pico bem definido em $f = 0,52674 \text{ GHz}$, para impureza $J' = 0,8J$ apresenta uma frequência bem definida em $f = 0,54312 \text{ GHz}$, para impureza $J' = J$ apresenta uma frequência bem definida em $f = 0,55358 \text{ GHz}$, para impureza $J' = 1,2J$ apresenta uma frequência bem definida em $f = 0,57941 \text{ GHz}$ e $J = 1,4J$ uma frequência bem definida em $f = 0,61209 \text{ GHz}$.

Comparando os resultados das figuras 6.3 e 6.9 concluímos que a frequência do modo girotrópico depende da localização da impureza na rede, em relação à trajetória no modo girotrópico e do tipo de impureza: atrativa ou repulsiva .

Na figura 6.10 podemos ver o resultado da simulação micromagnética em um gráfico, mostrando o comportamento da frequência em função do diâmetro do nanodisco. Observamos uma curva em uma posição abaixo da curva da frequência natural sem impureza, para impureza atrativa e uma curva acima no caso de impureza repulsiva.

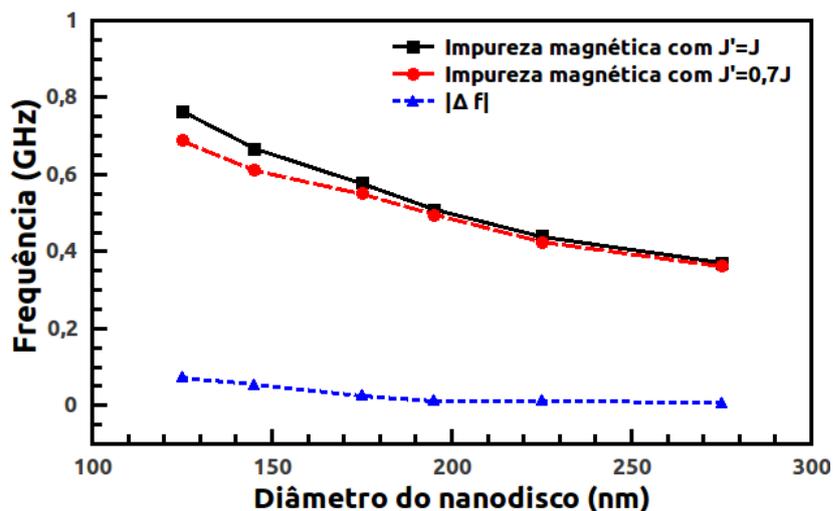


Figura 6.10: Comportamento da frequência do modo girotrópico para diferentes diâmetros e com impureza magnética $J' = 0,7J$.

Os resultados estão de acordo com as previsões, onde a frequência do modo girotrópico é menor que a frequência natural do nanodisco para valores de $J'/J = 1$.

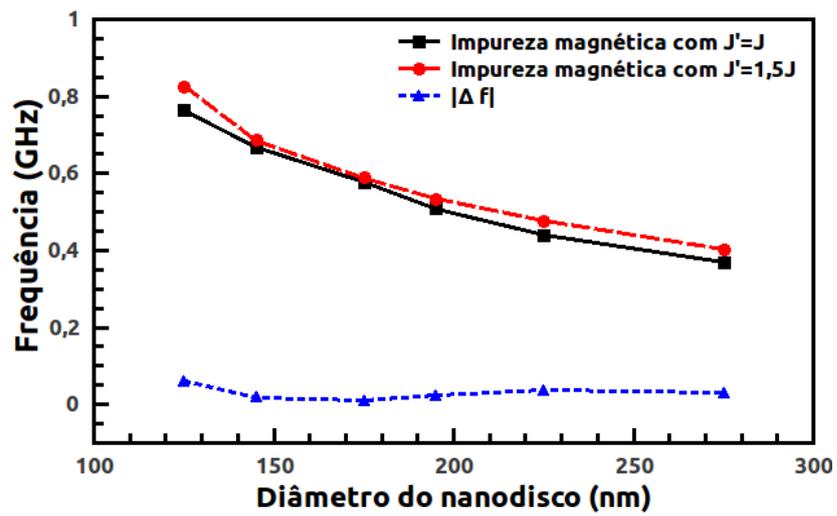


Figura 6.11: Comportamento da frequência do modo girotrópico para diferentes diâmetros e com impureza magnética $J' = 1,5J$.

Na figura 6.11 apresenta os valores das frequências do modo girotrópico para impurezas magnéticas $J' = 1,5J$.

7 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Nesta dissertação estudamos o efeito de impureza magnética no modo girotrópico. Particularmente, analisamos como uma única impureza magnética altera a frequência do modo girotrópico. Foram utilizadas as técnicas de simulações micromagnéticas para estudar o comportamento da frequência. Os resultados das simulações estão de acordo com resultados experimentais.

Nossos resultados mostram que a inclusão de uma impureza magnética na região do modo girotrópico altera a trajetória do núcleo, essa mudança assume formas diferentes dependendo do tipo de impureza. Para excitarmos o modo girotrópico em nanodisco com diâmetros menores foi necessário aplicação de campo externo maior. Isso ocorre devido a proximidade da impureza atrativa do vórtice.

Para observarmos a interação do vórtice com a impureza foram simulados vários tamanhos de nanodiscos. Vimos que o núcleo do vórtice aproxima da impureza atrativa, que são aquelas que assumem valores de $J' < J$. Percebemos que impurezas com valores de $J' < 0,6J$, ocorre um aprisionamento do vórtice na impureza magnética. O vórtice aprisionado na impureza apresenta uma inversão da polaridade. Essa inversão é uma forma do núcleo dissipar sua energia cinética para assumir a configuração do estado fundamental local.

Concluimos que impurezas atrativas aumentam a frequência do modo girotrópico, quando a mesma encontra-se em uma posição menor que o raio do movimento do núcleo do vórtice e diminui a frequência do modo girotrópico, para posições maiores que o raio do movimento do núcleo. A impureza repulsiva também afeta o modo girotrópico, mas o efeito da interação é contrário ao da impureza atrativa. Percebemos uma aumento da frequência do modo girotrópico para impureza localizada na parte externa do movimento do núcleo e uma diminuição na frequência do modo girotrópico para impureza dentro da trajetória do núcleo.

Pretendemos como extensão desse estudo, usar o modelo proposto de impurezas magnéticas, para estudar os efeitos dessas impurezas sobre o movimento de paredes de domínio em nanofios magnéticos. Acreditamos que o efeito Barkhausen pode estar relacionado com a presença de impurezas nos materiais.

APÊNDICE A –

A.1 Regras de Quantização

É importante escolher regras de quantização apropriadas para o momento angular orbital \vec{L} , para o spin \vec{S} e para o momento angular total \vec{J} de sistemas multieletrônicos, tais como os átomos complexos.

Para um átomo constituído de Z elétrons, essas regras de quantização, impostas a cada elétron, são:

$$\begin{aligned} L_i &= \sqrt{l_i(l_i + 1)} \hbar \quad ; \quad L_{iz} = m_{li} \hbar \quad ; \quad m_{li} = -l_i, \dots, +l_i \\ S_i &= \sqrt{s_i(s_i + 1)} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \quad ; \quad S_{iz} = m_{si} \hbar \quad ; \quad m_{si} = \pm \frac{1}{2} \\ J_i &= \sqrt{j_i(j_i + 1)} \hbar \quad ; \quad J_{iz} = m_{ji} \hbar \quad ; \quad m_{ji} = -j_i, \dots, +j_i \end{aligned}$$

Os valores totais dessas grandezas obtidas,

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^z \vec{L}_i \quad ; \quad \vec{S} = \sum_{i=1}^z \vec{S}_i$$

e

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^z \vec{J}_i = \sum_{i=1}^z (\vec{L}_i + \vec{S}_i) = \sum_{i=1}^z \vec{L}_i + \sum_{i=1}^z \vec{S}_i = \vec{L} + \vec{S}$$

A notação espectroscópica apropriada dos níveis de energia para sistemas multieletrônicos, é

$$n^{2s+1} L_j$$

Para o caso particular de átomos monoelétrônicos, tem-se $s = 1/2$, a representação acima para os níveis de energia, torna-se

$$^2 L_j$$

pois $2s + 1 = 2(1/2) + 1 = 2$, e os estados degenerados correspondentes a $m_s = \pm 1/2$, são denominados de estados de dubletos.

A.2 Operadores de Spin

As relações de comutação para operadores de spin S_u^a ($a = x, y, z$) não resultam simplesmente em números (multiplicados pelo operador identidade), mas ainda resulta em outros operadores de spin. Tais operadores obedecem às seguintes relações de comutação [48]:

$$[S_u^a, S_v^b] = i\hbar \varepsilon^{abc} \delta_{uv} S^k \quad (\text{A.2.1})$$

onde $(a, b, c = x, y, z)$, δ_{uv} é o delta de Kronecker, definido por:

$$\delta_{uv} = \begin{cases} 1, & \text{se } u = v \\ 0, & \text{se } u \neq v \end{cases}$$

ε^{abc} é o símbolo de Levi-Civita, definido por:

$$\varepsilon^{abc} = \begin{cases} 1, & \text{quando } abc \text{ estão numa ordem cíclica positiva} \\ 0, & \text{dois ou mais deles são repetidos} \\ -1, & \text{quando } abc \text{ estão numa ordem cíclica negativa} \end{cases}$$

O operador de Casimir é definido por $\vec{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ e comuta com qualquer uma das componentes de spin. Na álgebra dos operadores de spin, é muito útil considerarmos os dois operadores não hermitianos definidos abaixo [19]:

$$S^\pm = S^x \pm iS^y \quad (\text{A.2.2})$$

Os operadores de spin pode ser expresso em função do S^- e S^+ , poder ser encontrados facilmente as seguintes identidade.

Resolvendo o sistema com as duas eq.(A.2.2), obtemos

$$S_u^x = \frac{1}{2}(S_u^+ + S_u^-) \quad ; \quad S_u^y = \frac{1}{2i}(S_u^+ - S_u^-) \quad (\text{A.2.3})$$

Usando as regras de comutação, obtemos

$$[S_u^z, S_v^\pm]_- = \pm \hbar \delta_{uv} S_u^\pm \quad (\text{A.2.4})$$

$$[S_u^+, S_v^-]_- = 2\hbar \delta_{uv} S_u^z \quad (\text{A.2.5})$$

$$S_u^\pm S_u^\mp = \hbar^2 S(S+1) \pm \hbar S_u^z - (S_u^z)^2 \quad (\text{A.2.6})$$

O produto escalar $\vec{S}_u \cdot \vec{S}_v$ pode ser escrito da seguinte forma:

$$\vec{S}_u \cdot \vec{S}_v = \frac{1}{2} (S_u^+ S_v^- + S_u^- S_v^+) + S_u^z S_v^z \quad (\text{A.2.7})$$

usando

$$J_{uv} = J_{vu} \quad ; \quad J_{uu} = 0$$

A hamiltoniana para o modelo de Heisenberg é dada por

$$H = - \sum_{u,v} J_{uv} (S_u^+ S_v^- + S_u^z S_v^z) \quad (\text{A.2.8})$$

Esta forma torna-se especialmente útil. Usando (A.2.4) e (A.2.5), podemos facilmente mostrar que

$$[\vec{S}_u \cdot \vec{S}_v, \vec{S}_u]_- = i\hbar \vec{S}_u \times \vec{S}_v \quad (u \neq v) \quad (\text{A.2.9})$$

$$[\vec{S}_u \cdot \vec{S}_v, \vec{S}_v]_- = -i\hbar \vec{S}_u \times \vec{S}_v \quad (u \neq v) \quad (\text{A.2.10})$$

Daqui, concluímos que o spin total $\sum_u S_u$ comuta com o Hamiltoniano de Heisenberg e, portanto, é uma quantidade conservada.

APÊNDICE B –

B.1 Conservação do módulo de \hat{m}_i

A equação (L.L.G) que é usada na simulação micromagnética. Pode-se mostrar que essa equação preserva o módulo de \hat{m}_i , modificando apenas suas direções

$$\frac{d\hat{m}_n}{d\tau} = \hat{m}_n \times \vec{b}_n - \alpha \hat{m}_n \times (\hat{m}_n \times \vec{b}_n)$$

Tomando o produto escalar em ambos os membros com \hat{m}_n

$$\hat{m}_n \cdot \frac{d\hat{m}_n}{d\tau} = \hat{m}_n \cdot (\hat{m}_n \times \vec{b}_n) - \alpha \hat{m}_n \cdot [\hat{m}_n \times (\hat{m}_n \times \vec{b}_n)] \quad (\text{B.1.1})$$

Usando-se as seguintes identidades vetoriais

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}(\vec{A} \cdot \vec{B}) &= \frac{d\vec{A}}{d\tau} \cdot \vec{B} + \vec{A} \cdot \frac{d\vec{B}}{d\tau} \\ \frac{d}{d\tau}(\hat{m}_n \cdot \hat{m}_n) &= \frac{d\hat{m}_n}{d\tau} \cdot \hat{m}_n + \hat{m}_n \cdot \frac{d\hat{m}_n}{d\tau} = 2\hat{m}_n \cdot \frac{d\hat{m}_n}{d\tau} \end{aligned}$$

portanto,

$$\hat{m}_n \frac{d\hat{m}_n}{d\tau} = \frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} |\hat{m}_n|^2 \quad (\text{B.1.2})$$

O produto duplo vetorial

$$\begin{aligned} \vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) &= (\vec{A} \cdot \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C} \\ \hat{m}_n \times (\hat{m}_n \times \vec{b}) &= (\hat{m}_n \cdot \vec{b})\hat{m}_n - (\hat{m}_n \cdot \hat{m}_n)\vec{b} \end{aligned} \quad (\text{B.1.3})$$

E, por fim, o produto misto

$$\begin{aligned} \vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) &= \vec{B} \cdot (\vec{C} \times \vec{A}) = \vec{C} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) \\ \hat{m}_n \cdot (\hat{m}_n \times \vec{b}) &= \vec{b} \cdot (\hat{m}_n \times \hat{m}_n) = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.1.4})$$

Substituindo as identidades (B.1.2), (B.1.3),(B.1.4), na equação (B.1.1), obtem-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} |\hat{m}_n|^2 &= -\alpha \hat{m}_n \cdot [(\hat{m}_n \cdot \vec{b}) \hat{m}_n - (\hat{m}_n \cdot \hat{m}_n) \vec{b}] \\ &= -\alpha [(\hat{m}_n \cdot \vec{b})(\hat{m}_n \cdot \hat{m}_n) - (\hat{m}_n \cdot \hat{m}_n)(\hat{m}_n \cdot \vec{b})] = 0 \end{aligned}$$

Logo, os versores \hat{m}_n evoluem com módulo constante.

REFERÊNCIAS

- [1] Miguel A. Novak *Introdução ao Magnetismo* -IF-UFRJ
- [2] Helmut Kronmüller e Manfred Fähnle. *Micromagnetism and the Microstructure of Ferromagnetic Solids*. Cambridge University Press, New York, first edition, 2003.
- [3] Konstantin Y. Guslienko, Rafael Hernández Heredero, and Oksana Chubykalo-Fesenko. *Phys. Rev. B* **82**, 014402 (2010)
- [4] William D. Callister, Jr., *Materials Science and Engineering - An Introduction*. 7e, Wiley, 2007
- [5] M. R. Kim, S. Guruswamy, and K. E. Johnson, *J. Appl. Phys.*, **74** (7), 4646 (1993)
- [6] T. Shinjo; T. Okuno; R. Hassdorf; K. Shigeto e T. Ono. Magnetic Vortex Core Observation in Circular Dots of Permalloy. *Science*, 289(5481):930-932, 2000.
- [7] RAABE, J. et al. Magnetization pattern of ferromagnetic nanodisks. *Journal of Applied Physics*, v. 88, n. 7, 2000.
- [8] SCHNEIDER, M.; HOFFMANN, H.; ZWECK, J. Lorentz microscopy of circular ferromagnetic permalloy nanodisks. *Journal of Applied Physics Letters*, v. 77, n. 18, 2000.
- [9] PULWEY, R.; RAHM, M.; WEISS, D. Switching behavior of vortex structures in nano-disks. *IEEE Transactions on Magnetism*, v. 37, n. 4, 2001.
- [10] J. F. Smyth, et al, *J. Appl. Phys.* 69, 5262 (1991).
- [11] A. P. Guimarães. *Principles of Nanomagnetism* . Springer, 2009
- [12] R. L. Silva, "*Dinâmica de Spins em Estruturas Magnéticas Confinadas na presença de Defeitos: aplicações a nanodiscos magnéticos*", Dissertação de Doutorado, UFV (2009).
- [13] C. L. Chien, et al, "*Patterned Nanomagnets*", *Physics Today* **60**, 40 (2007)
- [14] CHOE, S.-B.; PADMORE, H. A.; STOHR, J. Vortex core-driven magnetization dynamics. *Science*, v. 304, p. 420, 2004.
- [15] NOVOSAD, V.; GUSLIENKO, K.; BADER, S. Magnetic vortex resonance in patterned ferromagnetic dots. *Physical Review B*, v. 72, n. 024455, 2005.
- [16] D. Toscano, S. A. Leonel, R. A. Dias, P. Z. Coura, B.V. Costa, *J. Appl. Phys.*, 109, 014301 (2011).
- [17] BUSCHOW, K.; BOER, F. *Physics of Magnetism and Magnetic Materials*. [S.l.]: Kluwer Academic Publishers, 2003.

- [18] Machado, Kleber Daum . *Teoria do Eletromagnetismo*. vol II, UEPG, 2002
- [19] A. R. Pereira e A. S. T. Pires, "*Teoria Quântica de Campos em Sistemas Magnéticos de Baixas Dimensões*", disponível em <<http://www.ufv.br/dpf/tqcsmbd.pdf>>, (2008).
- [20] N. A. Usov and S. E. Peschany, *J. Magn. Magn. Mater.* **118**, L290 (1993).
- [21] Ralph Skomski e Jian Zhou. *Advanced Magnetic Nanostructures*. Springer, New York, 2006.
- [22] P. J. Mohr, B. N. Taylor, and D. B. Newell. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2006. *Rev. Mod. Phys.*, 80:633-730, 2008.
- [23] WYSIN, G. M. Vortex-in-nanodot potentials in thin circular magnetic dots. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 22, n. 376002, 2010.
- [24] D.Toscano, "*Estudo via Simulação Computacional da Formação de Vórtice e do Modo Girotrópico em Nanodiscos*", Dissertação de Mestrado, UFJF (2011).
- [25] GILBERT, T. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 40, n. 6, p. 3443-3449, 2004.
- [26] BOYCE, W.; DIPRIMA, R. *Elementary differential equations and boundary value problems*. 6. ed. [S.l.]: John Willey Sons, 1997.
- [27] F. A. Apolonio, "*Um Modelo Para Defeitos Estruturais em Nanomagnetos*", Dissertação de Mestrado, UFV (2010).
- [28] F. A. Apolonio, W. A. Moura-Melo, F. P. Crisafuli, A. R. Pereira, and R. L. Silva, *J. Appl. Phys.*, **106**, 084320(2009)
- [29] A.R. Pereira, S.A. Leonel, P.Z. Coura, and B.V. Costa, *Phys. Rev. B* 71, 014403 (2005).
- [30] A. R. Pereira, *Phys. Rev. B* 71, 224404 (2005)
- [31] A. R. Pereira, et al, *J. Appl. Phys.* textbf101, 034310 (2007)
- [32] D. Toscano, S. A. Leonel, R. A. Dias, P. Z. Coura, B.V. Costa. *J. Appl. Phys.*, **109**, 076104 (2011).
- [33] C. L. Chien, F. Q. Zhu, and J.-G. Zhu, *Phys. Today* 06, 40 (2007).
- [34] M. Schneider, H. Hoffmann, and J. Zweck, *Applied Phys. Letters* 77 18 (2000).
- [35] R. Pulwey, M. Rahm, J. Bberger, and D. Weiss, *IEEE Trans. Magn.* 37 (2001).
- [36] M. Schneider, H. Hoffmann and J. Zweck, *Appl. Phys. Lett.* 77, 2909 (2000).
- [37] V. Novosad, et al, *Phys. Rev. B* 72 024455 (2005).
- [38] CHOE, S.-B.; PADMORE, H. A.; STOHR, J. Vortex core-driven magnetization dynamics. *Science*, v. 304, p. 420, 2004.

- [39] WAEYENBERGE, B.; PUZIC, A.; STOLL, H. Magnetic vortex core reversal by excitation with short burst of an alternating field. *Nature*, v. 444, n. 05240, p. 461-464, 2006.
- [40] PARK, J.; EAMES, P.; CROWELL, P. Imaging of spin dynamics in closure domain and vortex structures. *Physical Review B*, v. 67, n. 020403, 2003.
- [41] THIELE, A. Steady-state motion of magnetic domains. *Physical Review Letters*, v. 30, n. 6, 1973.
- [42] THIELE, A. Applications of the gyrocoupling vector and dissipation dyadic in the dynamics of magnetic domains. *Journal of Applied Physics*, v. 45, n. 1, 1974.
- [43] D. L. Huber, *Phys. Rev. B* 26, 3758 (1982).
- [44] K. Yu. Guslienko, B. A. Ivanov, V. Novosad, Y. Otani, H. Shima, and K. Fukamichi, *J. Appl. Phys.* 91, 8037 (2002).
- [45] ZASPEL, C.; IVANOV, B.; CROWELL, P. Excitations in vortex-state permalloy dots. *Physical Review B*, v. 72, n. 024427, 2005.
- [46] GUSLIENKO, K.; HAN, X.; BADER, S. Magnetic vortex core dynamics in cylindrical ferromagnetic dots. *Physical Review Letters*, v. 96, n. 067205, 2006.
- [47] R. L. Compton, T. Y. Chen and P. A. Crowell, *Phys. Rev. B*, **81**, 144412 (2010).
- [48] NOLTING, W.; RAMAKANTH, A. *Quantum Theory of Magnetism*. [S.l.]: Springer, 2009.