

Universidade Federal de Juiz de Fora
Pós-Graduação em Ciências Exatas
Doutorado em Física

DAMIÃO DE SOUSA VIEIRA JÚNIOR

Estudo Via Simulação Computacional do
Comportamento da Magnetização de Nanoilhas
Ferromagnéticas Elípticas

Juiz de Fora

Fevereiro de 2016

DAMIÃO DE SOUSA VIEIRA JÚNIOR

**Estudo Via Simulação Computacional do
Comportamento da Magnetização de Nanoilhas
Ferromagnéticas Elípticas**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação
em Física da Universidade Federal de Juiz de Fora,
como requisito parcial para obtenção do título de
Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel

Co-orientador: Prof. Dr. Rodrigo Alves Dias

Juiz de Fora

Fevereiro de 2016

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE
TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO,
PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Dedicatória

Este trabalho é dedicado àqueles para os quais não há palavras para agradecer por tudo que tenho e pelo que sou, meus pais

Maria Thereza da Silva Ferreira e

Damião de Sousa Vieira (*in memoriam*).

Agradecimentos

- A meus pais não há palavras para agradecer, por isso esta tese é dedicada a eles;
- Às mulheres da minha vida, Elaine, Léia e Ísis; e ao nosso anjo João Pedro, por vocês existirem e estarem sempre a meu lado. Essa vitória é nossa;
- Ao professor Sidiney de Andrade Leonel, pela orientação sempre segura e tranquila que me possibilitou chegar até aqui. Por toda a atenção, liberdade, confiança e amizade que me foram dadas. E especialmente pela paciência e dedicação ao nosso trabalho. Muito obrigado por tudo;
- Ao Professor Rodrigo Alves Dias, por toda a atenção e colaboração no desenvolvimento do código computacional, dicas e ideias importantes, além da amizade e companheirismo em todos os momentos desse trabalho. Sem o seu convite para o ingresso no programa, esta tese não existiria;
- Aos professores Pablo Zimmermann Coura e Fernando Sato pelas discussões e sugestões durante todos esses anos, além do perfeito suporte técnico realizado pelo Prof. Sato no laboratório de simulação, permitindo a realização das incontáveis simulações realizadas durante este trabalho;
- Ao colega Dr. Danilo Toscano por toda a ajuda com o código computacional e em tudo mais que precisei;
- Ao colega José Henrique por toda ajuda e dica em processos práticos durante todo esse tempo;
- Ao Domingos pela sua competência e dedicação na secretaria da Pós-Graduação em Física;

- Aos professores Afrânio e Lucas Mól pelas dicas e colaborações a este trabalho e pela pronta disponibilidade em participar de minha banca;
- À Pós-Graduação em Física da UFJF pelo apoio financeiro na participação em eventos;
- À Diretoria Geral e à Diretoria de Pesquisa e Pós-Graduação do IF Sudeste MG - Câmpus Rio Pomba, pelo apoio financeiro e pela oportunidade do afastamento das minhas atividades docentes e dedicação integral a este trabalho por um ano;
- Aos companheiros de trabalho do IF Sudeste MG - Câmpus Rio Pomba, Ruy, Geraldo, Fernando, Roberto, Raquel, Silvana, Silder, Woton, ... , pelo incentivo e amizade. Perdoem-me os que esqueci de citar pois, com a graça de Deus, são muitos companheiros;
- Aos colegas da Pós-Graduação, Danilo, Zé Henrique, Vanessa, Geraldo, Jéferson, Diegão, Douglas, Éverton , Josiel, Alisson,...;
- À minha grande família, Sô Tião, Dona Eva, Vó Maria, Zezé da Pedra Grande, Marisa, Driano, Ângela, Gugu, Tatá, Emerson, Rosa, Jaqueline, Sérgio, Juscelino, Juliano,....., sempre de braços abertos e disponíveis “pro que der e vier”. Muito obrigado pelos incontáveis momentos de apoio e descontração;
- Aos Professores Hans-Dieter Pfannes e Roberto Paniago, pela aceitação e excelente orientação que tive enquanto aluno da Pós-Graduação em Física da UFMG. Além das cartas de recomendação que possibilitaram a continuação de meu doutorado na UFJF;
- Aos eternos companheiros da Física, que mesmo fisicamente distantes no presente contribuíram expressivamente para a realização deste trabalho, devido a seus sucessos profissionais e aos inquebráveis laços de amizade que construímos em uma vida acadêmica juntos: Prof. Carlos (Magneto), Prof. Mário (Ripa), Prof. Marcos (Marquim), Prof. Faissal (Ptibul), Prof. Mól, Prof. Rodrigo (Pop Star), Prof. Mikita, Prof. Gustavo (Chapéu), Prof. Amorim (Sebastião), Prof. Edinei (Zezé), Profª Celimar, Prof. Fernando (Linguiça), Prof. Joaquim (Quincas), Prof Lauro (Bahia 1), Prof. Bráulio (Bráulio), Prof. Márcio (Ceará), Prof. Edson (Bruto),

- À Pós-Graduação em Física da UFMG, onde iniciei e cursei as disciplinas obrigatórias do curso de doutorado;
- Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela concessão da bolsa de estudos na fase inicial (UFMG) de meu curso de doutorado;
- A todos que porventura, eu tenha me esquecido de mencionar, mas que direta ou indiretamente contribuíram para a elaboração desta tese;
- A Deus, por criar o Existir, nos dando um número infinito de questões a responder e permitindo nossa infundável busca pela felicidade. Muito obrigado por TUDO! Sua presença constante ao meu lado é indiscutível.

Resumo

O contínuo desenvolvimento das técnicas de fabricação de estruturas em escala nanométrica, com considerável precisão e reprodutibilidade, tem permitido e estimulado a investigação científica em torno das propriedades básicas e novas aplicações tecnológicas desses sistemas. Especialmente a partir dos anos 90, é crescente o interesse da comunidade científica no comportamento de sistemas magnéticos nano-estruturados. Nestes, a quebra da simetria espacial devido às pequenas dimensões faz com que exibam comportamentos completamente distintos dos observados em amostras macroscópicas. A anisotropia de forma resultante das interações clássicas entre os dipolos magnéticos permite a formação de estruturas magnéticas exóticas em nanomagnetos como vórtices, skyrmions, paredes de domínio individuais e, até mesmo, excitações topológicas similares a monopolos magnéticos. A compreensão e controle do comportamento magnético estático e dinâmico dessas estruturas é fundamental para o desenvolvimento de novos dispositivos tecnológicos baseados em spintrônica. Neste trabalho foram estudadas nanopartículas planares, alongadas na forma elíptica, de material ferromagnético macio, especificamente o Permalloy-79. Tais nanopartículas tem atraído atenção devido ao seu potencial de aplicação prática no desenvolvimento de novos sensores, dispositivos de lógica, mídias de armazenamento de dados de alta densidade e dispositivos MRAM (Magnetic Random Access Memory). Pelo viés do interesse científico básico, tais nano-ilhas ferromagnéticas são a unidade fundamental em arranjos magnéticos bidimensionais geometricamente frustrados, como sistemas de gelo de spin artificiais. Nestes sistemas o arranjo geométrico das ilhas quebra a degenerescência do estado fundamental da rede, caracterizando um estado de frustração geométrica que permite excitações de comportamento análogo ao de monopólos magnéticos. Sob tais aspectos, é essencial caracterizar as configurações magnéticas no estado fundamental e os processos de reversão da magnetização em nanopartículas individuais. A forma elíptica planar gera uma forte anisotropia magnética, definindo duas configurações fundamentais para a magnetização do estado fundamental das nanopartículas: o estado de vórtice ou o estado alinhado ao longo do maior eixo – estado tipo C. A partir de uma razão de aspecto limite, a magnetização do estado fundamental é confinada no plano e ao longo do eixo maior de cada nano ilha, definindo um nanomagneto monodomínio com dois estados degenerados de magnetização, útil às aplicações previamente descritas. Partindo desse intuito estudamos inicialmente, através de simulação por dinâmica de spin, a competição entre os estados de vórtice e os estados alinhados tipo C como uma função da forma de cada nano-ilha elíptica, construindo um diagrama de fases de estados vórtice - tipo C. Cada nanopartícula magnética é modelada por momentos magnéticos que interagem via interação de troca entre primeiros vizinhos e por interação dipolar clássica de longo alcance. Nossos resultados mostram que é possível fabricar nano-ilhas alongadas com estado fundamental alinhado tipo C em razões de aspecto menores que dois. Este é um resultado interessante do ponto de vista tecnológico, pois permite usar ilhas menores que as atuais em pesquisas com gelos de spin e MRAM. Geralmente, os arranjos experimentais são feitos com nanopartículas de razão de aspecto próximas a três para garantir o estado fundamental alinhado da magnetização. Acrescentando ao modelo um

termo de interação Zeeman com um campo magnético externo, estudamos o comportamento da reversão da magnetização nas nanopartículas. Consideramos espessuras diferentes e duas razões de aspecto distintas: uma do tamanho experimental usual e outra menor proposta a partir de nossos resultados. Aplicando campo magnético senoidal em diferentes frequências e em direções distintas no plano das nanoilhas, observou-se a dependência dos processos de reversão em função da espessura das partículas e com a direção e frequência do campo aplicado. Os resultados permitem traçar linhas gerais acerca do comportamento da reversão da magnetização nas nanopartículas individuais sob campo magnético externo. Evidentemente para o desenvolvimento das possíveis aplicações tecnológicas, inclusive o controle de excitações como monopólos magnéticos em gelos de spin, é crucial entender os processos ultra rápidos de reversão da magnetização, o que envolve a aplicação de campo externo de alta frequência em direções cuidadosamente definidas. Com esse objetivo, também estudamos a reversão da magnetização nas nano-ilhas por pulsos curtos de campo magnético (da ordem de nanossegundos) aplicados em diferentes direções. Observamos uma forte dependência da coerência da reversão da magnetização com a direção do campo aplicado e uma significativa diferença na dependência angular da coercividade em relação ao observado em trabalhos prévios para campos aplicados na condição quase-estática. Finalmente, baseado em nossos resultados, propomos um método para o controle da reversão coerente da magnetização de nanopartículas individuais em matrizes quadradas de gelos de spin artificiais. Acreditamos que nossos resultados poderão ser úteis no desenvolvimento ulterior de arranjos magnéticos artificiais geometricamente frustrados e no controle das excitações topológicas destes sistemas.

Palavras-chave: Nanomagnetos. Nanopartículas ferromagnéticas. Anisotropia de forma. Frustração geométrica. Gelos de spin. Monopolos magnéticos. Reversão da magnetização.

Abstract

The continuous development of structures fabrication techniques at the nanometer scale with considerable precision and reproducibility has allowed and encouraged scientific research around the basic properties and new technological applications of these systems. Especially from the 90's, there is growing interest of the scientific community in the behavior of nanostructured magnetic systems. In these, the breaking of spatial symmetry due to small dimensionality causes quite different behaviors from those observed in the bulk. The resulting shape anisotropy of the classical interaction between magnetic dipoles allows the formation of exotic magnetic structures in nanomagnets as vortices, skyrmions, single domain walls and even topological excitations similar to magnetic monopoles. The understanding and control of static and dynamic magnetic behavior of these structures is essential for the development of new technological devices based on spintronics. In this work we studied planar elongated nanoparticles in the elliptical shape of soft ferromagnetic material, specifically the Permalloy-79. Such nanoparticles have attracted attention because of their potential to practical application in the development of new sensors, logic devices, high density data storage media and MRAM (Magnetic Random Access Memory) devices. By the bias of basic scientific interest, such ferromagnetic nano-islands are the fundamental unit in two-dimensional magnetic arrangements geometrically frustrated as artificial spin ice systems. In these systems, the geometric arrangement of islands break the degeneracy of the network ground state featuring a state of geometrical frustration that allows excitations with analogous behavior of magnetic monopoles. Under these aspects, it is essential to characterize the magnetic configurations in the ground state and the magnetization reversal processes in individual nanoparticles. The elliptical planar shape generates a strong magnetic anisotropy which defines two basic configurations for the magnetization of the ground state of the nanoparticles: the vortex state or the aligned state along the major axis - type C state. As from an aspect ratio limit value, the magnetization of the ground state is confined in the plane and along the major axis of each nano-island defining mono-domain nanomagnet with two degenerate states of magnetization, useful for the applications previously described. Starting from this purpose we study initially, through simulation by spin dynamics, the competition between the vortex states and aligned type C states as a function of the shape of each elliptical nano-island to build a states diagram. Each magnetic nanoparticle is modeled by magnetic moments that interact by exchange interaction between nearest neighbors and by the classical long-range dipolar interaction. Our theoretical results indicate the possibility to manufacture elongated nano-islands with ground state like aligned C state for aspect ratios less than two. This is an interesting result from the technological point of view because it will be possible to use smaller islands in researches on spin ice and MRAM. Generally, the experimental arrangements are made with nanoparticles of aspect ratio close to three to ensure aligned magnetization in the ground state. Adding to the model a Zeeman interaction term between the magnetic moments and an external magnetic field we study the behavior of the magnetization reversal in nanoparticles. We consider different thickness and two different aspect ratios: one in the usual experimental size and a smaller proposed from our results. Applying sinusoidal magnetic field

at different frequencies along the anisotropy axis in directions of ten and forty-five degrees from this, we observed the dependence of the reversal processes on the thickness of the particles and with the direction and frequency of the applied field. The results allow to establish general guidelines about the magnetization reversal behavior of the individual nanoparticles under external magnetic field. Evidently, for the development of possible technological applications, including the control of excitation like magnetic monopoles in spin ice, it is crucial to understand the ultrafast magnetization reversal processes which involves the application of high frequency magnetic fields in carefully defined directions. With this aim, we also studied the magnetization reversal of the nano-islands by short pulses of magnetic field (of the nanosecond order) applied in different directions. We observed a strong dependence on the coherence of the magnetization reversal with the direction of the applied field and a significant difference in the angular dependence of the coercivity compared to those seen in previous studies with applied magnetic fields in quasistatic conditions. Finally, based on our results we propose a method for the control of the coherent magnetization reversal of individual nanoparticles in square artificial spin ice arrays. We believe that our results may be useful in further developments of geometrically frustrated magnetic artificial arrangements and in the control of the topological excitations of these systems.

Keywords: Nanomagnets. Ferromagnetic nanoparticles. Shape anisotropy. Geometrical frustration. Spin ice. Magnetic monopoles. Magnetization reversal.

Sumário

1	Introdução	14
1.1	Nanomagnetismo	15
1.2	Frustração Geométrica	17
1.3	Gelos de Spin	19
1.4	Monopólos Magnéticos em Gelos de Spin	23
1.5	Nanoilhas Ferromagnéticas Alongadas	26
1.6	Proposta da Tese	29
2	Conceitos Fundamentais em Magnetismo	31
2.1	Momentos Magnéticos e Magnetização	32
2.2	Interação de Troca	35
2.3	Interação Dipolar	40
2.4	Interação Zeeman	43
3	Modelo Teórico e Simulação Computacional	46
3.1	Hamiltoniano do Modelo	47
3.2	Dinâmica da Magnetização	48
3.3	Simulação Micromagnética	53
3.4	Versão Adimensional da Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert	59

3.5	Parâmetros do Material Simulado	60
3.6	Detalhes das Simulações	64
4	Resultados	69
4.1	Estudo do Estado Fundamental da Magnetização	69
4.2	Estudo da Reversão da Magnetização	76
4.2.1	Estudo da Reversão da Magnetização sob Aplicação de Campo Magnético Externo Periódico	78
4.2.2	Estudo da Reversão da Magnetização sob Aplicação de Pulsos Curtos de Campo Magnético Externo	90
5	Conclusões	100
	Apêndice A – Limite Contínuo do Modelo de Heisenberg Isotrópico	105
	Apêndice B – Anisotropia de Forma	111
	Apêndice C – Dinâmica de Spins	120
	Apêndice D – Método de Integração Numérica da Equação de Landau-Lifshitz- Gilbert	125
	Anexo A – Trabalho Publicado	132
	Anexo B – Trabalho Submetido à Publicação	139
	Referências Bibliográficas	146

1 Introdução

Os fenômenos magnéticos são velhos conhecidos do homem. Os primeiros registros escritos sobre o assunto datam da Grécia antiga no século VI a. C., relatando a observação de uma rocha que atraía objetos de ferro. Sabe-se atualmente que tais rochas são um tipo de óxido de ferro em estado bruto conhecido por magnetita. Embora acredite-se em alguma aplicação de uso mais antigo, os primeiros registros formais de um dispositivo prático baseado em fenômenos magnéticos são do século I d. C., a bússola chinesa. No entanto, apenas em 1600 foi publicado o famoso “*De Magnete, Magneticisque Corporibus, et de Magno Magnete Tellure*” (“*Sobre o Magneto, Corpos Magnéticos e o Grande Magneto Terra*”) de William Gilbert, selando o primeiro trabalho importante em magnetismo.



Figura 1.1 – Evolução e diversidade de aplicações do magnetismo.

As observações experimentais de Hans Christian Oersted em 1820 marcam o início

da investigação científica da relação entre fenômenos magnéticos e elétricos, que após o relevante trabalho de físicos memoráveis durante o século XIX foi consagrada pela síntese consistente entre magnetismo, eletricidade e ótica publicada na obra “*Tratado sobre Electricidade e Magnetismo*” por James Clerk Maxwell em 1873, estruturando a nova teoria de campo eletromagnética. A partir daí foram desenvolvidas várias aplicações tecnológicas baseadas no eletromagnetismo que moldaram nosso estilo de vida contemporâneo, figura (1.1).

Impulsionado pelo conhecimento revelado com o advento da Física Moderna no século XX, o progresso científico das últimas décadas possibilitou avanços em automação e comunicação que nos legaram o atual modo de vida “*online*”, inimaginável a menos de trinta anos atrás. Tudo isso se deve em parte à linha de pesquisa a que esta tese está relacionada, o nanomagnetismo.

1.1 Nanomagnetismo

O desenvolvimento tecnológico tem exigido e propiciado um crescente domínio sobre as técnicas de fabricação e manipulação de magnetos em dimensões cada vez mais reduzidas, veja como exemplo a estrutura da figura (1.2). Nanopartículas magnéticas tem sido usadas desde técnicas médicas de diagnóstico de doenças (1) até a criação de polímeros úteis na separação de petróleo da água em casos de acidentes desse tipo (2). A atual precisão e reprodutibilidade na fabricação de estruturas em escala nanométrica ¹, tem permitido e estimulado a investigação científica em **nanomagnetos** – estruturas magnéticas nanoestruturadas (3–6), especialmente em materiais ferromagnéticos.

¹ 1 nm (1 nanômetro) = 1×10^{-9} m.

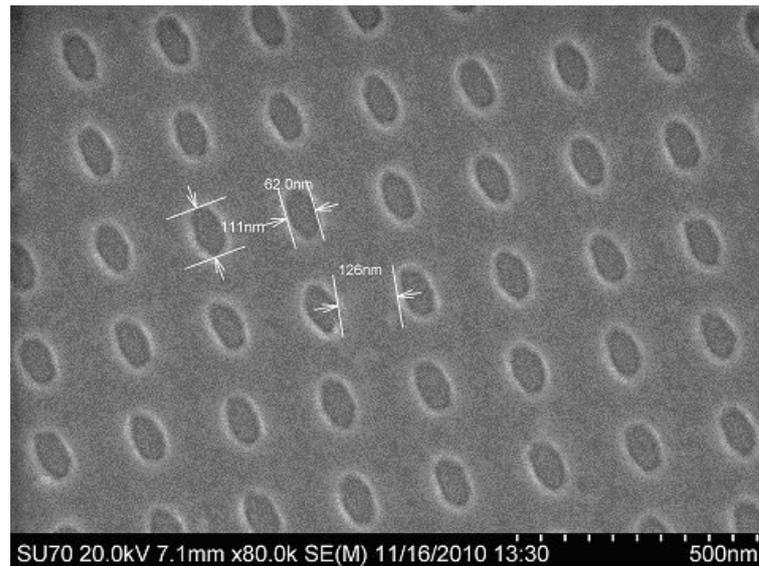


Figura 1.2 – Uma matriz de nanopartículas elípticas planas para dispositivos lógicos fabricada pela técnica de litografia por feixe de elétrons na Virginia Commonwealth University, USA, disponível em <http://nanotechweb.org/cws/article/tech/44911>.

Em geral, objetos ferromagnéticos são constituídos por uma estrutura numerosa de domínios magnéticos (7), criada para minimizar a energia do sistema ao equilibrar a competição da interação quântica de troca entre momentos magnéticos vizinhos e a interação clássica entre cada dipolo e o campo magnético criado por todos os momentos da rede (8–10), desprezando-se nessa prerrogativa a existência de campo magnético externo. No entanto, em dimensões nanométricas as subdivisões em domínios podem não representar um menor custo energético e assim é possível obter partículas monodomínio e estruturas interessantes como vórtices (11–17) e skyrmions (18–23).

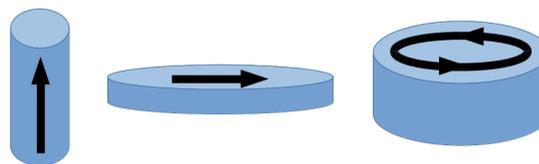


Figura 1.3 – Representação esquemática da magnetização do estado fundamental em partículas de simetria cilíndrica. A dimensão e forma espacial de cada partícula define a configuração magnética de mais baixa energia.

Em dimensões reduzidas, o efeito clássico desmagnetizante de origem dipolar gera

uma forte anisotropia de forma fazendo com que a magnetização no estado fundamental seja definida pelo tamanho e forma geométrica do nanomagnet. Uma partícula com simetria cilíndrica, por exemplo, pode ter estados distintos de magnetização de acordo com suas medidas espaciais, fenômeno ilustrado na figura (1.3). A compreensão e controle do comportamento magnético estático e dinâmico dessas estruturas é fundamental para o desenvolvimento de novos dispositivos tecnológicos baseados em spintrônica.

Neste trabalho foram estudadas nanopartículas planares, alongadas na forma elíptica, de material ferromagnético macio, especificamente o Permalloy-79. Tais nanopartículas tem atraído atenção devido ao seu potencial de aplicação prática no desenvolvimento de novos sensores e dispositivos de lógica (24), mídias de armazenamento de dados de alta densidade (25) e dispositivos MRAM (Magnetic Random Access Memory) (26). Pelo viés do interesse científico básico, tais nanoilhas ferromagnéticas são a unidade fundamental em arranjos magnéticos bidimensionais geometricamente frustrados, como sistemas de gelo de spin artificiais (27), nossa principal motivação para esse estudo.

1.2 Frustração Geométrica

A configuração espacial de um sistema magnético pode levar à impossibilidade de minimização simultânea de todas as interações energéticas entre pares. Tal efeito, fruto direto da disposição estrutural da rede, é conhecido por **frustração geométrica**. Estes fenômenos não estão restritos a sistemas magnéticos, sendo observados também em áreas distintas como supercondutividade (28) e biofísica (29, 30). Em vista da diversidade de referências especializadas sobre o assunto (31–34), exporemos brevemente aqui apenas os conceitos fundamentais necessários para que o leitor acompanhe a evolução do tema.

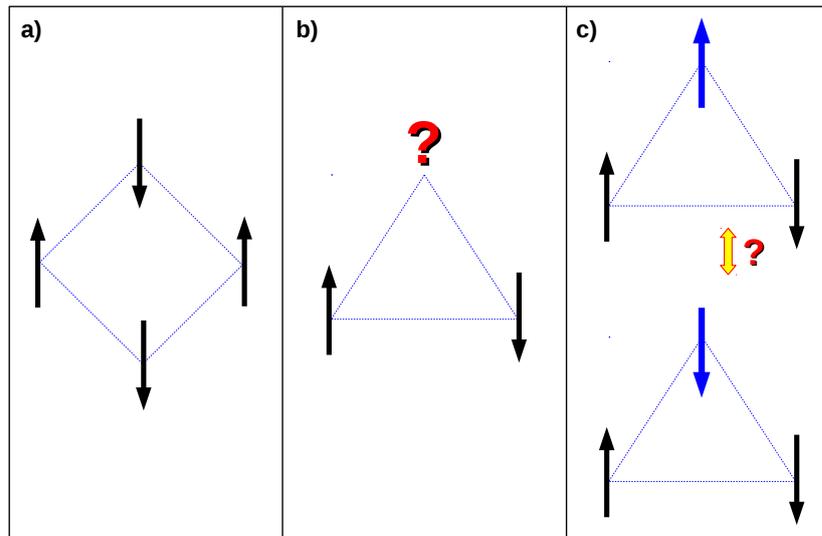


Figura 1.4 – Representação esquemática de momentos magnéticos tipo Ising, confinados à direção \hat{y} , em interação antiferromagnética dispostos em redes bidimensionais quadrada (a) e triangular (b). Não há como o momento no topo da rede triangular minimizar simultaneamente a interação anti-ferro com seus dois vizinhos, caracterizando um estado geometricamente frustrado (c).

Consoante com a maioria das referências básicas sobre o assunto, ilustramos aqui a título de exemplo de frustração geométrica, o sistema proposto em 1950 por *Wannier* (35): a rede antiferromagnética triangular. A figura (1.4) mostra um conjunto de momentos magnéticos tipo Ising com interação antiferromagnética, dispostos em redes bidimensionais quadrada (a) e triangular (b), em que todos os momentos magnéticos estão confinados à direção \hat{y} . Na rede quadrada não há frustração, cada momento magnético alinha-se antiparalelamente ao seu vizinho mais próximo. Na rede triangular, se os momentos da base do triângulo na figura são antiparalelos, o momento no topo não tem uma configuração única de mais baixa energia, caracterizando um estado geometricamente frustrado (Fig. 1.4, c).

Embora nesta seção usemos um exemplo bidimensional para explicar a frustração geométrica, ela é também observada em materiais tridimensionais, como veremos adiante. Por fim, vale destacar que a frustração geométrica em sistemas magnéticos leva à existência de estados fundamentais degenerados, permitindo uma entropia residual no estado fundamental do sistema (36).

1.3 Gelos de Spin

Embora a previsão teórica da observação de frustração geométrica em sistemas magnéticos feita por Wannier (35) em 1950 seja relativamente antiga, este não é o primeiro sistema natural em que se identificou efeitos de frustração. Ainda na década de 30, Giaouque *et al.* (37, 38) durante estudos do comportamento termodinâmico do gelo da água em baixas temperaturas, observaram que o gelo apresentava uma entropia residual mesmo em temperaturas muito baixas, contrariando a terceira lei da termodinâmica. Tal resultado foi explicado por Linus Pauling (39) a partir do grande número de configurações possíveis para os prótons H^+ no gelo da água, que surgem devido à incoerência entre a simetria cristalina do gelo e o arranjo local dos hidrogênios na molécula de água. Observa-se que o gelo da água apresenta uma estrutura cristalina tetraédrica, com os íons O^{-2} posicionados nos vértices e no centro do tetraedro. No entanto, a posição de mais baixa energia para os H^+ não são os pontos médios entre os íons O^{-2} , o que limitaria o sistema a um estado fundamental não degenerado. Ao invés disso, os prótons H^+ organizam-se localmente em nível molecular de forma que ao longo dos quatro segmentos $O - O$ de cada tetraedro, dois prótons H^+ ficam localizados próximos ao íon O^{-2} central e dois ficam mais afastados. A figura (1.5, **A**) ilustra esta configuração. Resumidamente, as configurações de mais baixa energia no arranjo local de prótons no gelo da água, obedecem às regras do gelo de Bernal-Fowler (40) “two-near” / “two-far”. Pode-se representar as posições deslocadas dos íons H^+ por vetores deslocamentos, ilustrados na figura (1.5, **B**). Nessa representação é possível enunciar as regras do gelo como “two-in” / “two-out”. Evidentemente, as regras do gelo podem ser satisfeitas em cada célula tetraédrica unitária em diversas configurações equivalentes dos íons H^+ , configurando estados fundamentais degenerados que levam à entropia residual do sistema.

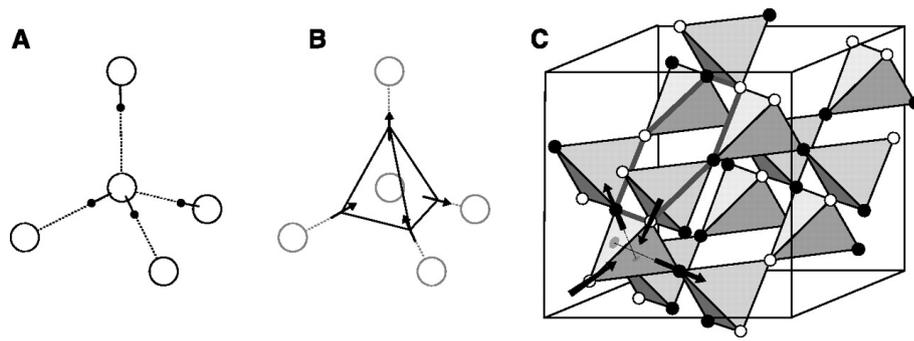


Figura 1.5 – (A) Arranjo local dos prótons no gelo da água. Os círculos representam os íons O^{2-} e os pontos pretos são íons H^+ . As configurações de mais baixa energia obedecem às regras do gelo “two-near” / “two-far” (40). (B) O mesmo ilustrado em (A), mas agora as posições dos íons H^+ são representadas por vetores deslocamento, permitindo reescrever as regras do gelo como “two-in” / “two-out”. (C) Rede tridimensional cristalina do tipo pirocloro, composta por tetraedros com vértices compartilhados. É a rede cristalina de materiais terra rara magnéticos como $Ho_2Ti_2O_7$ e $Dy_2Ti_2O_7$. Nestes materiais, momentos magnéticos tipo Ising ocupam os vértices de cada tetraedro, sendo equivalentes aos vetores deslocamento dos íons H^+ no gelo da água. Analogamente, os estados de mais baixa energia são aqueles em que os spins obedecem às regras do gelo “two-in” / “two-out” em cada célula. Tal peculiaridade levou tais materiais a serem conhecidos por materiais “spin ice” (gelos de spin). Figura adaptada da referência (41)

A aproximadamente duas décadas atrás, uma certa classe de materiais magnéticos em que a desordem configuracional local nas orientações dos momentos magnéticos é exatamente a mesma que a dos vetores deslocamento dos íons H^+ no gelo de água começou a ganhar atenção, tendo sido objeto de numerosos estudos teóricos e experimentais.

Tais materiais, de natureza ferromagnética, tem uma estrutura cristalina do tipo pirocloro, com células tetraédricas que compartilham seus vértices. Momentos magnéticos tipo Ising ocupam os vértices de cada tetraedro, sendo equivalentes aos vetores deslocamento dos íons H^+ no gelo da água. A, figura (1.5, C) mostra uma rede tipo pirocloro e momentos magnéticos localizados nos vértices de uma das células tetraédricas da figura. Observou-se que a configuração de spins que leva o sistema ao estado de menor energia é justamente a regra do gelo “two-in” / “two-out”, fig. (1.6) e fig. (1.7). Essa similaridade levou tais materiais a serem conhecidos por “spin ice”, **gelos de spin** (36, 41–45).

Vale ressaltar que a primeira observação experimental de sistemas ferromagnéticos naturais frustrados é relativamente recente, feita por Harris *et al.* em 1997 (42). Estes observaram que o material $Ho_2Ti_2O_7$ tem íons acoplados ferromagneticamente, os Ho^{+3} , ocupando os

vértices de uma rede pirocloro tetraédrica. A anisotropia da rede impõe um comportamento tipo Ising aos momentos magnéticos levando a um estado fundamental geometricamente frustrado, em que o arranjo local dos spins em cada célula tetraédrica obedece às regras do gelo, veja a figura (1.7) para ilustração.



Figura 1.6 – Representação esquemática do estado fundamental, obedecendo a regra do gelo (“two-in” / “two-out”), de spins tipo Ising com interação ferromagnética confinados aos vértices de uma célula tetraédrica. Figura retirada da referência (42).

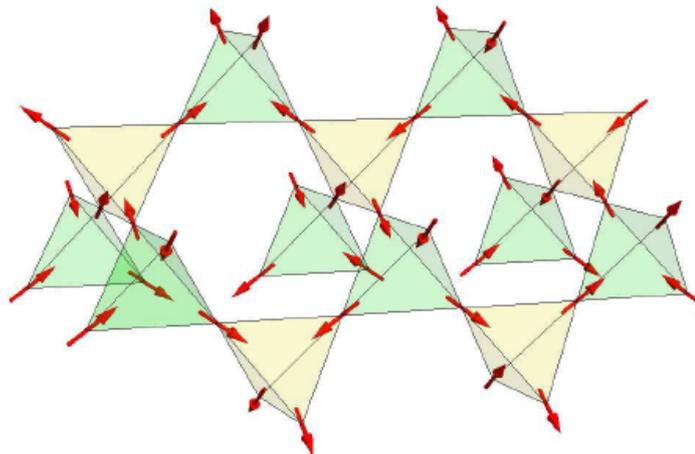


Figura 1.7 – Um fragmento da rede tipo pirocloro. O arranjo local dos spins em cada célula tetraédrica obedece às regras do gelo. Figura retirada da referência (46).

Finalmente em 2006, o trabalho pioneiro de Wang *et al.* (27) criou o primeiro sistema artificial ferromagnético com propriedades de frustração geométrica. Neste trabalho, uma rede quadrada bidimensional de nanoilhas ferromagnéticas alongadas, dispostas em direções perpendiculares, foi construída (fig. 1.8, **a**). As dimensões de cada nanoilha fazem dela um monodomínio ferromagnético e a anisotropia de forma confina a magnetização do estado fundamental alinhada ao longo de seu eixo maior, conferindo um comportamento tipo Ising para o

momento magnético total. Nesse sistema existem dezesseis possíveis configurações para cada encontro de quatro nanoilhas. As interações energéticas dipolares favoráveis (acima) e desfavoráveis (abaixo) entre pares de momentos magnéticos, mostradas na figura (1.8, **b**), levam a energias magnetostáticas diferentes para cada conjunto coincidente de quatro ilhas. Assim, dentre as dezesseis possíveis configurações para cada encontro, há quatro topologias com energias magnetostáticas distintas; agrupadas, ordenadas energeticamente e ilustradas na figura (1.8, **c**). Note que as configurações do tipo I e II são similares à regra do gelo “dois para dentro” / “dois para fora” (“two-in” / “two-out”).

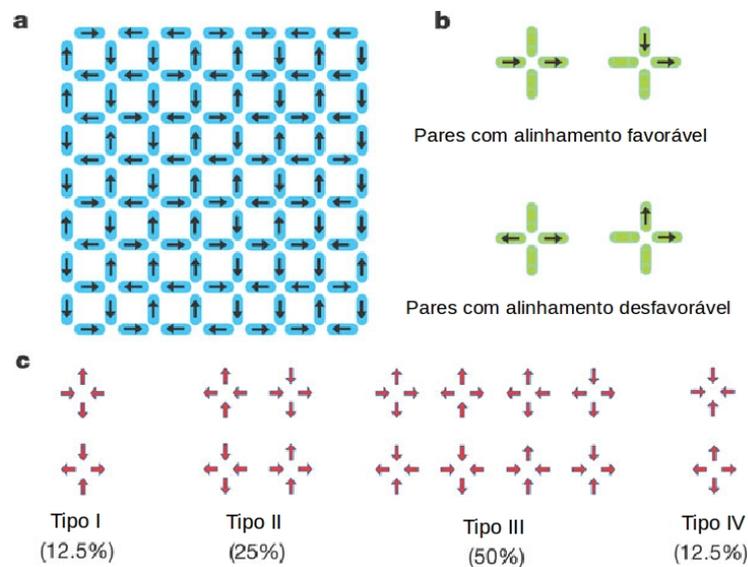


Figura 1.8 – (a) Representação da rede e dos momentos magnéticos das nanoilhas no gelo de spin artificial criado por Wang *et al.* (27). (b) Configurações energéticas dipolares favoráveis (acima) e desfavoráveis (abaixo) entre pares de momentos magnéticos. (c) As dezesseis possíveis configurações para cada encontro de quatro nanoilhas, separadas por topologias distintas ordenadas em ordem crescente pelas respectivas energias magnetostáticas. Os percentuais indicam as quantidades esperadas de cada configuração em um arranjo totalmente aleatório (nanoilhas não interagentes).

Figura adaptada da referência (27).

Construindo redes com espaçamentos entre ilhas diferentes, Wang *et al.* (27) mostraram que em redes com grandes espaçamentos, situação de ilhas não interagentes, a proporção de configurações possíveis dos momentos magnéticos para cada encontro de quatro nanoilhas é praticamente igual à esperada para um sistema completamente aleatório (fig. 1.8, **c**). No entanto, à medida em que o espaçamento entre ilhas diminui e consequentemente os momentos de dipolo das ilhas começam a interagir, o percentual de configurações do tipo I e II (regras do

gelo) começa a aumentar. Isso demonstra que o estado menos energético do sistema é aquele em que as regras do gelo são válidas em cada encontro de quatro nanoilhas. A perfeita similaridade com os sistemas de gelo de spin naturais levou tal sistema a ser conhecido por **gelo de spin artificial**.

Uma série de trabalhos subsequentes investigaram características fundamentais destes interessantes gelos de spin artificiais em diversas geometrias possíveis (47, 48), tanto do ponto de vista teórico quanto experimental. Foram propostos modelos de interação entre ilhas para a rede de gelo de spin quadrada (49, 50), estudos das características entrópicas (51) e termodinâmicas do sistema (52, 53), pesquisas sobre os processos de desmagnetização e reversão da magnetização em redes de gelo de spin quadradas (54–58), “kagome” (59), “honey-comb” (tipo colméia) (60) e triangular (61). Trabalhos mais recentes contribuíram para a descoberta de novas redes geometricamente frustradas (62), desenvolvimento de novos materiais gelos de spin (63, 64), estudos de efeitos térmicos fora do equilíbrio (65, 66) e observação de quiralidade dos momentos magnéticos constituintes de cada ilha nas bordas interagentes de redes de gelos de spin triangulares e “honey-comb” (67).

É evidente a importância do estudo e caracterização de gelos de spin artificiais, dado a riqueza de novos fenômenos fundamentais observados e as possíveis aplicações tecnológicas que poderão advir desse conhecimento.

1.4 Monopólos Magnéticos em Gelos de Spin

A investigação e entendimento dos gelos de spin tem se renovado não apenas pelo desejo de conhecimento científico básico para a Física da Matéria Condensada, mas também, especialmente devido à observação em gelos de spin artificiais de excitações topológicas que comportam-se como monopólos magnéticos (68, 69). Embora a ocorrência dessas excitações tenha sido previamente observada em gelos de spin naturais (70, 71) à baixas temperaturas, sua observação em sistemas artificiais bidimensionais em temperatura ambiente pode levar a um conjunto de novos fenômenos e uma variedade de possíveis aplicações tecnológicas.

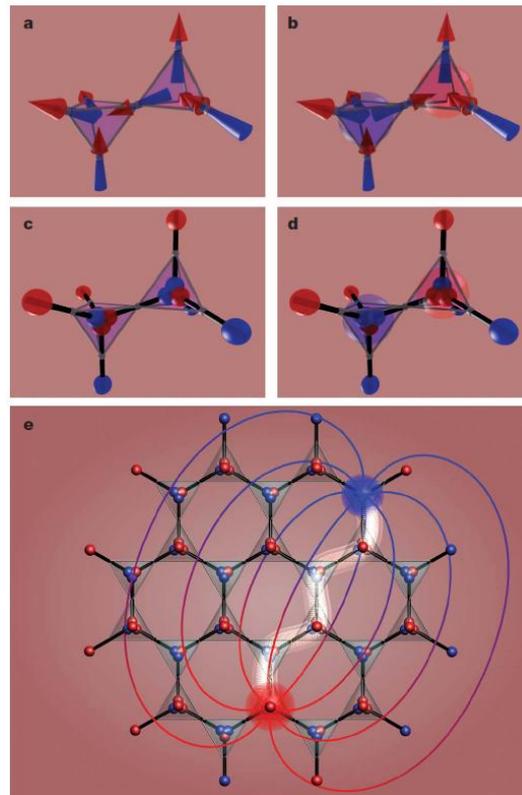


Figura 1.9 – (a) Duas células tetraédricas adjacentes em uma rede pirocloro que obedecem as regras do gelo. Não há excesso de carga magnética em nenhuma das células. (b) As mesmas células tetraédricas, mas com o momento magnético compartilhado invertido. Existe agora um par de monopólos magnéticos, devido ao excesso de cargas magnéticas em cada célula. (c) e (d) são respectivamente equivalentes a (a) e (b), mas trocando-se a representação em momentos pela representação por cargas magnéticas. (e) Um par de monopólos magnéticos afastados na rede pela inversão de momentos magnéticos adjacentes que formam uma ‘corda de Dirac’ (em branco) e as respectivas linhas de campo magnético gerado pela configuração. Figura adaptada da referência (70).

A sonhada, por muitos físicos, observação e manipulação de pólos magnéticos isolados é aparentemente simples e fácil de visualizar nos gelos de spin. A figura (1.9) ilustra a excitação de um par de monopólos em um gelo de spin tridimensional. Pode-se observar na figura (1.9, a) duas células tetraédricas adjacentes em uma rede pirocloro que obedecem as regras do gelo, sem qualquer excitação ou excesso de carga magnética. O mesmo é visualizado na figura (1.9, c) por uma representação didática em cargas magnéticas, ao invés dos tradicionais momentos magnéticos. A inversão da polaridade do momento magnético compartilhado gera um excesso de carga magnética em cada célula e, conseqüentemente, um par de monopólos magnéticos, figura (1.9, b e d). Cada monopólo magnético pode, teoricamente, ser manipulado individualmente, mesmo a um custo energético. Um par de monopólos magnéticos afastados

na rede pela inversão de momentos magnéticos consecutivos que formam uma ‘corda de Dirac’ (70) e as respectivas linhas de campo magnético gerado pela configuração de cargas são ilustrados na figura (1.9, e).

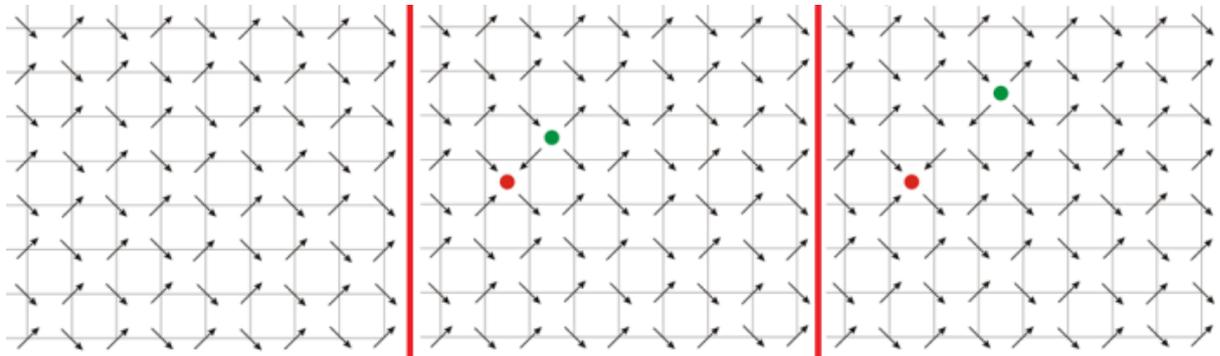


Figura 1.10 – Criação e manipulação de monopólos magnéticos em uma rede de gelo de spin quadrada bi-dimensional. **Esquerda:** rede no estado fundamental, as regras do gelo são obedecidas e não há assim nenhuma excitação topológica. **Centro:** a magnetização em uma das nanoilhas é invertida criando um par de monopólos magnéticos. **Direita:** manipulação de um monopólo individual pela inversão da magnetização em mais uma nanoilha. Figura disponível em: <http://francisthemulenews.wordpress.com/2010/04/18/que-es-un-monopolo-magnetico-en-un-hielo-de-espin/>.

A excitação e manipulação de monopólos magnéticos nos gelos de spin artificiais é semelhante a da rede pirocloro 3D e, a princípio, mais fáceis de serem observadas e desenvolvidas. Isso porque as dimensões dos momentos magnéticos das nanoilhas em sistemas artificiais é muito maior e, conseqüentemente mais acessíveis e manipuláveis que nos gelos de spin naturais. Além disso, a matriz bidimensional permite a visualização do fenômeno de forma muito mais clara. A figura (1.10) ilustra ordenadamente a criação e manipulação de cargas magnéticas em uma rede de gelo de spin: (1°) rede no estado fundamental, as regras do gelo são obedecidas e não há assim nenhuma excitação topológica, (2°) a magnetização em uma das nanoilhas é invertida criando um par de monopólos magnéticos, (3°) manipulação de um monopólo individual pela inversão da magnetização em mais uma nanoilha.

Em qualquer das diversas geometrias possíveis de gelos de spin artificiais, a possível excitação e manipulação das cargas magnéticas se dá através da manipulação de um dipolo magnético clássico, sem ferir ou violar qualquer princípio físico. Em virtude da relevância do tema e de seu potencial de aplicação, inúmeros trabalhos continuam sendo desenvolvidos

com objetivo de melhor compreensão e controle dessas excitações em redes quadrada (72–77), retangular (78), “honey-comb”(60, 79), triangular (80) e retangular unidirecional (81, 82).

1.5 Nanoilhas Ferromagnéticas Alongadas

Embora já tenha sido citado anteriormente, cabe-nos aqui ressaltar um ponto comum entre todos os numerosos trabalhos sobre sistemas magnéticos artificiais geometricamente frustrados e entre muitos trabalhos experimentais para o desenvolvimento de novos sensores, dispositivos de lógica, mídias de armazenamento de dados de alta densidade e dispositivos MRAM (Magnetic Random Access Memory) baseados em nanomagnetos. A unidade fundamental destes sistemas são nanoilhas (nanopartículas) ferromagnéticas de simetria plana, alongadas de tal modo que a anisotropia de forma resultante confine a magnetização do estado fundamental alinhada ao eixo maior da nanopartícula, veja a figura (1.11) para ilustração. Nessas condições, tais partículas podem ser usadas como um ‘*bit*’ de informação, em que cada sentido da magnetização pode ser interpretado como 0 ou 1, úteis a dispositivos de lógica ou de memória, ou como portadoras de um momento magnético tipo Ising de sentido controlável, úteis em gelos de spin artificiais.

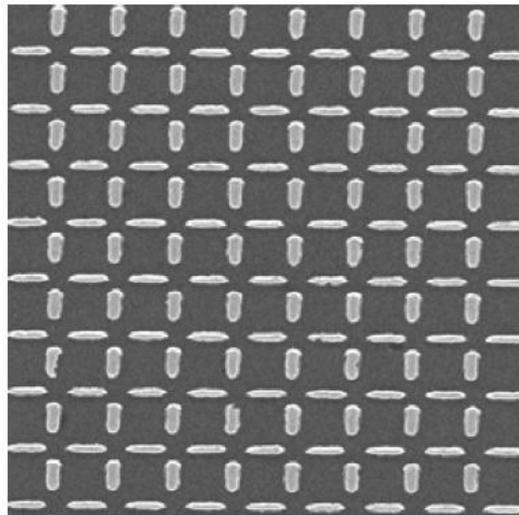


Figura 1.11 – Imagem de uma rede quadrada de gelo de spin obtida por microscópio eletrônico de varredura por Sklenar et al. (58). Nesta amostra, as nanoilhas de permalloy alongadas, dispostas em x e y , tem dimensões ligeiramente diferentes 250×45 nm e 200×75 nm respectivamente. A espessura das nanoilhas é de 25 nm

Particularmente, o estudo e caracterização das propriedades magnéticas de nanoilhas ferromagnéticas individuais (83–86), elementos fundamentais nas linhas de pesquisa citadas, atraiu nossa atenção. Especialmente devido aos trabalhos experimentais com gelos de spin artificiais, que geralmente usam nanoilhas individuais relativamente bastante alongadas, razões de aspecto de $\approx 2,8$ (27, 66) ou maiores ≈ 10 (69)). Daí surge a primeira questão motivadora deste trabalho: ***há uma geometria ou razão de aspecto mínima para a nanoilha que garanta o estado fundamental da magnetização alinhada ao longo de seu eixo maior e que lhe confira um comportamento tipo Ising sob a influência de um campo magnético externo?***

Sob outro viés, o controle da reversão da magnetização em cada nanopartícula individual é fundamental em qualquer operação de lógica ou armazenamento de dados em dispositivos magnéticos, além de imprescindível no desenvolvimento de processos de manipulação de cargas magnéticas em gelos de spin artificiais, processo denominado *magnetricidade*. Diante dessas motivações, a investigação dos mecanismos de reversão da magnetização em nanopartículas ferromagnéticas tem atraído a atenção de muitos pesquisadores e, especialmente desde o início do século XXI, vários trabalhos teóricos (87–92) e experimentais (93–96) têm sido desenvolvidos.

Pode-se observar na literatura, que as nanoilhas alongadas desenvolvidas experimentalmente podem ser modeladas por partículas elípticas ou em forma de estádio (“stadium-shaped”) planas. As figuras (1.2), (1.8) e (1.11) ilustram exemplos dessa observação.

Trabalhos específicos recentes investigam propriedades fundamentais do processo de reversão da magnetização em função do campo magnético externo e em função de propriedades características intrínsecas de nanoilhas ferromagnéticas: elípticas (97–101), em forma de estádio (102) e um comparativo entre as duas geometrias (103). Em geral, tais estudos reportam diferentes configurações da magnetização durante a reversão, como a formação e aniquilação de vórtices ou a rotação coerente dos spins constituintes da nano-partícula. Configurações essas que dependem de inúmeras variáveis como os parâmetros do campo magnético aplicado, as dimensões da nanoilha, sua forma geométrica (anisotropia de forma) e do material de que é feita (anisotropia cristalina). No entanto, ainda não se tem plena compreensão de como fun-

cionam estas dependências em processos de reversão da magnetização ultra rápidos (92–94), imprescindíveis às possíveis aplicações tecnológicas que se beneficiem desse controle.

Do ponto de vista fundamental, há ainda que se determinar os mecanismos de reversão da magnetização em nanoilhas individuais de gelos de spin artificiais. Haja visto que uma das concepções desses sistemas é a de que os momentos magnéticos totais das nanoilhas tem comportamento tipo Ising, é importante determinar sob quais aspectos isso é válido durante a reversão. Evidentemente tal situação só é válida em processos de reversão coerente da magnetização, ou seja, um processo no qual os spins da nanoilha giram, de certa forma, sincronizadamente, preservando o momento magnético total da nanoilha durante o processo.

Face às discussões apresentadas, podemos enunciar a segunda questão motivadora deste trabalho: *qual a melhor forma de controlar a reversão da magnetização em nanoilhas ferromagnéticas individuais por processos ultra rápidos e quais os mecanismos envolvidos?*

1.6 Proposta da Tese

Diante do contexto e motivação apresentados, podemos expor agora a proposta desta tese. Neste trabalho, usando simulações numéricas de dinâmica de spin, estudamos o comportamento magnético de nanoilhas elípticas ferromagnéticas, usando os parâmetros do “Permalloy-79”, sob dois aspectos distintos. O **estado fundamental magnético** na ausência de campo magnético externo e a **reversão da magnetização** das nanoilhas sob aplicação de campo magnético externo em dois regimes distintos: campo magnético variando suavemente (perfil senoidal) e campo magnético na forma de pulsos gaussianos curtos (0.5 ns).

Em nanopartículas elipsoidais em dimensões de monodomínio, a quebra de simetria do *bulk* e o efeito desmagnetizante resultante das interações dipolares geram uma forte anisotropia magnética definindo duas possíveis configurações para o estado magnético fundamental: o estado alinhado da magnetização - estado tipo C ou o estado de vórtice (104–107), veja a figura (1.12). Nós estudamos a competição entre os estados de vórtice e os estados alinhados tipo C como função da forma e das dimensões da nanoilha, construindo um diagrama de estados *vórtice - tipo C*. Nós observamos que, para pequenas razões de aspecto, o estado preferido é o de vórtice, mas à medida em que a nanopartícula é alongada, a anisotropia de forma favorece naturalmente o estado alinhado tipo C ao longo do eixo maior. Nossos resultados mostram que é possível fabricar nanoilhas de Permalloy no estado tipo C com razões de aspecto consideravelmente menores que as dos atuais trabalhos experimentais (108).

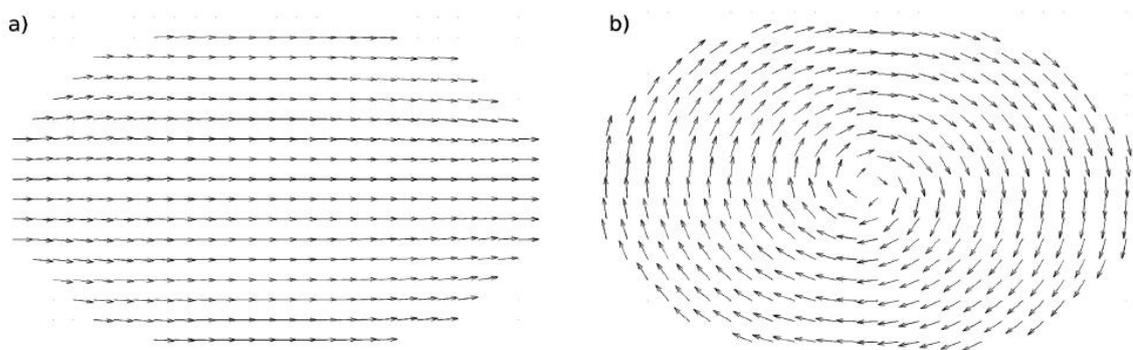


Figura 1.12 – Possíveis configurações para o estado fundamental da magnetização de uma nanoilha elíptica ferromagnética. **a)** Estado alinhado tipo C. **b)** Estado de vórtice.

Sob o aspecto da dinâmica da magnetização, consideramos partículas com duas razões de aspecto fixas: $220 \times 80 \times \text{espessura nm}^3$, razão de aspecto usual em trabalhos *spin ice* experimentais (27, 58) e $70 \times 50 \times \text{espessura nm}^3$, razão de aspecto reduzida proposta por nós a partir dos resultados da primeira parte deste trabalho (108). Estudamos a reversão da magnetização aplicando campo magnético periódico e na forma de pulsos gaussianos rápidos - largura de $0,5 \text{ ns}$ (93). Em ambos os casos fizemos um estudo angular da dependência dos mecanismos de reversão, aplicando campo magnético no plano das partículas e em diferentes direções.

Nossos resultados para campo magnético senoidal confirmam observações anteriores para a dependência dos mecanismos de reversão da magnetização com a direção do campo aplicado (97, 98) e com a espessura das nanopartículas estudadas. No entanto, observamos uma dependência nas características da reversão em função da frequência do campo aplicado, para a qual não encontramos estudo sistemático. Tal resultado revela diferenças relevantes nos mecanismos de reversão diante da aplicação de um campo em alta frequência e um campo quase-estático (99), fato que merece ser considerado em comparações de resultados entre medidas experimentais e de simulação numérica.

Para os processos sob a aplicação de pulsos de campo magnético, nós observamos uma forte dependência da coerência da magnetização em função da direção do pulso de campo aplicado e uma significativa diferença na dependência angular da coercividade em partículas elípticas em relação à observada em condições de campo magnético externo quase-estático (103).

Por fim, nossos resultados mostram que podemos obter reversão controlada, coerente e ultra rápida da magnetização aplicando pulsos de campo ortogonais ao eixo anisotrópico da nanopartícula. Acreditamos que tais resultados possam ser especialmente úteis no desenvolvimento de processos práticos de manipulação de cargas magnéticas em gelos de spin artificiais, mas também são aplicáveis em dispositivos de lógica ou memória magnética de acesso aleatório (MRAM).

2 *Conceitos Fundamentais em Magnetismo*

A resposta de um objeto à presença de um campo magnético é uma observação corriqueira em nossa vida moderna, nenhuma pessoa adulta em sã consciência tenta fixar um ímã de geladeira à uma porta de madeira ou à uma superfície de plástico, por exemplo. Mesmo sem uma teoria científica, o aprendizado cotidiano revela que há dois comportamentos macroscópicos distintos dos materiais na presença de um campo magnético, revelando os materiais que reagem fortemente ao campo magnético como os mais interessantes para o uso nas aplicações advindas do magnetismo.

Na verdade, existem dois efeitos diferentes nos materiais que aparentemente não reagem ao campo magnético, conhecidos por diamagnetismo e paramagnetismo (10, 109). Em todos os materiais, a presença de um campo magnético altera o fluxo de campo através das áreas descritas pelo movimento orbital dos elétrons, induzindo naturalmente um fluxo de campo contrário que se opõe à variação, lei de Lenz clássica. Isso gera uma pequena magnetização do material oposta ao campo externo, efeito conhecido por diamagnetismo. Embora o diamagnetismo esteja presente em todos os materiais, este pode ser encoberto por efeitos mais intensos em materiais cujos átomos possuem um momento de dipolo magnético permanente. Há neste tipo de situação dois efeitos e, conseqüentemente, duas classes de materiais. Em uma delas, só há ordenamento dos momentos magnéticos na presença de um campo magnético, levando a uma pequena magnetização do material na mesma direção e sentido do campo externo, efeito conhecido por paramagnetismo.

Em termos macroscópicos, pode-se dizer que materiais que reagem fortemente a um

campo magnético e/ou que apresentem uma magnetização não nula mesmo na ausência de campo são materiais ferromagnéticos. Sem dúvida, os mais promissores para o desenvolvimento de aplicações em nanomagnetismo. Embora de curto alcance, há uma forte interação entre os momentos de dipolo magnéticos atômicos que favorecem o paralelismo (ferromagnetismo) ou o antiparalelismo (antiferromagnetismo) entre eles, podendo levar a um ordenamento de longo alcance. Tal magnetização espontânea desaparece acima de determinada temperatura, temperatura de *Curie*, e o ferromagneto passa a ter comportamento paramagnético.

Além da interação responsável pelo ferromagnetismo, há outras interações entre momentos magnéticos, que levam a comportamentos observados macroscopicamente como ferromagnetos desmagnetizados mesmo à temperaturas abaixo da temperatura de *Curie*. Sabemos que tal comportamento é fruto da subdivisão em domínios magnéticos (7), configuração que minimiza a energia livre magnética, que é a energia total do sistema considerando todas as interações intrínsecas do material e a interação com um campo externo. Especialmente em uma nanoilha ferromagnética, tais interações podem lhe conferir um estado de magnetização monodomínio devido à sua baixa dimensionalidade. Trataremos a seguir da descrição básica dessas interações em materiais ferromagnéticos.

2.1 Momentos Magnéticos e Magnetização

O comportamento magnético dos materiais têm origem nos momentos magnéticos atômicos, resultado das contribuições dos momentos magnéticos eletrônicos, de origem orbital e de spin.

Um elétron individual em movimento no átomo constitui uma corrente elétrica e tem um respectivo momento angular orbital. Para um elétron com momento angular orbital $\hbar\vec{l}$, o momento magnético associado $\vec{\mu}_l$ é (9):

$$\vec{\mu}_l = -\frac{|e|\hbar}{2m_e}\vec{l} = -\mu_B\vec{l}, \quad (2.1)$$

onde $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,27 \times 10^{-24} \text{ J/T}$ é a unidade usual de momento magnético, conhecido por

magnéton de Bohr, m_e é a massa do elétron e $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ é a conhecida constante de Planck normalizada.

O respectivo momento magnético associado ao spin intrínseco de um elétron pode ser escrito como:

$$\vec{\mu}_s = -g_e \frac{|e|\hbar}{2m_e} \vec{s} = -g_e \mu_B \vec{s}, \quad (2.2)$$

onde $g_e \approx 2,00$ é o fator g de Landé para o elétron.

Para átomos com mais de um elétron, o momento angular orbital total é dado por:

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i, \quad (2.3)$$

onde a soma é feita sobre todos os elétrons. Analogamente, o momento angular de spin total é dado por:

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i. \quad (2.4)$$

Os momentos resultantes \vec{L} e \vec{S} são acoplados pela interação spin-órbita e formam o momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. As regras de Hund determinam (9) os estados eletrônicos ocupados e os respectivos números quânticos J , L e S .

No entanto, a teoria quântica do magnetismo mostra que o comportamento ferromagnético tem origem na interação entre os momentos magnéticos associados aos spins dos elétrons, e não nos momentos magnéticos de origem orbital (10). Assim, para a nossa abordagem de fenômenos ferromagnéticos, o momento magnético associado ao momento angular de spin total S dos elétrons de um átomo é dado por (10):

$$\vec{m} = -\gamma \vec{S} = -\frac{g_e \mu_B}{\hbar} \vec{S}, \quad (2.5)$$

onde a constante de proporcionalidade $\gamma = \frac{g_e \mu_B}{\hbar} = 1,77 \times 10^{11} \text{ 1/Ts}$ é a razão giromagnética do elétron. Como a razão $\frac{g_e \vec{S}}{\hbar}$ é adimensional, o módulo do momento magnético $|\vec{m}| = m$ é dado em unidades de μ_B .

A magnetização \vec{M} de um material em um determinado volume ΔV é definida como

o somatório dos momentos magnéticos contidos em ΔV por unidade de volume (110, 111), ou seja

$$\vec{M} = \frac{1}{\Delta V} \sum_i \vec{m}_i. \quad (2.6)$$

Evidentemente, \vec{M} não é definida na ausência de matéria e a magnetização tende a zero em porções de volume do material em que a orientação dos momentos magnéticos seja aleatória.

Na presença de matéria, a indução magnética \vec{B} , dada no Sistema Internacional de Unidades (SI) em Tesla [T], é dada por

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}), \quad (2.7)$$

onde $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} T.m/A$ é a permeabilidade magnética do vácuo e \vec{H} é o campo magnético auxiliar, expresso no SI na mesma unidade de \vec{M} , em [A/m].

Se \vec{M} for paralela à \vec{H} , pode-se escrever:

$$\vec{M} = \chi \vec{H}, \quad (2.8)$$

onde χ é a susceptibilidade magnética, uma grandeza adimensional que quantifica a capacidade de magnetização do material na presença do campo \vec{H} . De acordo com os valores e sinal de χ os materiais podem ser formalmente classificados em diamagnéticos, paramagnéticos e ferromagnéticos (10, 112).

A interação dos momentos de dipolo magnético, dipolos magnéticos ou, simplesmente, momentos magnéticos, com um campo magnético é bem conhecida no eletromagnetismo clássico. Em um ferromagneto, cada momento magnético irá interagir com o campo magnético gerado pelos outros momentos, o campo magnetostático, com o campo de troca gerado pelos primeiros vizinhos e, possivelmente, com um campo magnético externo. Recordaremos nas seções seguintes tais interações.

2.2 Interação de Troca

A interação de troca ou “*exchange interaction*” é a responsável direta pelo ordenamento magnético em materiais com momentos magnéticos permanentes. A ausência desta interação em materiais que possuem momentos magnéticos atômicos permanentes leva ao comportamento paramagnético. Isto indica que a interação clássica entre os dipolos magnéticos, também presentes em materiais paramagnéticos, não é suficiente para levar o material a um ordenamento paralelo entre os dipolos à temperatura ambiente. Na verdade, só seria possível observar o ordenamento espontâneo dos momentos magnéticos em um paramagneto em temperaturas próximas ao zero absoluto (109). Dessa forma, o ordenamento observado em materiais ferromagnéticos à temperatura ambiente, e na ausência de campo aplicado, tem origem em uma interação forte e de curto alcance intrínseca ao material, capaz de manter o alinhamento dos momentos magnéticos mesmo em grandes flutuações térmicas.

A interação de troca tem origem puramente quântica, decorrente do princípio de exclusão de Pauli que exclui a possibilidade de dois elétrons ocuparem o mesmo estado quântico em um respectivo átomo. Isso implica na necessidade de que a autofunção total do elétron seja antissimétrica e leva à expectativa de que tal interação seja relevante apenas entre partículas próximas. A dedução formal dessa interação parte do cálculo das energias dos estados possíveis para um sistema de dois elétrons (estados singleto e tripleto) com autofunções antissimétricas. Tal cálculo pode ser encontrado em detalhes em diversas referências (8, 113, 114) e será omitido aqui. O resultado é a energia da interação de troca para um par de spins, dada por:

$$H_{tro} = -\frac{J_{12}}{\hbar^2} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (2.9)$$

em que J_{12} é a constante da interação de troca com dimensões de energia. A constante J_{12} representa a superposição das funções de onda espaciais dos momentos angulares de spin, 1 e 2, sendo apreciável apenas para um par de spins muito próximos. Isso revela a natureza de curto alcance da interação de troca.

Partindo da interação de troca entre um par de spins, podemos generalizar a hamiltono-

niana para uma distribuição discreta e localizada de spins como

$$H_{tro} = -\frac{1}{2\hbar^2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.10)$$

onde o fator $\frac{1}{2}$ é introduzido “ad-hoc” para evitar a contagem dupla da mesma interação. \vec{S}_i é o spin do íon localizado no sítio i .

Conhecida a natureza de curto alcance da interação de troca, as contribuições realmente relevantes à energia do sistema resultam das interações entre primeiros vizinhos. Assim, uma boa aproximação é obtida ao considerar

$$J_{ij} = J_{ji} = \begin{cases} J, & \text{para } i, j \text{ primeiros vizinhos;} \\ 0, & \text{para os demais casos.} \end{cases} \quad (2.11)$$

Assim, o hamiltoniano da interação de troca (2.10), conhecido por hamiltoniano de Heisenberg pode ser reescrito como,

$$H_{tro} = -\frac{J}{2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.12)$$

em que o símbolo $\langle i, j \rangle$ representa um somatório realizado apenas entre pares de spins que são primeiros vizinhos. Podemos reescrever a equação (2.12) em termos dos momentos magnéticos definidos na equação (2.5) $\vec{m} = -\gamma \vec{S}$, que assume a forma

$$H_{tro} = -\frac{J}{2\gamma^2\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j. \quad (2.13)$$

Em nosso modelo teórico, consideraremos uma rede ferromagnética com momentos magnéticos uniformes localizados, de forma que é possível assumir

$$\vec{m}_i = m \hat{m}_i, \quad (2.14)$$

onde \hat{m}_i é o vetor unitário correspondente ao momento magnético localizado no sítio i e m é o módulo de cada momento magnético, os quais assumimos serem iguais ¹. Isso permite

¹ Os momentos magnéticos \vec{m}_i são localizados e evoluem no tempo variando em direção e sentido.

reescrever a equação (2.13) na forma

$$H_{tro} = -\frac{J}{2} \left(\frac{m}{\gamma \hbar} \right)^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j. \quad (2.15)$$

Tomando o produto escalar de \vec{m} definido na equação (2.5) temos

$$\begin{aligned} \vec{m} \cdot \vec{m} &= (-\gamma \vec{S}) \cdot (-\gamma \vec{S}) \\ m^2 &= \gamma^2 S^2, \end{aligned} \quad (2.16)$$

que nos leva à igualdade

$$\frac{m}{\gamma \hbar} = \frac{S}{\hbar}. \quad (2.17)$$

Uma vez que o módulo do momento angular de spin S é dado em unidades de \hbar , a razão expressa na equação (2.17) é adimensional e representa o módulo do momento magnético normalizado e o módulo do spin normalizado, respectivamente.

É usual incluir tal razão na constante de troca J , que permanece com unidade de energia. Redefinimos então a constante J , fazendo

$$J \left(\frac{m}{\gamma \hbar} \right)^2 = J \left(\frac{S}{\hbar} \right)^2 \rightarrow J. \quad (2.18)$$

Finalmente, podemos escrever o hamiltoniano da interação de troca para um sistema de momentos magnéticos discretos localizados na forma simplificada

$$H_{tro} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j, \quad (2.19)$$

que em conjunto com o vínculo não linear

$$\hat{m}_i \cdot \hat{m}_i = (m_i^x)^2 + (m_i^y)^2 + (m_i^z)^2 = 1, \quad (2.20)$$

é conhecido como **modelo de Heisenberg isotrópico** (109, 115). $m_i^{x,y,z}$ são as componentes retangulares do versor momento magnético \hat{m}_i .

A constante de troca J define a intensidade da interação, diferindo entre diferentes materiais. Além disso, seu sinal define o ordenamento ferromagnético ou antiferromagnético. Para

$J > 0$ a energia é minimizada com momentos magnéticos paralelos, o que caracteriza o comportamento ferromagnético. Com $J < 0$ a energia do sistema é minimizada com alinhamentos antiparalelos, o que caracteriza o comportamento antiferromagnético. Apesar de considerarmos nesta tese nanoilhas com momentos magnéticos localizados, que serão descritos por um hamiltoniano com um termo de Heisenberg isotrópico, será útil mais à frente um resultado que vem da generalização do modelo para sistemas contínuos. Tal desenvolvimento é apresentado no apêndice A, devido à natureza puramente técnica dos cálculos. Tal resultado, expresso na equação (A.13) mostra que no limite contínuo a energia de troca é proporcional ao módulo quadrado do gradiente da magnetização, se anulando em uma amostra com magnetização perfeitamente uniforme.

Embora a interação de troca seja a responsável pelo ordenamento magnético, não há direção preferencial para o alinhamento em materiais que sejam bem descritos pelo modelo de Heisenberg isotrópico. No entanto, podem existir anisotropias de origens diversas, como a anisotropia magnetocristalina, intrínseca a certos materiais e que favorece o alinhamento ao longo de uma direção ou plano da rede cristalográfica do material. Há ainda a anisotropia de forma, oriunda das interações dipolo-dipolo clássicas e que surge devido à quebra de simetria no material em função das dimensões reduzidas de sistemas nano-estruturados, vide apêndice B. Dessa forma, a configuração magnética do material, ou objeto, dependerá da competição entre as energias envolvidas (troca e anisotrópicas).

Neste trabalho simulamos o comportamento de nanoilhas de Permalloy, material com anisotropia magnetocristalina desprezível. Assim, em nosso modelo, a anisotropia efetiva vem da anisotropia de forma de origem dipolar, que será descrita na próxima seção. Por ora, a título de ilustração e completeza, vamos descrever brevemente um modelo para a anisotropia magnetocristalina de um material.

Redes cristalinas naturalmente assimétricas ou com quebras de simetria devido à presença de interfaces ou impurezas, podem apresentar uma anisotropia magnetocristalina. Tal anisotropia surge da interação spin-órbita e favorece o ordenamento magnético em relação a um eixo,

chamado eixo fácil da magnetização, ou um plano da rede cristalográfica do material, denominado plano fácil da magnetização. Tal anisotropia pode inclusive ser local, variando entre os momentos magnéticos da rede. Os materiais que exibem este tipo de anisotropia são conhecidos como materiais magnéticos duros. Materiais magnéticos que apresentam anisotropia magnetocristalina desprezível, tal como o Permalloy, são denominados materiais magnéticos macios.

Em grande parte dos sistemas de interesse, pode-se modelar a anisotropia de troca generalizando o hamiltoniano (2.19) com um termo de anisotropia na forma

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \zeta m_i^z m_j^z) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [m_i^x m_j^x + m_i^y m_j^y + (1 - \zeta) m_i^z m_j^z], \quad (2.21)$$

onde ζ é um parâmetro de anisotropia adimensional. O hamiltoniano (2.21) em conjunto com o vínculo (2.20), é conhecido como **modelo de Heisenberg anisotrópico**.

Os valores do parâmetro ζ definem a intensidade e o modelo de anisotropia do sistema. Considerando $J > 0$, temos quatro situações possíveis:

- $\zeta = 0$ representa simplesmente o modelo de Heisenberg isotrópico;
- $\zeta = 1$ representa uma anisotropia fortemente planar, pois os momentos magnéticos são essencialmente bidimensionais, distinguindo-se dois modelos específicos: o modelo XY (116) e o modelo do rotor planar (117);
- $0 < \zeta < 1$ representa uma anisotropia de plano-fácil-xy, com intensidade em função do respectivo valor de ζ (H é minimizado por uma magnetização no plano xy);
- $\zeta < 0$ representa uma anisotropia de eixo-fácil, que na forma do hamiltoniano (2.21) está ao longo do eixo-z (H é minimizado por uma magnetização ao longo da direção z).

2.3 Interação Dipolar

A interação dipolar tem origem eletromagnética e pode ser observada entre quaisquer dipolos magnéticos suficientemente próximos. Em um material com momentos magnéticos intrínsecos, cada dipolo correspondente cria um campo ao seu redor e, simultaneamente, tenta se alinhar ao campo magnético efetivo em sua posição. Tal campo efetivo representa a contribuição de todos os campos magnéticos gerados pelos outros dipolos da rede, conhecido por **campo magnetostático** ou **campo desmagnetizante**, além da contribuição de troca e de possíveis campos externos.

Do ponto de vista matemático, os cálculos teóricos para previsões das configurações magnéticas de um material com interações dipolares não é simples, uma vez que dependem da disposição espacial de cada momento magnético na rede. Mesmo por métodos computacionais isso pode ser tarefa, no mínimo, bastante demorada. No entanto, são tais interações dipolares que definem a configuração magnética em função da forma geométrica do objeto considerado, efeito conhecido por **anisotropia de forma**. Em virtude das dimensões reduzidas de um nanomagneto, o entendimento dos efeitos de origem dipolar e, conseqüentemente, da anisotropia de forma, são fundamentais.

É bem conhecido na literatura (110, 111, 118), que um dipolo magnético \vec{m} localizado na origem de um sistema de coordenadas induz um campo vetorial $\vec{B}_{dip}(\vec{r})$ na posição genérica $\vec{r} = r \hat{r}$, dado por

$$\vec{B}_{dip}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left[3 \hat{r} (\vec{m} \cdot \hat{r}) - \vec{m} \right]. \quad (2.22)$$

A energia de um dipolo magnético na presença de um campo magnético é igualmente conhecida, dada em termos do campo \vec{B} por $E = -\vec{m} \cdot \vec{B}$. Assim, se na posição \vec{r} houver um segundo momento de dipolo magnético \vec{m}_2 , a energia de interação dipolo-dipolo considerando o campo gerado por \vec{m}_1 , é dada por

$$E_{1,2} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left[\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2 - 3(\vec{m}_1 \cdot \hat{r})(\vec{m}_2 \cdot \hat{r}) \right]. \quad (2.23)$$

Evidentemente, a energia de interação é a mesma se considerarmos \vec{m}_1 na presença do campo gerado por \vec{m}_2 , ou seja $\vec{m}_2 \cdot \vec{B}_1(\vec{r}) = \vec{m}_1 \cdot \vec{B}_2(\vec{r})$. Dessa maneira, a energia total da interação dipolar entre o par de momentos \vec{m}_1 e \vec{m}_2 distanciados por r , pode ser expressa como

$$E_{par} = E_{1,2} = E_{2,1} = \frac{E_{1,2} + E_{2,1}}{2}. \quad (2.24)$$

A partir da equação (2.23) e da observação sobre a energia entre um par de momentos magnéticos expressa em (2.24), pode-se escrever o hamiltoniano de interação dipolar considerando uma distribuição discreta de N momentos magnéticos localizados, na forma

$$H_{dip} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) \right]. \quad (2.25)$$

Os índices i e j denotam as posições arbitrárias de um par de momentos magnéticos distanciados da distância $r_{i,j}$. O fator $\frac{1}{2}$ é introduzido para evitar dupla contagem (equação 2.24) e as somas são feitas entre todos os pares de dipolos considerados na rede.

Assim como realizado com o hamiltoniano da interação de troca (equação 2.19), podemos reescrever o hamiltoniano (2.25) na forma de uma constante de interação e um termo de interação efetivo adimensional. Considerando uma distância relativa adimensional em termos do parâmetro de rede do material a e que os momentos magnéticos são idênticos, podemos introduzir as transformações

$$r_{i,j} = a \left(\frac{r_{i,j}}{a} \right) \quad \text{e} \quad \vec{m}_i = m \hat{m}_i.$$

Isso nos permite reescrever o hamiltoniano (2.25) na forma simplificada

$$H_{dip} = \frac{D}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \quad (2.26)$$

onde

$$D = \frac{\mu_0 m^2}{4\pi a^3} \quad (2.27)$$

é a constante de interação dipolar. É fácil ver na expressão (2.26) que D tem dimensão de

energia e o termo de interação nos somatórios é adimensional.

Pode-se perceber que a constante da interação dipolar D é sempre positiva, isso mostra que o primeiro termo no hamiltoniano (2.26) é minimizado quando os momentos magnéticos se alinham antiparalelamente, ao passo que o segundo termo, que apresenta um fator 3 em relação ao primeiro, tende a alinhar os momentos magnéticos ao longo da direção que os une. A interação dipolar varia com o inverso do cubo da distância entre os momentos de dipolo, revelando sua natureza de longo alcance. Tais características fazem dela a principal responsável pela formação de domínios magnéticos e pela anisotropia de forma em materiais magnéticos macios como o abordado neste trabalho, o Permalloy-79.

A generalização do resultado expresso em (2.26) para um material com uma distribuição contínua de momentos de dipolo magnéticos pode ser feita de maneira mais simples, se comparada ao desenvolvimento similar ao realizado para a interação de troca, vide apêndice A. Para isso, partimos da equação (2.25) reescrita convenientemente na forma

$$H_{dip} = -\frac{\mu_0}{2} \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \left\{ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{4\pi} \left[\frac{3 \hat{r}_{ij} (\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \vec{m}_j}{r_{ij}^3} \right] \right\} = -\frac{\mu_0}{2} \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{H}_i, \quad (2.28)$$

que representa a soma das interações dos N dipolos com o campo dipolar local \vec{H}_i (gerado pelos próprios dipolos magnéticos). Podemos particionar o material em n elementos de volume ΔV_k com magnetização definida por $\vec{M}_k = \frac{1}{\Delta V_k} \sum_i \vec{m}_i$, onde os momentos magnéticos \vec{m}_i estão contidos em ΔV_k . Por analogia com o último termo de (2.28), podemos escrever a soma das interações de cada volume magnetizado ΔV_k do material com o campo magnético dipolar como

$$-\mu_0 \sum_{k=1}^n \Delta V_k \vec{M}_k \cdot \vec{H}_k. \quad (2.29)$$

No limite em que $n \rightarrow \infty$, a soma tende para o valor da integral tripla

$$E_{dip} = -\frac{\mu_0}{2} \int_V dv \vec{M} \cdot \vec{H}, \quad (2.30)$$

em que a integral é calculada sobre todo o volume V do material.

O resultado expresso na equação (2.30) é denominada energia dipolar ou **energia magnetostática**. O campo \vec{H} no interior do material é conhecido por campo dipolar, ou campo magnetostático, ou ainda **campo desmagnetizante**, devido à sua tendência natural de alinhamento em sentido contrário à magnetização. Tal energia representa a interação da magnetização do material com o campo criado por ela mesma.

Como já comentado anteriormente, as interações dipolares em ferromagnetos são as responsáveis diretas pela anisotropia de forma e, assim, será interessante discutirmos em mais detalhes a relação entre o campo desmagnetizante e a anisotropia de forma resultante. No entanto, em nosso modelo teórico implementado computacionalmente, utilizaremos apenas o modelo discreto representado no hamiltoniano da equação (2.26), levando a um desenvolvimento numérico que nos dá diretamente as configurações magnéticas para as nanoilhas estudadas, incluindo os respectivos efeitos esperados da anisotropia de forma correspondente. Diante do contexto, uma discussão teórica relevante sobre a anisotropia de forma é feita no apêndice B, a fim de não sobrecarregar o texto principal do trabalho com uma discussão longa e puramente técnica. O principal resultado teórico que vale a pena adiantar, é que para partículas muito finas, como as nanoilhas bidimensionais que são o cerne desta tese, a anisotropia de forma favorece uma magnetização paralela ao plano da nanoilha, confirmando nossos cálculos numéricos.

Seguindo nossa ordem de apresentação dos conceitos fundamentais em magnetismo, imprescindíveis na realização deste trabalho de pesquisa, falta definirmos a interação dos momentos de dipolo magnéticos com um campo magnético externo.

2.4 Interação Zeeman

A interação de um dipolo magnético com um campo magnético externo é velha conhecida na Física e chamada de **Interação Zeeman**, devido ao efeito Zeeman observado experimentalmente em 1896 por Pieter Zeeman (119). Similar ao desenvolvimento da seção anterior, a respectiva energia Zeeman de interação de um momento magnético individual na presença de

um campo magnético externo é dada usualmente como

$$E = -\vec{m} \cdot \vec{B}^{ext} = -\mu_0 \vec{m} \cdot \vec{H}^{ext}. \quad (2.31)$$

É fácil observar que ao considerar o campo externo aplicado a um momento de dipolo previamente orientado em uma direção arbitrária, surgirá um torque que tende a alinhá-lo paralelamente ao campo externo, minimizando a energia de interação expressa em (2.31).

Considerando uma distribuição discreta de momentos magnéticos, podemos escrever o hamiltoniano de interação dos momentos magnéticos com o campo magnético externo H_{Zee} simplesmente como a soma das contribuições individuais de cada momento de dipolo na forma expressa em (2.31), ou seja

$$H_{Zee} = -\mu_0 \sum_{i=1}^N \vec{m}_i \cdot \vec{H}_i^{ext}, \quad (2.32)$$

onde \vec{H}_i^{ext} é o campo externo na posição do i -ésimo momento magnético. Consideramos aqui o campo \vec{H}^{ext} por conveniência, já que \vec{H} e \vec{M} são expressos na mesma unidade e coexistem dentro do material. Assim, analogamente às seções anteriores, é possível escrever H_{Zee} como uma constante que multiplica um termo de interação adimensional.

Considerando novamente momentos magnéticos idênticos com seus respectivos unitários na forma $\vec{m}_i = m \hat{m}_i$ e definindo um campo magnético adimensional no i -ésimo sítio da rede, em termos da magnetização de saturação M_S do material,

$$\vec{h}_i^{ext} = \frac{\vec{H}_i^{ext}}{M_S}, \quad (2.33)$$

é fácil ver que podemos reescrever a hamiltoniana de interação Zeeman como

$$H_{Zee} = -Z \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext}, \quad (2.34)$$

onde

$$Z = \mu_0 M_S m \quad (2.35)$$

é a constante de interação Zeeman em unidades de energia. Cabe ressaltar no nosso caso, em que adotamos o SI (Sistema Internacional de Unidades), que todas as constantes das interações

fundamentais com dimensão de energia (J , D e Z) são dadas em joules [J].

Evidentemente, no caso de um campo magnético externo uniforme, ou seja, de mesma intensidade em todos os sítios i teremos

$$\vec{h}^{ext} = \frac{\vec{H}^{ext}}{M_S}$$

e assim H_{Zee} é dado simplesmente por

$$H_{Zee} = -Z \sum_{i=1}^N \hat{m}_i \cdot \vec{h}^{ext}. \quad (2.36)$$

Pode-se generalizar a energia de interação Zeeman para uma distribuição contínua de momentos magnéticos de forma análoga ao procedimento realizado para a interação dipolar. Particiona-se o volume do material em n elementos de volume ΔV_k , os quais contem muitos momentos magnéticos \vec{m}_i . Para cada elemento de volume, podemos associar um vetor magnetização local dado por $\vec{M}_k = \frac{1}{\Delta V_k} \sum_i \vec{m}_i$, de forma que a energia de interação em termos da magnetização de cada elemento de volume ΔV_k é expressa pelo somatório

$$-\mu_0 \sum_{k=1}^n \Delta V_k \vec{M}_k \cdot \vec{H}_k^{ext}. \quad (2.37)$$

No limite em que $n \rightarrow \infty$, a soma pode ser substituída pela integral no volume V do material

$$E_{Zeen} = -\mu_0 \int_V dv \vec{M} \cdot \vec{H}^{ext}. \quad (2.38)$$

O valor de tal integral é denominada **energia Zeeman** e representa a energia associada à aplicação de um campo magnético externo a um material com uma distribuição praticamente contínua de momentos de dipolo magnéticos.

3 Modelo Teórico e Simulação Computacional

Mesmo em dimensões nanométricas, um ferromagneto real possui um número muito grande de momentos magnéticos atômicos. Isso torna o tratamento analítico de tais sistemas consideravelmente complicado e, particularmente, impraticável na grande maioria dos casos. Assim, as possibilidades de soluções analíticas são restritas a poucos sistemas, que em geral podem ser simplificados em relação ao caso real devido à simetrias ou condições assintóticas, como por exemplo os desenvolvimentos do apêndice B.

Sob o ponto de vista experimental, é crescente o interesse pelo estudo de sistemas magnéticos nano-estruturados, por motivos evidentes suficientemente discutidos no capítulo 1. Sem dúvida, as evidências experimentais são fundamentais e imprescindíveis no entendimento dos fenômenos físicos e na validação dos respectivos modelos teóricos, já que traduzem o comportamento de fato dos sistemas estudados, em qualquer das áreas da Física. No entanto, ainda há um relevante desafio na fabricação precisa e repetitível de estruturas em escala nanométrica, o que limita em muito o número e a variedade de experimentos possíveis de serem realizados na pesquisa científica de um determinado sistema.

Sob este contexto, a simulação computacional tem ganhado espaço crescente nas pesquisas em Física de sistemas complexos, em nosso caso, sistemas de muitos momentos magnéticos interagentes. Nas últimas décadas, as simulações numéricas têm se consolidado como uma poderosa ferramenta no estudo de nanopartículas magnéticas, podendo simular situações diversas simultaneamente e em condições muito próximas às adotadas em laboratório. Os resultados numéricos fornecem mais uma fonte de resultados e previsões que podem ser comparados aos

obtidos por modelos analíticos ou observações experimentais. Além disso, a simulação pode ser especialmente útil na economia de tempo e material em diversas pesquisas experimentais. Visto que é possível simular diferentes configurações, pode-se usar as observações numéricas como um guia para restringir as medidas experimentais a um número menor do que aquele que seria necessário sem o conhecimento prévio do sistema, revelado pela simulação computacional.

Existe uma diversidade de métodos e até programas livres para a simulação de sistemas magnéticos. Neste trabalho utilizamos um código computacional próprio, desenvolvido em nosso grupo de pesquisa, baseado no método conhecido por **dinâmica de spin** utilizando a linguagem de programação *Fortran 90*. Este capítulo apresenta os detalhes de nosso modelo teórico e a metodologia computacional empregada na descrição e estudo das nanoilhas ferromagnéticas.

3.1 Hamiltoniano do Modelo

As nanoilhas ferromagnéticas são modeladas por momentos de dipolo magnéticos discretos e localizados nos sítios i de uma rede cúbica de Bravais com interações de troca e dipolo-dipolo, discutidas no capítulo 2. Na presença de um campo magnético externo, as equações (2.19), (2.26) e (2.34) permitem escrever o Hamiltoniano das interações magnéticas do nosso modelo na forma

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{D}{2} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - Z \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext}, \quad (3.1)$$

onde o vetor unitário \hat{m}_i indica a direção e o sentido do i -ésimo momento magnético da rede. O Hamiltoniano (3.1) é composto, respectivamente, pelos termos de interação de troca, dipolar e de interação com um campo magnético externo adimensional \vec{h}_i^{ext} (definido na equação (2.33)).

Em nosso modelo ferromagnético a constante de interação de troca J é sempre positiva, e assim tal termo é minimizado quando os momentos magnéticos estão alinhados paralelamente. Tal termo é considerado apenas entre primeiros vizinhos. O segundo termo contabiliza a interação clássica entre os momentos de dipolo magnético, e é responsável pela anisotropia

de forma, sendo minimizado por uma configuração intrínseca da magnetização em cada nanopartícula considerada. Finalmente, o terceiro termo é o termo Zeeman de interação com um campo magnético externo e é minimizado pelo alinhamento dos momentos com tal campo.

3.2 Dinâmica da Magnetização

Um usual método matemático determinista que nos dá a evolução temporal de sistemas magnéticos conservativos, e que será usado neste trabalho, é conhecido por **dinâmica de spins**. Neste método, o sistema é modelado por um Hamiltoniano, a exemplo do apresentado na seção anterior 3.1, e a evolução temporal do sistema pode ser descrita pela equação de movimento de Heisenberg. Obtendo-se o conjunto de equações diferenciais na representação dos operadores de spin de Heisenberg, adota-se o limite semi-clássico, onde tratamos os operadores de spin como vetores clássicos tridimensionais. Partindo de uma configuração inicial, a evolução temporal é obtida via solução numérica do conjunto de equações diferenciais.

Considere a equação de movimento de Heisenberg para o momento angular de spin \vec{S}_i , localizado no sítio i , dada por (120)

$$\mathbf{i}\hbar \frac{d\vec{S}_i}{dt} = [\vec{S}_i, H], \quad (3.2)$$

onde H é o Hamiltoniano do sistema, $\mathbf{i} \rightarrow \mathbf{i}^2 = -1$ é a unidade imaginária e $[\vec{S}_i, H] = \vec{S}_i H - H \vec{S}_i$ é o comutador entre o operador de spin \vec{S}_i e o hamiltoniano H . Tal equação deve ser desenvolvida para cada componente cartesiana de \vec{S}_i .

O desenvolvimento da equação (3.2) para o hamiltoniano (3.1) é feito no apêndice (C), em vista do caráter longo e puramente matemático dos cálculos. O resultado, no entanto, nos é interessante apresentar agora, e é expresso por

$$\frac{d\vec{S}_i}{dt} = \gamma \vec{S}_i \times \vec{B}_i, \quad (3.3)$$

onde \vec{B}_i é o campo de indução magnética efetiva no sítio i , e pode ser obtido a partir do hamiltoniano H do sistema.

A equação diferencial (3.3) para os operadores de spin \vec{S}_i na representação de Heisenberg descreve a precessão clássica de Larmor para um dipolo magnético em torno de um campo magnético efetivo local. No nosso caso, tal campo efetivo é decorrente do hamiltoniano H e assim incorpora as contribuições dos campos de troca, desmagnetizante e externo, como veremos adiante.

A fim de tomar o limite clássico, em que os operadores de spin podem ser modelados por vetores tridimensionais, usaremos novamente a relação entre momento magnético e momento angular de spin, equação (2.5), tal que $\vec{m} = -\gamma \vec{S}$, onde $\vec{m}_i = m \hat{m}_i$ é um vetor tridimensional. Na ausência de magnetização $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$ e é fácil mostrar que (3.3) pode ser reescrita na forma

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\mu_0 (\vec{m}_i \times \vec{H}_i). \quad (3.4)$$

Tal equação, descreve a precessão clássica do momento magnético i em torno do **campo magnético efetivo local** \vec{H}_i , mas não prevê o alinhamento do momento magnético na direção do campo, que precessa assim indefinidamente. Em 1935, Landau e Lifshitz (121), introduziram na equação 3.4 um torque de “*damping*” definindo uma equação que ficou conhecida como equação de Landau-Lifshitz (equação de LL):

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\mu_0 (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\mu_0 \alpha}{|\vec{m}_i|} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}), \quad (3.5)$$

onde α é um parâmetro fenomenológico, conhecido como constante de “*damping*”, ou parâmetro de amortecimento. O valor de α é característico de cada material e é geralmente obtido experimentalmente. O parâmetro α determina a taxa de dissipação de energia do sistema e é adimensional.

A equação de LL descrevia bem os fenômenos observados em materiais com pequenos valores de *damping*, mas conduzia a grandes discrepâncias em relação aos resultados experimentais fora desse regime. Em 1955, Gilbert (122) modificou o termo de *damping* da equação de LL e obteve sucesso entre suas previsões teóricas e os resultados experimentais. Assim, a equação ficou conhecida como equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (equação de LLG), expressa

por

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\mu_0 (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{|\vec{m}_i|} \left(\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} \right). \quad (3.6)$$

Nesse formato, a equação 3.6 descreve a evolução temporal do momento magnético em torno do campo \vec{H}_i sem amortecimento ($\alpha = 0$), sistema perfeitamente conservativo, e com amortecimento ($\alpha > 0$), ou seja, o momento magnético descreve uma precessão amortecida, espiralando em torno do campo enquanto dissipa energia. Essas situações são ilustradas na figura (3.1).

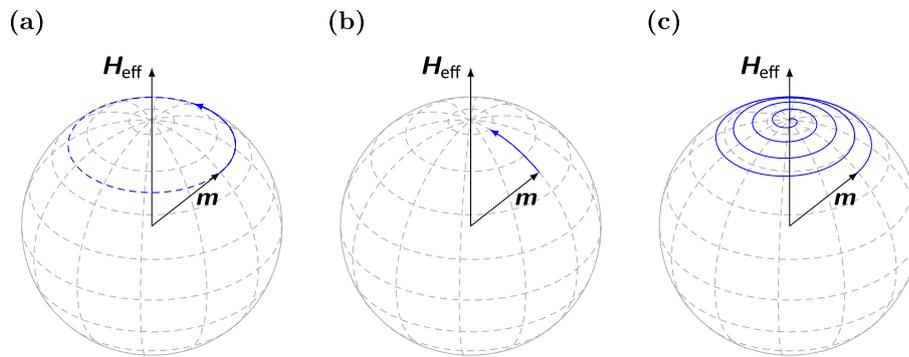


Figura 3.1 – Evolução temporal de um momento magnético genérico \mathbf{m} em torno de um campo efetivo \mathbf{H}_{eff} estático. (a) Dinâmica sem amortecimento ($\alpha = 0$), o momento precessa com energia constante em torno de \mathbf{m} . (b) Se ($\alpha > 0$), há um torque de amortecimento que tende a paralelizar \mathbf{m} e \mathbf{H}_{eff} . (c) Na dinâmica resultante com amortecimento ($\alpha > 0$), o momento magnético espirala em torno do campo dissipando energia até o estado de mais baixa energia, alinhado a \mathbf{H}_{eff} . Figura disponível em <http://micromagnetics.org/micromagnetism/>.

Tomando o produto escalar entre \vec{m}_i e os dois lados da equação (3.6) temos

$$\begin{aligned} \vec{m}_i \cdot \frac{d\vec{m}_i}{dt} &= -\gamma \mu_0 \vec{m}_i \cdot (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{|\vec{m}_i|} \vec{m}_i \cdot \left(\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} \right) \\ &= \gamma \mu_0 \vec{m}_i \cdot (\vec{H}_i \times \vec{m}_i) - \frac{\alpha}{|\vec{m}_i|} \vec{m}_i \cdot \left(\frac{d\vec{m}_i}{dt} \times \vec{m}_i \right). \end{aligned}$$

Dada a identidade vetorial $\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{b} \cdot (\vec{c} \times \vec{a}) = \vec{c} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$ (118), podemos escrever

$$\vec{m}_i \cdot \frac{d\vec{m}_i}{dt} = \gamma \mu_0 \vec{H}_i \cdot (\vec{m}_i \times \vec{m}_i) - \frac{\alpha}{|\vec{m}_i|} \frac{d\vec{m}_i}{dt} \cdot (\vec{m}_i \times \vec{m}_i) = 0. \quad (3.7)$$

Mostrando assim que a variação temporal do momento magnético é perpendicular a ele

mesmo.

A fim de avaliar a evolução temporal do módulo do momento magnético podemos avaliar

$$\frac{d}{dt}(\vec{m}_i \cdot \vec{m}_i) = \frac{d\vec{m}_i}{dt} \cdot \vec{m}_i + \vec{m}_i \cdot \frac{d\vec{m}_i}{dt} = 2 \vec{m}_i \cdot \frac{d\vec{m}_i}{dt}.$$

Usando o resultado (3.7), obtemos

$$\frac{d}{dt}(m_i^2) = 0. \quad (3.8)$$

Os resultados expressos em (3.7) e (3.8) mostram formalmente que a equação de LLG preserva a norma do momento magnético, restringindo sua evolução temporal ao movimento de precessão em torno do campo efetivo sempre com módulo constante.

A forma expressa na equação (3.6), é conhecida como **forma implícita** da equação de LLG, porque a variação temporal do momento magnético $\left(\frac{d\vec{m}}{dt}\right)$ aparece em ambos os membros dessa equação, não podendo ser isolada diretamente. Evidentemente, o termo de amortecimento só existe na presença do campo \vec{H}_i e assim é possível reescrever (3.6) em uma forma mais conveniente. Para isso, tomemos o produto vetorial entre \vec{m}_i e os dois lados da equação (3.6) na forma

$$\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\gamma \mu_0 \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{m_i} \vec{m}_i \times \left(\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} \right).$$

Usando a identidade vetorial $\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c})\vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b})\vec{c}$ (118), podemos reescrever o último termo da relação acima, obtendo

$$\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\gamma \mu_0 \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{m_i} \left[\left(\vec{m}_i \cdot \frac{d\vec{m}_i}{dt} \right) \vec{m}_i - (\vec{m}_i \cdot \vec{m}_i) \frac{d\vec{m}_i}{dt} \right]. \quad (3.9)$$

Como $\vec{m}_i \cdot \frac{d\vec{m}_i}{dt} = 0$, a expressão (3.9) pode ser simplificada para

$$\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\gamma \mu_0 \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) - \alpha m_i \frac{d\vec{m}_i}{dt}. \quad (3.10)$$

Levando a identidade (3.10) no último membro da equação (3.6), teremos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} &= -\mu_0 (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{m_i \gamma} \left[-\gamma \mu_0 \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) - \alpha m_i \frac{d\vec{m}_i}{dt} \right] \\ &= -\mu_0 (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) - \frac{\mu_0 \alpha}{m_i} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) - \frac{\alpha^2}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt}, \end{aligned}$$

logo

$$\frac{1}{\gamma} (1 + \alpha^2) \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\mu_0 \left[(\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{m_i} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) \right],$$

permitindo escrever a forma mais elegante

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\frac{\mu_0}{1 + \alpha^2} \left[(\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{m_i} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) \right]. \quad (3.11)$$

A equação (3.11) é conhecida como **forma explícita** da equação de LLG. Nessa formulação os torques de precessão e amortecimento são expressos explicitamente em função do campo \vec{H}_i .

A equação de LLG (3.11) descreve a evolução temporal de um único momento magnético tridimensional, representado evidentemente três equações acopladas a serem resolvidas, uma para cada componente cartesiana de \vec{m}_i . Em uma nanoilha finita, composta por N momentos magnéticos localizados de acordo com nosso modelo, teremos um conjunto de $3N$ equações diferenciais acopladas a resolver. Evidentemente a complexidade do sistema restringe a solução a métodos numéricos.

Vale ressaltar que em nosso caso, o campo magnético \vec{H}_i não é simplesmente um campo magnético externo e estático, como mostrado na figura (3.1). \vec{H}_i é o valor do campo interno no respectivo sítio i , incluindo a contribuição individual dos campos de troca, dipolar e de um eventual campo magnético externo. Dessa forma, cada momento magnético \vec{m}_i descreve uma precessão amortecida em torno do seu respectivo **campo magnético efetivo local** \vec{H}_i , que também não é estático durante a evolução do sistema.

O campo magnético efetivo \vec{H}_i pode ser obtido diretamente do hamiltoniano do sistema

por

$$\vec{H}_i = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i}. \quad (3.12)$$

Evidentemente, pode-se obter de H a energia de uma configuração inicial qualquer dos momentos magnéticos na nanoilha. A partir da configuração inicial, a dinâmica futura do sistema pode ser obtida pela integração numérica do conjunto de equações correspondente. Discutiremos no apêndice D o método de integração do tipo preditor-corretor usado no código computacional deste trabalho.

Lembrando que podemos escrever $\vec{B}_i = \mu_0 \vec{H}_i$, é trivial transformar as equações para a representação em função do campo local \vec{B}_i , sendo perfeitamente equivalente as duas formulações.

Finalmente, temos definidas todas as ferramentas teóricas necessárias para simular nossos objetos de estudo. As próximas seções apresentam os detalhes técnicos do método de simulação e os parâmetros do material considerado.

3.3 Simulação Micromagnética

Como mencionado na introdução deste capítulo, sistemas magnéticos reais são constituídos por muitos momentos magnéticos atômicos, o que torna o tratamento analítico destes sistemas consideravelmente complicado e faz da simulação numérica uma alternativa prática de investigação teórica. No entanto, mesmo no estudo de objetos em dimensões nanométricas, é inviável tratar o problema considerando todos os momentos atômicos reais, até mesmo por métodos numéricos.

Como em nosso modelo estamos considerando um ferromagneto macio, ou seja, sem anisotropia magnetocristalina, a única anisotropia presente é a anisotropia de forma, naturalmente definida pelas interações dipolares de longo alcance, vide apêndice B. Assim, em nossos cálculos numéricos consideraremos todas as interações entre os momentos do modelo, sem raio de corte, a fim de computar a anisotropia de forma o mais próximo possível de um sistema real. Isso significa calcular $N(N - 1)$ interações dipolo-dipolo em um sistema com N dipolos

Modelo	Descrição	Escala de Comprimento
Atômico	<i>Cálculos ab initio</i> quânticos	$< 1 \text{ nm}$
Micromagnético	Magnetização contínua	$1 - 1000 \text{ nm}$
Domínios Magnéticos	Subdivisão em domínios magnéticos	$1 - 1000 \mu\text{m}$
Teoria de Fases	<i>Ensembles</i> de domínios magnéticos	$> 0,1 \text{ mm}$

Tabela 3.1 – Modelos teóricos para os materiais ferromagnéticos e as respectivas escalas de comprimento onde são válidos.

magnéticos. Em escala real, o número de momentos magnéticos (N) por unidade de volume é um número extremamente grande e torna impraticável o desenvolvimento numérico para as nossas atuais velocidades de processamento. Uma estimativa da relação entre o número de momentos magnéticos em escala atômica real e o número que vamos adotar na simulação, considerando a aproximação descrita a seguir, será discutido na seção 3.5.

Pelo exposto até aqui, cabe ressaltar que há diferentes modelos com o fim de descrever o comportamento de materiais ferromagnéticos numa escala macroscópica, a partir de considerações do conhecimento intrínseco da matéria condensada. Dependendo das simplificações introduzidas por um modelo particular, geralmente ele se mostra capaz de descrever o sistema com precisão apenas sob certas premissas e numa escala limitada de dimensões. A tabela (3.1) apresenta uma visão geral dos modelos estabelecidos para a descrição de ferromagnetos em diferentes escalas de comprimento. Em vista de nossas nanopartículas de interesse terem dimensões de dezenas a centenas de nanômetros, adotaremos a teoria ou **aproximação micromagnética**.

O Micromagnetismo descreve a amostra magnética como um campo clássico de vetores magnetização $\vec{M}(\vec{r}, t)$, que representam as médias espaciais dos momentos magnéticos atômicos. A premissa básica do modelo é a de que a magnetização é contínua ao longo da amostra, podendo variar suavemente em direção, sem descontinuidades. Isso permite particionar a amostra em células de tamanho específico, onde pode-se considerar que a direção e sentido de alinhamento dos k momentos de dipolo magnético do material real seja aproximadamente o mesmo. Assim, pode-se associar um vetor magnetização local \vec{M}_i à densidade volumétrica de

momentos de dipolo atômicos $m_k^{\vec{\text{atômico}}}$ na forma

$$\vec{M}_i = \frac{1}{V_{cel}} \sum_k \vec{m}_k^{\text{atômico}} = \frac{1}{V_{cel}} \vec{m}_i. \quad (3.13)$$

onde V_{cel} é o volume da célula de partição do sistema e \vec{m}_i é o **momento magnético da célula**.

A figura (3.2) ilustra qualitativamente a aproximação micromagnética considerada. O sistema é particionado em células cúbicas de aresta a , tal que $V_{cel} = a^3$. O parâmetro a é escolhido de forma que os inúmeros momentos de dipolo atômico contidos em cada célula, possam ser substituídos por um único momento magnético da célula, reduzindo substancialmente o número de interações a se considerar no cálculo numérico. Dessa forma, ao invés de tratar as interações entre momentos atômicos, computaremos apenas as interações entre os momentos magnéticos das células.

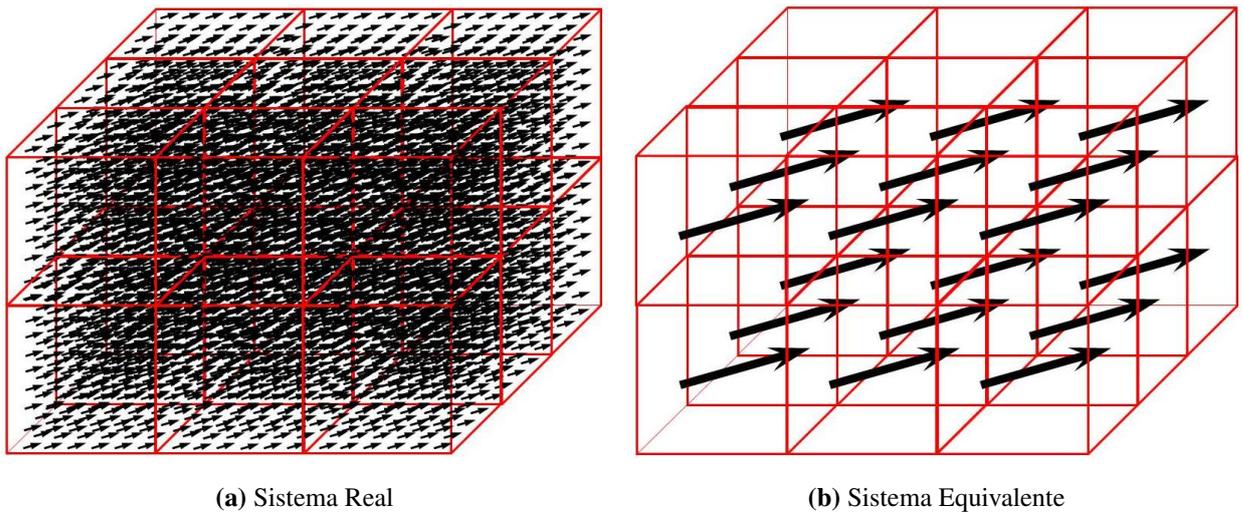


Figura 3.2 – Esquema ilustrativo da aproximação micromagnética. (a) Sistema real, constituído por muitos momentos magnéticos atômicos. (b) Sistema equivalente do ponto de vista micromagnético, os momentos magnéticos atômicos são substituídos por um único momento magnético resultante localizado no centro de cada célula.

Implícitamente, a premissa da aproximação é a de que a magnetização do material está saturada em M_S , que é a **magnetização de saturação**, um parâmetro do material considerado. Assim pode-se escrever

$$\vec{M}_i = M_S \hat{m}_i, \quad (3.14)$$

onde agora \hat{m}_i é o vetor unitário que indica a direção e o sentido da magnetização e, con-

sequentemente, do momento magnético total da célula i . Nessa representação, os vetores magnetização \vec{M}_i e, evidentemente, \vec{m}_i variam apenas em direção e sentido. Tal fato e o uso da definição (3.13) permitem escrever

$$\vec{m}_i = m \hat{m}_i = V_{cel} \vec{M}_i = (M_S V_{cel}) \hat{m}_i, \quad (3.15)$$

ou seja,

$$m = M_S V_{cel}. \quad (3.16)$$

A escolha do novo parâmetro de rede a é feita a partir do conhecimento do **comprimento de troca** λ do material, que nos dá a ordem de grandeza do alcance da interação de troca, ou seja, até que distância a interação de troca consegue manter os momentos magnéticos atômicos alinhados na mesma direção. Dessa forma, o novo parâmetro de rede deve ser menor que o comprimento de troca do material considerado, ou seja, deve-se respeitar a condição $a < \lambda$, a fim de garantir que os momentos atômicos estarão realmente alinhados dentro de cada célula de trabalho.

O comprimento de troca característico de um material ferromagnético é dado por (123)

$$\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}}, \quad (3.17)$$

onde A é a **dureza da constante de troca**, ou constante de “stiffness” do material. A constante A é a constante fundamental para descrever um material ferromagnético, sendo intrínseca a ele e determinada experimentalmente. A constante J , depende da natureza magnética do material através de A , da coordenação cristalográfica da rede e do parâmetro de rede a . Uma discussão mais completa sobre a constante de “stiffness” é feita no apêndice (A).

Embora haja uma certa arbitrariedade na escolha do tamanho da célula micromagnética, uma vez que basta simplesmente que $a < \lambda$, a escolha deve ser tal que o volume da célula de partição deve ser pequeno o suficiente para que os momentos atômicos no seu interior estejam praticamente alinhados e, simultaneamente, tal volume deve ser grande o suficiente para conter um número razoável de momentos atômicos, ou seja, que reduza efetivamente o número de

interações a serem computadas.

O próximo passo na aplicação da aproximação micromagnética é renormalizar as constantes das interações fundamentais J , D e Z para a nova partição do sistema. No desenvolvimento do apêndice A, é mostrado que a constante de acoplamento da energia de troca entre células a ser considerada é

$$J = 2Aa. \quad (3.18)$$

Uma vez que todo o referencial matemático apresentado até aqui foi desenvolvido considerando a interação entre momentos magnéticos idênticos de módulo m , uma das mudanças efetivas que temos de fazer para considerar a aproximação micromagnética é a transformação $m \rightarrow M_S V_{cel}$ nas relações apropriadas, escolhendo cuidadosamente o novo parâmetro de rede a da partição, onde $V_{cel} = a^3$, e usando o respectivo valor de M_S do material a ser simulado.

Dessa forma, podemos renormalizar as constantes das interações dipolar, equação (2.27), e Zeeman, equação (2.35), obtidas no capítulo 2, fazendo

$$D = \frac{\mu_0 m^2}{4\pi a^3} = \frac{\mu_0 (M_S V_{cel})^2}{4\pi a^3} = \frac{\mu_0 M_S^2 a^3}{4\pi}, \quad (3.19)$$

e

$$Z = \mu_0 M_S m = \mu_0 M_S (M_S V_{cel}) = \mu_0 M_S^2 a^3. \quad (3.20)$$

As constantes das interações dipolar e Zeeman ainda podem ser reescritas numa forma mais conveniente em termos do comprimento de troca λ que é dado pela equação (3.17) e do acoplamento efetivo da interação de troca J dado na equação (3.18). Assim podemos escrever as forma simplificadas

$$D = \frac{\mu_0 M_S^2 a^3}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\mu_0 M_S^2}{2A} \right) (2Aa) a^2 = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda} \right)^2 J, \quad (3.21)$$

e

$$Z = \mu_0 M_S^2 a^3 = \left(\frac{\mu_0 M_S^2}{2A} \right) (2Aa) a^2 = \left(\frac{a}{\lambda} \right)^2 J. \quad (3.22)$$

Como $\frac{a}{\lambda}$ é uma razão adimensional, as equações (3.21) e (3.22) revelam claramente

que as constantes das interações tem dimensão de energia. Isso permite-nos reescrever o Hamiltoniano para as nossas nanoilhas na forma.

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{D}{2J} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \frac{Z}{J} \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext} \right\}. \quad (3.23)$$

O termo entre chaves na equação (3.23) é um termo adimensional efetivo, que descreve as interações do sistema. Isso permite-nos escrever convenientemente o Hamiltoniano adimensional do sistema na forma

$$\mathcal{H} = \frac{H}{J} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{D}{2J} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \frac{Z}{J} \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext}. \quad (3.24)$$

Renormalizadas as constantes fundamentais das interações, podemos usar a equação (3.12) para calcular o campo magnético efetivo \vec{H}_i na posição do i -ésimo momento de dipolo, e assim computar a evolução temporal do sistema através da integração da equação de LLG, equação (3.11). No entanto, na prática de implementação do código computacional, é melhor trabalhar com equações adimensionais, redimensionando depois os dados de saída do programa para as respectivas grandezas em unidades do SI, diminuindo a chance de erros.

Dessa forma, podemos calcular diretamente, a partir da equação (3.24), o campo magnético efetivo adimensional no sítio i , na forma análoga da equação (3.12)

$$\vec{h}_i = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \hat{m}_i}, \quad (3.25)$$

que nos é mais útil na escrita prática do código. O fator de conversão para o respectivo campo magnético efetivo \vec{H}_i pode ser feito facilmente a partir da equação (3.12)

$$\vec{H}_i = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial H}{\partial \vec{m}_i} = -\frac{J}{\mu_0 m} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \hat{m}_i} = \frac{J}{\mu_0 m} \vec{h}_i.$$

Usando os valores de $J = 2Aa$, $m = M_S V_{cel} = M_S a^3$, dados respectivamente nas equações (3.15) e (3.18), e a expressão (3.17) para o comprimento de troca λ do material, podemos

definir a constante de conversão β na forma

$$\frac{J}{\mu_0 m} = \frac{2Aa}{\mu_0 M_S a^3} = \left(\frac{2A}{\mu_0 M_S^2} \right) \frac{M_S}{a^2} = \left(\frac{\lambda}{a} \right)^2 M_S = \beta. \quad (3.26)$$

Assim, o campo magnético efetivo \vec{H}_i , dado em [A/m] e o respectivo campo de indução magnética efetiva \vec{B}_i , dado em [T], podem ser obtidos diretamente de \vec{h}_i pelas relações

$$\vec{H}_i = \frac{\vec{B}_i}{\mu_0} = \beta \vec{h}_i. \quad (3.27)$$

Falta, finalmente, reescrevermos a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert sob os parâmetros da aproximação micromagnética e em uma forma adimensional, que permita a implementação numérica clara e organizada do conjunto de equações, o que será feito na seção seguinte.

3.4 Versão Adimensional da Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert

Partindo da forma explícita da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, dada na expressão (3.11), podemos modificá-la de acordo com o nosso modelo discreto de partição do sistema. Para isso, devemos substituir as expressões para o momento magnético das células de partição, dada na equação (3.15), e para o campo magnético efetivo, dada na equação (3.27), conforme segue

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{m}_i}{dt} = -\frac{\mu_0}{1+\alpha^2} \left[(\vec{m}_i \times \vec{H}_i) + \frac{\alpha}{m_i} \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_i) \right],$$

$$\frac{m}{\gamma} \frac{d\hat{m}_i}{dt} = -\frac{\mu_0}{1+\alpha^2} \left[m (\hat{m}_i \times (\beta \vec{h}_i)) + \frac{\alpha}{m} m^2 \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times (\beta \vec{h}_i)) \right].$$

É fácil ver que os módulos dos momentos de dipolo m se cancelam e um simples rearranjo de termos permite escrever

$$\frac{d\hat{m}_i}{dt} = -\mu_0 \beta \gamma \left\{ \frac{1}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{h}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{h}_i) \right] \right\}. \quad (3.28)$$

Como o parâmetro de amortecimento α é adimensional, todo o termo entre chaves também é adimensional. Dessa forma, por coerência das unidades, o produto $\mu_0 \beta \gamma$ deve ter a

mesma unidade do lado esquerdo da equação, que é de inverso de tempo, no SI [1/s], o que é fácil de verificar

$$(\mu_0 \beta)(\gamma) \longrightarrow [T] \left[\frac{1}{T \cdot s} \right] = \left[\frac{1}{s} \right].$$

Assim, é útil definir o parâmetro com dimensão de inverso de tempo

$$v = \mu_0 \beta \gamma = \mu_0 M_S \gamma \left(\frac{\lambda}{a} \right)^2. \quad (3.29)$$

O parâmetro v pode ser usado como um fator de conversão entre tempo real e um tempo computacional adimensional usado na simulação. Para isso definimos o incremento de tempo computacional adimensional $d\tau$ da forma

$$d\tau = v dt. \quad (3.30)$$

Fazendo as substituições $\mu_0 \beta \gamma \longrightarrow v$ e $v dt \longrightarrow d\tau$ na equação (3.28) obtemos finalmente

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = -\frac{1}{1 + \alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{h}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{h}_i) \right]. \quad (3.31)$$

A equação (3.31) é a versão adimensional da equação explícita de Landau-Lifshitz-Gilbert, ou seja, a variação temporal do momento de dipolo representado pelo vetor unitário \hat{m}_i é dada explicitamente em função do campo efetivo local \vec{h}_i e todas as variáveis desta equação são adimensionais.

3.5 Parâmetros do Material Simulado

Atualmente, há inúmeros materiais sintéticos que apresentam comportamento ferromagnético em temperatura ambiente. Dentre tais materiais, há uma série de isolantes ferromagnéticos com estruturas atômicas diversas, e ligas metálicas à base de ferro (Fe), níquel (Ni) ou cobalto (Co) (10). Em especial, uma liga de ferro e níquel, conhecida por “Permalloy” tem sido o principal material empregado na fabricação e pesquisa de nano-estruturas ferromagnéticas nos últimos anos. Especialmente, por ter anisotropia magnetocristalina pratica-

Constantes fundamentais do Permalloy-79		
Constante	Símbolo	Valor adotado
Constante de “stiffness”	A	$1,3 \times 10^{-11} J/m$
Magnetização de saturação	M_S	$8,6 \times 10^5 A/m$
Parâmetro de amortecimento	α	0,01
Parâmetro de rede real	a_0	0,355 nm

Tabela 3.2 – Valores das constantes fundamentais usadas nas simulações, considerando a liga Permalloy-79 como o material de fabricação das nanoilhas.

mente desprezível, sua configuração de magnetização depende fortemente da anisotropia de forma do nanomagnet, tornando-o um campo frutífero para pesquisas nesse sentido.

Neste trabalho, simulamos nanoilhas usando os parâmetros da liga Permalloy conhecida por **Permalloy-79** (Py-79), que significa uma liga com 21% de ferro e 79% de níquel. Os valores fundamentais do Py-79 adotados, que são a dureza da constante de troca A , a magnetização de saturação M_S e o parâmetro de amortecimento α estão resumidos na tabela (3.2). Embora os valores de A e M_S sejam usuais, não há um consenso nas referências acerca do valor de α . Dessa forma, usamos o valor de $\alpha = 0,01$ geralmente usado em trabalhos teóricos (124–127) e referendado experimentalmente (128).

Conforme foi discutido na seção 3.3, a escolha do parâmetro de rede a da célula de partição da aproximação micromagnética deve ser escolhida de forma a diminuir consideravelmente o número de interações a serem computadas e deve respeitar à condição $a < \lambda$. Assim, dados os valores das constantes fundamentais para o Py-79, tabela (3.2), a equação (3.17) permite-nos estimar o seu comprimento de troca

$$\lambda^{Py-79} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}} \approx 5,3 \text{ nm} . \quad (3.32)$$

Assim, a partir deste parâmetro, definimos o parâmetro de rede da célula micromagnética cúbica em $a = 5 \text{ nm}$.

Finalmente, dadas as constantes fundamentais do material escolhido para simulação e os parâmetros fundamentais correspondentes ao modelo micromagnético usado, podemos determinar todos os outros parâmetros de interesse na simulação, as constantes das interações

Parâmetros calculados para o Permalloy-79		
Parâmetro	Símbolo e expressão	Valor adotado
Comprimento de troca	$\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}}$	5,3 nm
Parâmetro de rede micromagnético	$a < \lambda$	5,0 nm
Constante da interação de troca	$J = 2A a$	$1,3 \times 10^{-19} J$
Constante da interação dipolar	$D = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 J$	$9,2 \times 10^{-21} J$
Constante da interação Zeeman	$Z = \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 J$	$1,2 \times 10^{-19} J$
Constante de conversão do campo efetivo local	$\beta = M_S \left(\frac{\lambda}{a}\right)^2$	$9,7 \times 10^5 A/m$
Constante de conversão de tempo	$v = \mu_0 \beta \gamma$	$2,1 \times 10^{11} I/s$

Tabela 3.3 – Valores dos parâmetros usados nas simulações, calculados a partir das constantes fundamentais da liga Permalloy-79, vide tabela (3.2).

fundamentais J , D e Z , e os fatores de conversão entre o campo magnético efetivo e seu equivalente adimensional (β), e entre o tempo real e computacional (v). Os respectivos valores numéricos adotados para as grandezas de interesse estão resumidos na tabela (3.3), nas unidades do Sistema Internacional (SI).

Antes de continuarmos, uma pergunta relevante deve ser feita: para o nosso caso particular, de quanto a aproximação micromagnética realmente diminui o número de momentos magnéticos levados em consideração na modelagem da nanoilha? Isso nos permitirá avaliar se a escolha do novo parâmetro de rede $a = 5 \text{ nm}$ foi apropriada. Para isso, devemos começar pela análise da rede real do material escolhido, o Permalloy-79.

O Permalloy-79 tem uma estrutura cristalina, com célula unitária cúbica de face centrada, veja a figura (3.3 (a)), conhecida por FCC (“Face Centered Cubic”), com parâmetro de rede real $a_0 = 0,355 \text{ nm}$ (129). Dessa forma, o volume de uma célula real é $V_0 = a_0^3$ e o número de momentos atômicos em uma célula real é $N_0 = \frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6 = 4$, pois cada célula contribui com $\frac{1}{8}$ de átomo em cada um dos oito vértices e mais $\frac{1}{2}$ em cada uma das seis faces, conforme ilustrado na figura (3.3 (b)).

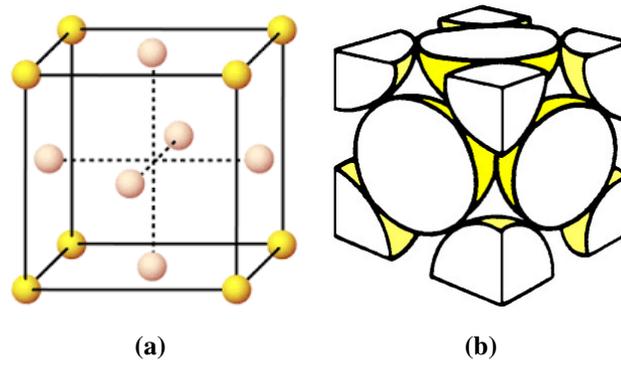


Figura 3.3 – (a) Diagrama da célula unitária de uma rede cristalina cúbica de face centrada (FCC). (b) Diagrama da célula unitária de uma rede FCC mostrando as frações atômicas que contabilizam 4 átomos por célula.

Podemos estimar então o número de células contidas em uma célula micromagnética pela razão $\frac{V_{cel}}{V_0} = \left(\frac{a}{a_0}\right)^3$ e assim o número total de momentos magnéticos em uma célula da partição. Considerando que cada célula unitária do material possui 4 momentos atômicos, o número de momentos magnéticos $N_{cel}^{\vec{m}^{atô}}$ em cada célula cúbica discreta da partição micromagnética é

$$N_{cel}^{\vec{m}^{atô}} = \left(\frac{a}{a_0}\right)^3 \times 4 = \approx 11.176 \approx 10^4. \quad (3.33)$$

O resultado da estimativa (3.33) significa que cada momento magnético considerado em nossas simulações micromagnéticas, substitui um número equivalente da ordem de 10^4 momentos de dipolo atômicos. Como desejamos levar em conta a anisotropia de forma das nanoilhas unicamente pelo efeito físico da interação dipolar entre todos os momentos magnéticos do sistema, temos de computar para uma nanoilha com N momentos de dipolo $N(N-1)$ interações a cada passo computacional, ou seja, temos de considerar a ordem de N^2 interações a cada passo na evolução temporal do sistema. Assim, como a aproximação micromagnética reduz o número de momentos na ordem de 10^4 , o número de interações a serem computadas é reduzido de um impressionante fator 10^8 , tornando possível aplicarmos as técnicas de simulação descritas às nanoilhas elípticas em dimensões similares aos trabalhos experimentais.

3.6 Detalhes das Simulações

No intuito de organizar os resultados e técnicas apresentadas, esta seção apresenta um resumo sucinto do método de simulação usado no trabalho. Dessa forma, justifica-se a reapresentação das equações e relações fundamentais ao método. Todos os procedimentos descritos aqui foram desenvolvidos em código computacional próprio desenvolvido pelo grupo de simulação computacional do Departamento de Física da UFJF, usando a linguagem Fortran 90. As simulações foram feitas no laboratório de simulação do respectivo grupo.

Geramos nanoilhas elípticas através de células cúbicas discretas com parâmetro $a = 5,0 \text{ nm}$, conforme discutido na seção 3.3. A partir de uma matriz plana de células discretas, a forma elíptica é obtida pela exclusão de células cujo centro esteja fora da equação da elipse definida pelas respectivas dimensões planares (L_x, L_y , veja figura (4.1)) que desejamos. A figura (3.4) ilustra essa técnica, que resulta em uma nanopartícula elíptica monocamada. Para variarmos a espessura, duplicamos a monocamada quantas vezes quisermos ao longo do eixo z .

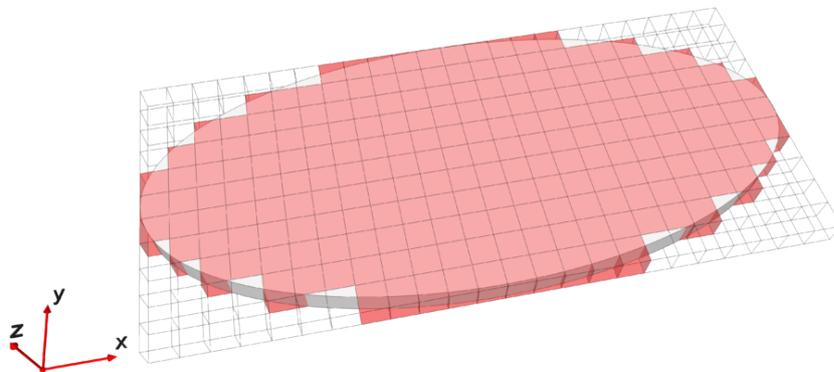


Figura 3.4 – Ilustração de uma nanoilha elíptica monocamada, construída a partir de células cúbicas discretas. A espessura é variada duplicando-se a camada elíptica obtida. Figura adaptada da referência (130).

No centro de cada célula, ou sítio da nanoilha, são considerados os momentos de dipolo total \vec{m}_i , definidos na relação (3.15), que interagem via o Hamiltoniano H apresentado na equação (3.23). Implementamos então o Hamiltoniano de interação adimensional dado na

relação (3.24)

$$\mathcal{H} = \frac{H}{J} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{D}{2J} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \frac{Z}{J} \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{h}_i^{ext}.$$

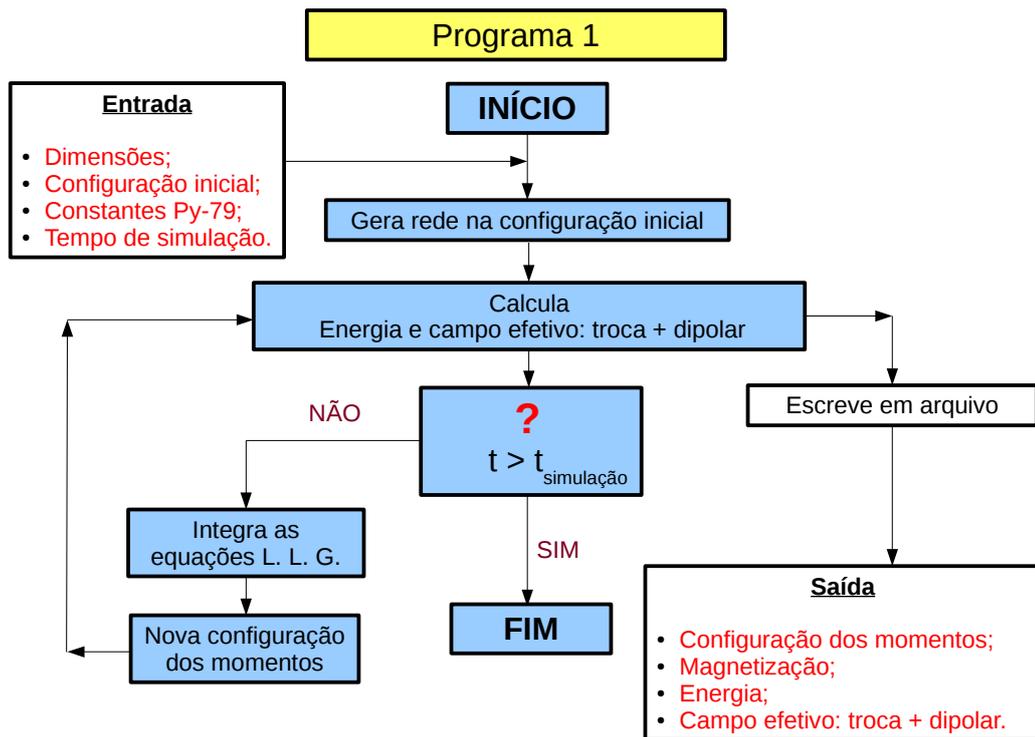
O cálculo do Hamiltoniano nos dá diretamente a energia livre magnética da nanoilha em unidades do SI, para uma dada configuração de momentos. Se definirmos a configuração inicial do sistema, temos \mathcal{H} , o que nos permite calcular o campo efetivo local adimensional no i -ésimo sítio, equação (3.25), na forma explícita

$$\vec{h}_i = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \hat{m}_i} = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\langle j \rangle} \hat{m}_j + \frac{D}{J} \sum_j \left[\frac{3(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})\hat{r}_{ij} - \hat{m}_j}{(r_{ij}/a)^3} \right] + \frac{2Z}{J} \vec{h}_i^{ext} \right\}.$$

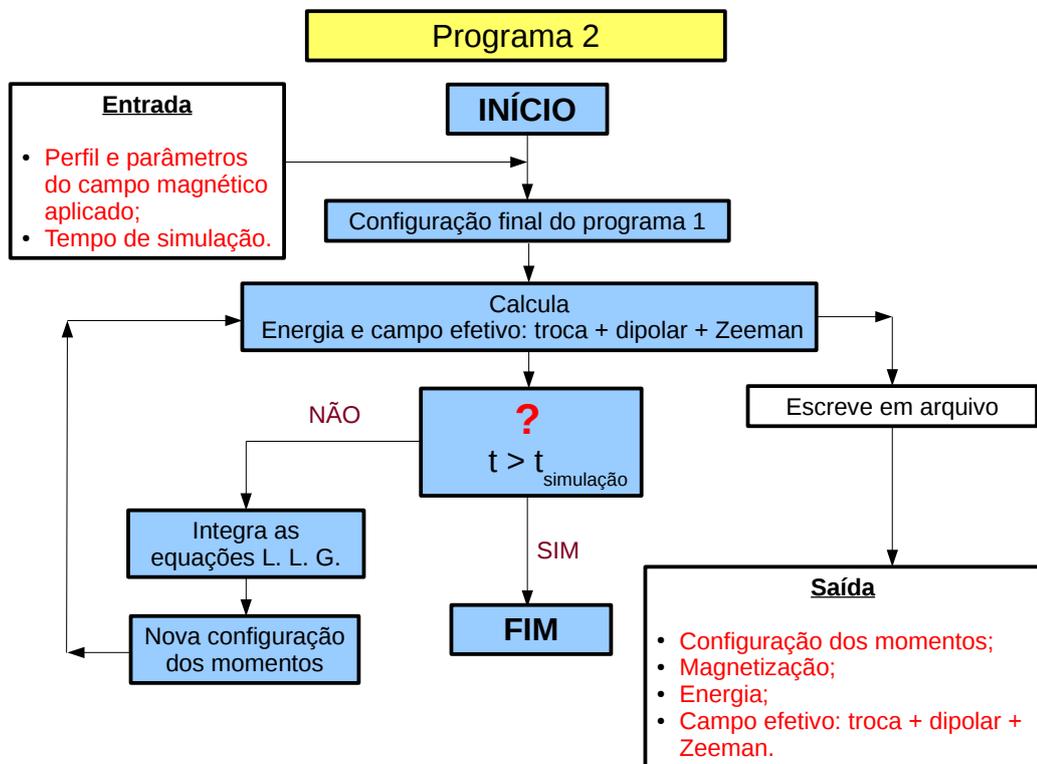
Vale relembrar que na expressão do campo efetivo a primeira soma é realizada apenas entre os primeiros vizinhos, interação de troca, a segunda soma é realizada sobre todos os momentos magnéticos da nanoilha, interação dipolar, e o terceiro termo é o termo de interação com o campo magnético externo, sempre considerado uniforme em todos os sítios da nanoilha. Dessa forma, o campo efetivo local incorpora as contribuições de troca, dipolar e Zeeman, e permite o cálculo da evolução temporal do sistema de N momentos interagentes da nanoilha, pela integração numérica do conjunto de $3N$ equações acopladas, resultantes da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert adimensional para um momento genérico i , dada na equação (3.31)

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = -\frac{1}{1 + \alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{h}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{h}_i) \right].$$

A integração do conjunto de equações para os N momentos, leva o sistema a uma nova configuração, que permite o reinício da rotina principal do programa. O número de ciclos é definido pelo tempo total imposto à simulação considerada. Usamos um método Preditor-Corretor de 4ª ordem na integração do conjunto de equações, que pode ser visto em mais detalhes no apêndice D.



(a)



(b)

Figura 3.5 – Diagrama de fluxo computacional. (a) Programa 1: gera a nanoilha na configuração inicial escolhida e permite sua relaxação para o estado fundamental sem campo externo aplicado. (b) Programa 2: aplica campo externo à nanoilha na configuração final de magnetização obtida do programa 1, geralmente a configuração do estado fundamental.

Por conveniência, em função do tipo de estudo desenvolvido, implementamos na prática dois códigos computacionais distintos. O primeiro, a partir dos dados de entrada: dimensões; parâmetros do material e número de passos da simulação ¹, gera a nanoilha e a configuração inicial dos momentos magnéticos, que podemos definir em subrotinas distintas. Neste código permite-se a relaxação da magnetização, ou evolução temporal do sistema, sem campo externo aplicado. A cada ciclo do programa, ou a cada número de ciclos específico, escrevemos em arquivo as grandezas relevantes: a energia em termos distintos da interação de troca e dipolar, e a configuração dos momentos magnéticos. Ao final da simulação, temos um arquivo de dados com toda a informação relevante sobre o sistema durante o tempo de evolução considerado. Além disso, usamos a configuração final, geralmente a de menor energia (estado fundamental), como configuração inicial do segundo programa. O segundo programa, aplica um campo externo definido no arquivo de entrada do mesmo, sobre a configuração de momentos obtida do programa 1. O fluxo computacional e a escrita dos dados relevantes é análoga ao primeiro programa, a única diferença é o termo adicional Zeeman no cálculo da energia e do campo efetivo local. A figura (3.5) ilustra o diagrama de fluxo computacional empregado no desenvolvimento do trabalho.

O campo magnético externo aplicado \vec{B}_i^{ext} é dado, e apresentado nas próximas seções, em Tesla e é implementado computacionalmente através de sua forma adimensional \vec{h}_i^{ext} definida na equação (2.33), de onde é possível reescrever as relações de conversão

$$\vec{h}_i^{ext} = \frac{\vec{H}_i^{ext}}{M_S} = \frac{\vec{B}_i^{ext}}{\mu_0 M_S}. \quad (3.34)$$

Todas as nossas simulações consideram os respectivos valores e parâmetros apresentados nas tabelas (3.2) e (3.3). O incremento de tempo computacional usado em todas as simulações foi $d\tau = 0,001$, o que representa um intervalo de tempo real igual a

$$dt = \frac{d\tau}{v} = 4,8 \times 10^{-15} \text{ s}. \quad (3.35)$$

Isso significa que estamos simulando uma evolução temporal considerando intervalos de tempo

¹ Que define o tempo total de simulação

reais entre duas configurações magnéticas subsequentes de $4,8 \times 10^{-15} s$, que é um intervalo substancialmente menor que o tempo de relaxação das partículas consideradas, o que permite uma clara visualização dos processos durante a evolução temporal do sistema.

4 *Resultados*

Neste capítulo, apresentamos os resultados das simulações numéricas para o comportamento magnético de nanoilhas elípticas ferromagnéticas, consideradas de “Permalloy-79”, segundo o modelo e métodos descritos no capítulo 3. Conduzimos nosso estudo sob dois aspectos distintos: a investigação do **estado fundamental da magnetização** das nanoilhas na ausência de campo magnético externo e a **reversão da magnetização** das nanoilhas sob aplicação de campo magnético externo periódico, variando suavemente (perfil senoidal) e sob aplicação de campo magnético externo na forma de pulsos gaussianos curtos (largura de 0.5 ns).

Vale lembrar, que nosso modelo contabiliza a anisotropia de forma da nanoilha apenas por sua origem natural nas interações dipolares. Dessa forma, todas as nossas simulações foram feitas sem raio de corte nas interações dipolares, ou seja, o campo efetivo local sempre considera o campo gerado por todos os momentos magnéticos da nanoilha. Isso nos permite simular condições mais próximas das reais, mas aumenta consideravelmente o tempo de simulação, mesmo usando a aproximação micromagnética (seção 3.3).

4.1 **Estudo do Estado Fundamental da Magnetização**

Em nanoilhas elípticas com dimensões típicas de monodomínio, a quebra de simetria do *bulk* e o efeito do campo desmagnetizante resultante das interações dipolares geram uma forte anisotropia de forma ¹, definindo duas possíveis configurações para o estado fundamental da magnetização: magnetização ao longo do eixo maior da nanoilha - estado tipo C ou o estado de vórtice (104–107), situações ilustradas na figura (1.12). Nós estudamos a competição entre

¹ Veja o apêndice B.

os estados de vórtice e os estados alinhados tipo C como função da forma e das dimensões $L_x \times L_y \times e \text{ nm}^3$ da nanoilha, veja a figura (4.1) para ilustração.

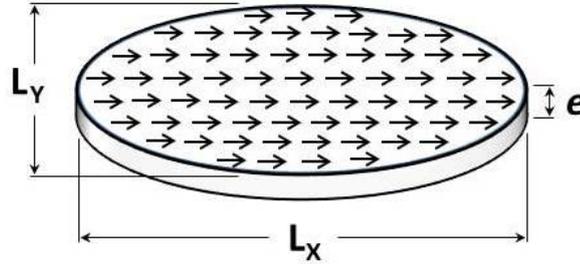


Figura 4.1 – Vista esquemática de uma nanoilha elíptica com espessura e , eixo maior L_x e eixo menor L_y .

Em vista do parâmetro da célula de partição micromagnética escolhida ($a = 5,0 \text{ nm}$), temos a liberdade de simular nanoilhas com dimensões múltiplas de $5,0 \text{ nm}$. Dessa forma, consideramos partículas finas com espessura “ e ” de 5 nm , 10 nm , 15 nm , 20 nm , 25 nm e 30 nm , e dimensões L_x (eixo maior) e L_y (eixo menor) variando de 50 nm a 650 nm , figura (4.1). A metodologia usada por nós para determinar o estado favorável da magnetização (estado fundamental), em função das dimensões das nanoilhas, é descrita a seguir.

Inicialmente, consideramos duas partículas com as mesmas dimensões, uma no estado de vórtice e a outra no estado alinhado tipo C. Para isso, definimos o estado inicial da magnetização nas configurações desejadas por um algoritmo numérico, o que não representa o estado relaxado da magnetização da nanoilha na respectiva configuração. A partir daí, simulamos a evolução temporal do sistema sem campo externo aplicado ($\vec{B}^{ext} = 0$), ou seja, apenas sob os efeitos das interações de troca e dipolares, sem raio de corte. Após o sistema atingir o equilíbrio, nós comparamos a energia por momento magnético de cada configuração. Começamos considerando duas partículas com $L_x = L_y$ (formato de disco) e repetimos esse procedimento fixando a dimensão L_y e aumentando sistematicamente L_x , tal que $L_x > L_y$.

Nós observamos que para pequenas razões de aspecto $q = \frac{L_x}{L_y} > 1$, veja a figura (4.1), o estado preferido é o de vórtice, mas à medida em que a nanopartícula é alongada, a anisotropia de forma favorece naturalmente o estado alinhado tipo C ao longo do eixo maior

L_x . Ou seja, a partir de um valor crítico da razão de aspecto q , o estado alinhado tipo C se torna o estado fundamental. Nosso procedimento permite determinar tal valor crítico da razão de aspecto, definida aqui como **razão de aspecto de transição** q_{trans} . A figura (4.2) mostra esquematicamente o método usado por nós através de um exemplo para uma nanopartícula elíptica com $L_y = 200 \text{ nm}$ e espessura $e = 5 \text{ nm}$, mantidos fixos. No caso ilustrado, a razão de aspecto de transição entre os estados fundamentais da magnetização foi calculada em $q_{trans} = 1,53$.

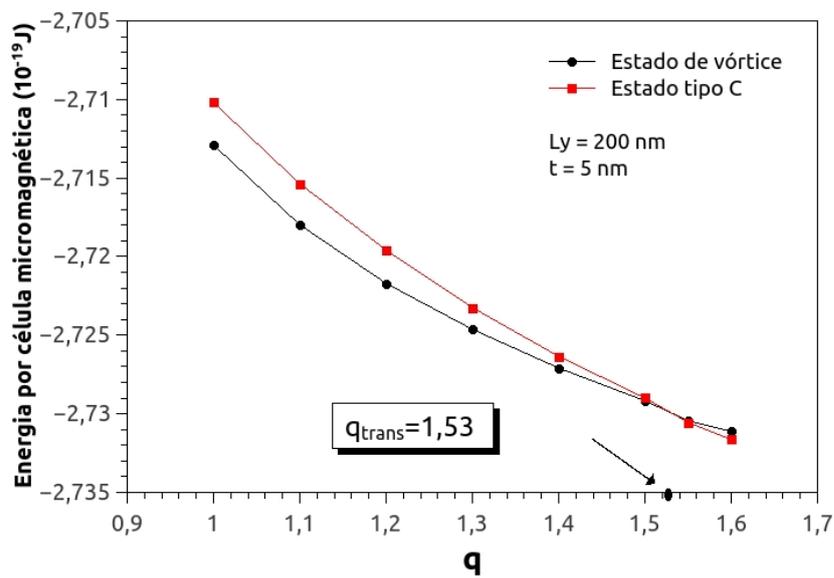


Figura 4.2 – Energia por célula de partição micromagnética (vide capítulo 3) para os estados de vórtice e tipo C como uma função da razão de aspecto $q = \frac{L_x}{L_y}$ para uma nanopartícula elíptica com $L_y = 200 \text{ nm}$ mantido fixo e espessura $e = 5 \text{ nm}$. Para razões de aspecto menores que 1,53, o estado de vórtice é o estado fundamental e para q maior que 1,53 o estado alinhado tipo C é o estado fundamental da magnetização.

Admitindo que exatamente nas dimensões da razão de aspecto de transição não há diferença de energia entre os estado de vórtice e tipo C ($\Delta E = E_v - E_c = 0$), é fácil mostrar que para uma nanopartícula com L_y fixo, o respectivo L_x de transição é dado explicitamente por

$$L_x^{trans} = L_x^f - \left[\left(L_x^f - L_x^i \right) \cdot \frac{\Delta E_f}{\Delta E_f - \Delta E_i} \right], \quad (4.1)$$

considerando que a diferença de energia entre os estados de vórtice e tipo C antes (i) e depois (f) da transição $\Delta E_{i,f}$ é proporcional à $L_x^{trans} - L_x^{i,f}$ para L_x^i e L_x^f próximos. As quantidades, com índices i e f referem-se às configurações de alongamento (L_x) e diferença de energia entre os es-

tados de vórtice e tipo C (ΔE) antes e após a transição de estado fundamental, respectivamente. Em outras palavras, na dimensão L_x^i o estado fundamental é ainda o vórtice, mas o alongamento da partícula para L_x^f já é tal que o estado alinhado tipo C se torna energeticamente favorável. Assim, a partir do valor de L_x^{trans} calculado em (4.1), podemos obter diretamente a razão de aspecto de transição

$$q_{trans} = \frac{L_x^{trans}}{L_y} . \quad (4.2)$$

Realizando os procedimentos sistemáticos descritos para nanoilhas com diferentes espessuras, podemos construir um diagrama de estados *vórtice X tipo C*. Para cada espessura investigada, elaboramos um gráfico da razão de aspecto de transição em função do L_y da nanopartícula considerada. O conjunto desses gráficos forma o diagrama de estados mostrado na figura (4.3). Cada ponto desse diagrama foi obtido por um procedimento análogo ao descrito e ilustrado na figura (4.2).

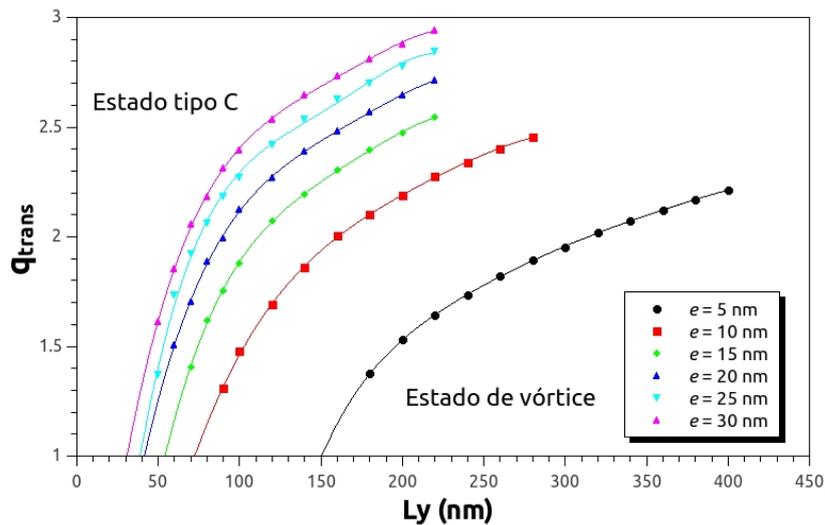


Figura 4.3 – Diagrama de estados para nanoilhas elípticas mostrando o comportamento da razão de aspecto de transição como função de L_y para espessuras de 5nm a 30nm. A região abaixo de cada curva corresponde a dimensões em que o estado de vórtice é o estado fundamental e a região acima de cada curva representa as dimensões, as razões de aspecto, em que o estado alinhado tipo C é o estado energeticamente favorável. As linhas sólidas são ajustes polinomiais de quarto grau.

No diagrama da figura (4.3), as regiões abaixo de cada curva correspondem a razões de aspecto em que o estado de vórtice é o estado fundamental da magnetização, ao passo que as regiões acima de cada curva representam razões de aspecto em que o estado alinhado tipo C

é o estado magnético fundamental. No estado alinhado, com magnetização ao longo de L_x , a partícula se comporta como um grande momento magnético. Assim, neste estado, a partícula pode ser usada como nanoilha individual em qualquer configuração de gelo de spin artificial ou ainda em dispositivos de lógica ou armazenamento magnético de dados ². Extrapolando os ajustes polinomiais no diagrama da figura (4.3) até o ponto em que interceptam o eixo das abscissas L_y , ou seja, $q = 1$, podemos obter uma estimativa do diâmetro mínimo de um disco em função da espessura, em que o estado de vórtice se torna um estado possível e energeticamente favorável.

O diagrama de estados (4.3) revela que é possível fabricar nanoilhas ferromagnéticas alongadas com estado fundamental tipo C em razões de aspecto menores que dois. Isto é interessante do ponto de vista tecnológico, pois assim é possível usar ilhas menores em gelos de spin artificiais. Por exemplo, uma partícula com espessura de 25 nm e $L_y = 50\text{ nm}$ já está no estado favorável tipo C com um alongamento $L_x = 70\text{ nm}$, que é muito menor que as nanoilhas usadas atualmente em gelos de spin experimentais que tem espessura de 25 nm , $L_y = 80\text{ nm}$ e $L_x = 220\text{ nm}$ (27, 49, 51, 52, 54). O diagrama (4.3) pode ser usado como um guia para produzir, com dimensões apropriadas, nanoilhas ferromagnéticas elípticas alongadas no estado monodomínio tipo C, especialmente úteis em sistemas artificiais geometricamente frustrados.

Como era de se esperar, se a espessura das nanopartículas aumenta, a anisotropia ao longo de z cresce, fazendo o estado de vórtice ser mais estável em razões de aspecto maiores. Nós observamos que para partículas com L_y fixo, a razão de aspecto de transição aumenta com a espessura e . A figura (4.4) mostra este efeito para partículas com $L_y = 180\text{ nm}$ e $L_y = 220\text{ nm}$.

² Discussão realizada na seção 1.5

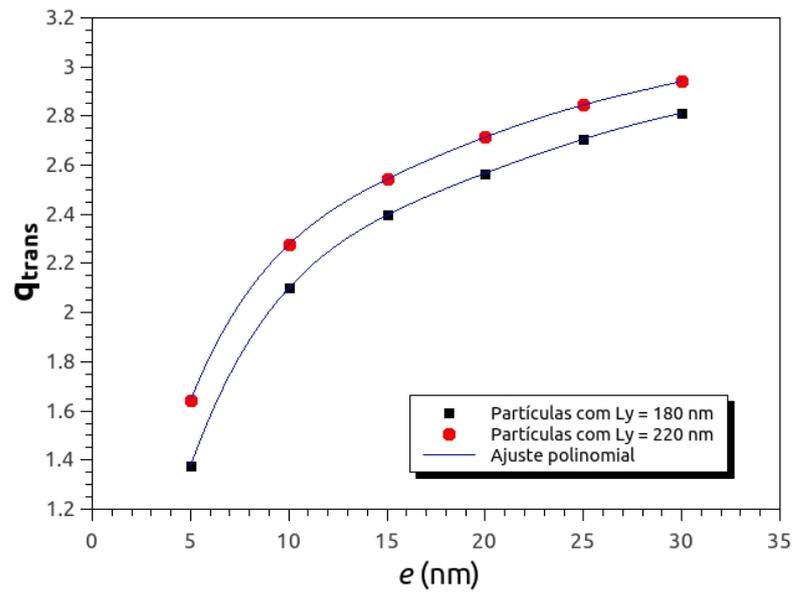


Figura 4.4 – Comportamento da razão de aspecto de transição q_{trans} como função da espessura e para partículas com $L_y = 180$ nm e $L_y = 220$ nm.

Também observamos nesta etapa do trabalho, que para algumas dimensões de nanoilhas no estado tipo C, a magnetização não é perfeitamente uniforme ao longo de toda a partícula, evidenciando um efeito próximo às extremidades da partícula, veja a figura (4.5 (a)). Embora tal efeito já tenha sido previsto e relacionado fundamentalmente à razão de aspecto das partículas (86), observamos em nossas simulações que este fenômeno é mais susceptível em nanoilhas “finas” (pequenas espessuras e) e com grandes dimensões planares (L_x e L_y). Como estes desvios estão relacionados à competição entre a interação de troca e a interação dipolar na definição de configuração de menor energia, nanopartículas com menor dimensão planar e mais “grossas” (espessuras e maiores), são menos susceptíveis a este efeito, mesmo em razões de aspecto semelhantes, como mostra a sequência de nanoilhas da figura (4.5 (a) a (e)).

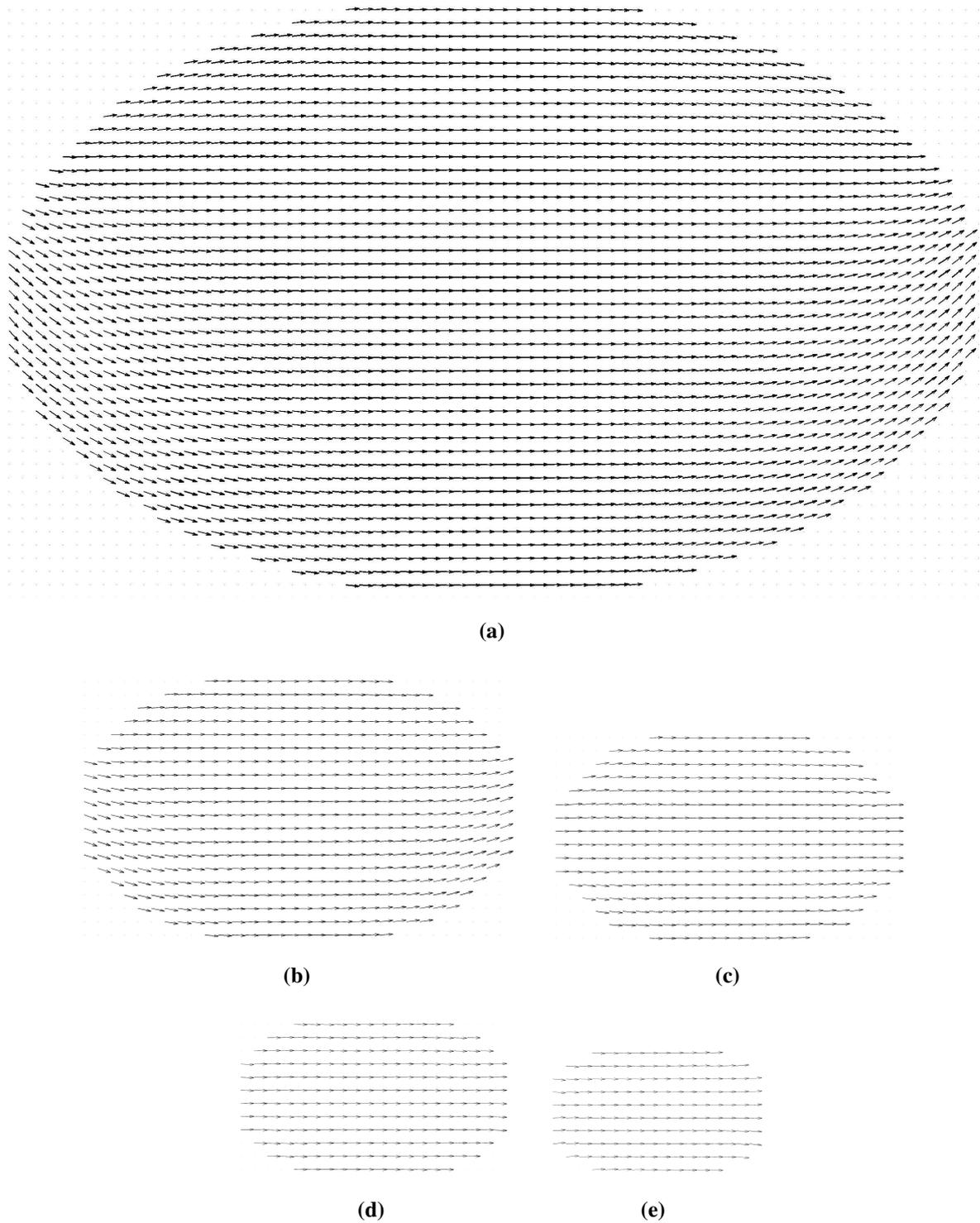


Figura 4.5 – Vista superior da configuração magnética no estado fundamental de uma sequência de nanoilhas. Observa-se que a não uniformidade da magnetização para grandes dimensões no plano e pequena espessura, é menos susceptível em nanoilhas com pequenas dimensões no plano e maiores espessuras. Todas as nanoilhas tem aproximadamente a mesma razão de aspecto $q \approx 1,6$ e estão ilustradas proporcionalmente às suas respectivas dimensões: **(a)** $360 \times 220 \times 5 \text{ nm}^3$, **(b)** $160 \times 100 \times 10 \text{ nm}^3$, **(c)** $130 \times 80 \times 15 \text{ nm}^3$, **(d)** $100 \times 60 \times 20 \text{ nm}^3$, **(e)** $80 \times 50 \times 25 \text{ nm}^3$.

Na figura (4.5), mostramos a vista superior da configuração magnética de uma sequência

de nanoilhas com diferentes dimensões, descritas na legenda da figura, mas com aproximadamente a mesma razão de aspecto $q \approx 1,6$. Como se pode perceber, o efeito é grande na nanoilha de grande dimensão planar e pequena espessura (4.5 (a)) e diminui à medida que as dimensões no plano diminuem e a espessura aumenta (4.5 (b) a (e)). Isso mostra claramente que tal efeito não está relacionado apenas à razão de aspecto da nanoilha considerada. Assim, é possível utilizar nanoilhas com razões de aspecto pequenas e com a magnetização comportando-se conforme o desejado para as aplicações vislumbradas.

Resumindo, nossos resultados mostram que é possível fabricar nanoilhas funcionais, no estado alinhado tipo C, com razões de aspecto consideravelmente menores que as dos atuais trabalhos experimentais, que usam geralmente nanoilhas com razões de aspecto próximas a três para garantir o estado alinhado da magnetização. Este conjunto de resultados para o estado fundamental da magnetização de nanoilhas elípticas ferromagnéticas foi publicado no *Journal of Applied Physics* no fim de 2014 (108).

4.2 Estudo da Reversão da Magnetização

Na segunda parte deste trabalho, investigou-se a reversão da magnetização em função do campo magnético aplicado em nanopartículas com duas razões de aspecto fixas: $q = 2,75$ ($220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$), razão de aspecto usual em trabalhos *spin ice* experimentais (27, 58) e $q = 1,40$ ($70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$), razão de aspecto reduzida proposta por nós (108) a partir do diagrama de estados (4.3), perfeitamente estável e funcional no estado de magnetização alinhado tipo C. Consideramos nanoilhas com espessuras e distintas de 5 nm , 10 nm , 15 nm , 20 nm e 25 nm , figura (4.1).

Estudamos a reversão da magnetização aplicando campo magnético periódico, na forma senoidal, e aplicando pulsos curtos de formato gaussiano com largura de $0,5 \text{ ns}$, que é a ordem de grandeza usual em trabalhos experimentais (93, 94). Em ambos os casos fizemos um estudo angular da dependência dos mecanismos de reversão, aplicando o campo magnético externo no plano das nanoilhas em diferentes direções, definidas pelo ângulo θ_B , veja a figura

4.6.

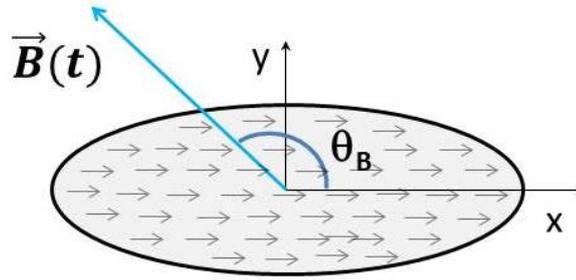


Figura 4.6 – Vista esquemática da direção do campo magnético aplicado, definida pelo ângulo θ_B .

Nos resultados de nossas simulações, observamos uma variedade de mecanismos de reversão da magnetização como a criação e aniquilação de vórtices, movimento de rotação coerente dos momentos magnéticos e outras estruturas exóticas que variam com a direção de aplicação do campo e com as dimensões da nanopartícula considerada. A fim de relacionar e comparar os diferentes mecanismos de reversão, nós definimos um **índice de coerência** para a reversão da magnetização, definido por

$$I_{Coe} = \frac{|\vec{M}_{min}|}{|\vec{M}|}, \quad (4.3)$$

onde \vec{M}_{min} é a magnetização mínima da nanoilha durante o processo de reversão e \vec{M} é a magnetização de saturação da respectiva nanoilha. Se a reversão da magnetização é perfeitamente coerente $I_{Coe} = 1$ e, se não é coerente, I_{Coe} tende a zero. Sob essa definição, uma reversão com I_{Coe} próximo de 1 significa uma reversão cujo mecanismo é a rotação sincronizada dos momentos magnéticos, revelando neste caso que a magnetização da nanoilha realmente se comporta como um grande momento magnético, mesmo durante o processo de inversão de seu sentido de orientação. Mostraremos a seguir os aspectos relevantes a serem considerados para que tenhamos reversões da magnetização nesse regime, ou seja, por rotação coerente dos momentos magnéticos que formam a nanopartícula.

4.2.1 Estudo da Reversão da Magnetização sob Aplicação de Campo Magnético Externo Periódico

Esta seção apresenta os resultados de simulações de ciclos de histerese obtidos pela aplicação periódica de um campo magnético externo homogêneo no plano das partículas (plano xy), com módulo dado por

$$|\vec{B}_i^{ext}| = |\vec{B}(t)| = B_0 \sin(2\pi f t) \quad (4.4)$$

e direções definidas por $\theta_B = 180^\circ$, 170° e 135° . B_0 é a amplitude e f a frequência periódica do campo magnético externo aplicado. O perfil gráfico do campo externo periódico é ilustrado na figura (4.7).

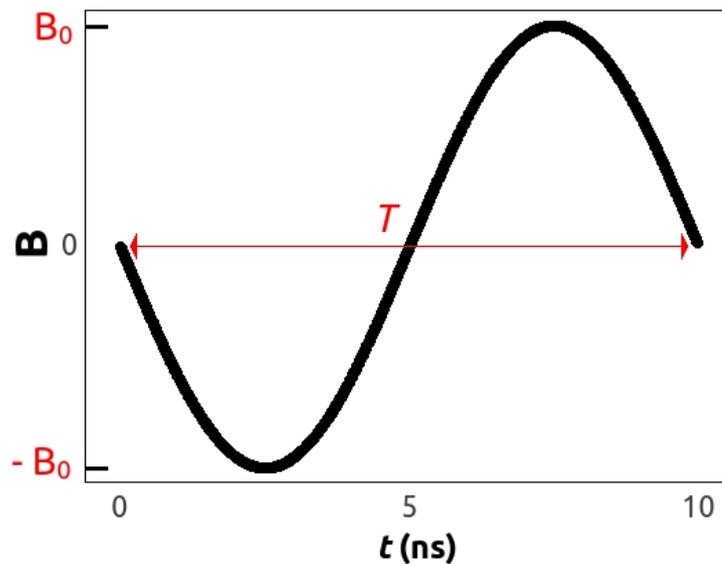


Figura 4.7 – Perfil do campo magnético periódico aplicado. B_0 é a amplitude do campo magnético aplicado e T o respectivo período de tempo real de um ciclo.

Conforme discutido no capítulo introdutório, um dos objetivos deste estudo é realizar uma investigação sistemática sobre o efeito da mudança de frequência de aplicação do campo magnético externo. Nesse intuito, vale lembrar que ciclos de histerese são ferramentas fundamentais na investigação de sistemas magnéticos e, geralmente, são realizadas experimentalmente em condições quase-estáticas de variação de campo magnético, em outras palavras, um ciclo de histerese experimental pode demorar da ordem de segundos, ou até minutos, para ser

realizado. No entanto, na dinâmica de simulação adotada por nós e por muitos outros grupos de pesquisa, há um fator limitante de tempo. Por exemplo, conforme vimos na seção 3.5, o incremento de tempo real considerado nas simulações é de $dt = 4,8 \times 10^{-15} s$, vide equação (3.35), ou seja, uma evolução de 10^9 passos computacionais, equivale a um intervalo de tempo real de apenas $4,8 \times 10^{-6} s$.

Na prática, isso nos leva a crer que comparações entre curvas de histerese obtidas por técnicas experimentais e por métodos teóricos de simulação como o usado neste trabalho, vide capítulo 3, devem levar em conta essa diferença na escala de tempo de obtenção de cada um dos dados. No entanto, não encontramos na literatura discussões na diferença entre esses dados levando em consideração essa provável diferença devido à escala de tempo entre as diferentes formas de obtenção da informação sobre o sistema magnético. Há trabalhos que discutem as diferenças observadas entre os resultados teóricos e experimentais devido a efeitos geométricos relacionados à diferença de área da amostra considerada em cada um dos dados e devido aos efeitos térmicos presentes nas medidas experimentais, também não contabilizados nesse tipo de método numérico (131). Há também referência sobre diferenças entre os dados numéricos e experimentais considerando a direção de aplicação do campo, que é implementada com valor exato nos métodos computacionais, mas impossível de ser determinada exatamente em qualquer aparato experimental (99, 101), onde os autores reproduzem os dados experimentais considerando campo aplicado a 1° do eixo de anisotropia das partículas³.

Diante do exposto, realizamos ciclos de histerese em diferentes frequências $f = 10^6 Hz$, $10^7 Hz$, $10^8 Hz$ e $10^9 Hz$, ou seja, cada ciclo de histerese foi obtido simulando um determinado período de tempo real $T = 10^{-6} s$, $10^{-7} s$, $10^{-8} s$ e $10^{-9} s$, respectivamente, veja a figura (4.7). Com isso podemos ter uma visão sistêmica da possível diferença observada entre um ciclo de histerese obtido nas condições quase-estáticas de algumas medidas experimentais e os obtidos via dinâmica de spin, simulados em intervalos de tempo reais equivalentes muito pequenos. Os resultados desse procedimento para a partícula com razão de aspecto $q = 1,4$ e dimensões $70 \times 50 \times e nm^3$ estão ilustrados na figura (4.8).

³ Em nossa definição, equivale à aplicação de campo na direção definida por $\theta_B = 179^\circ$, vide figura (4.6).

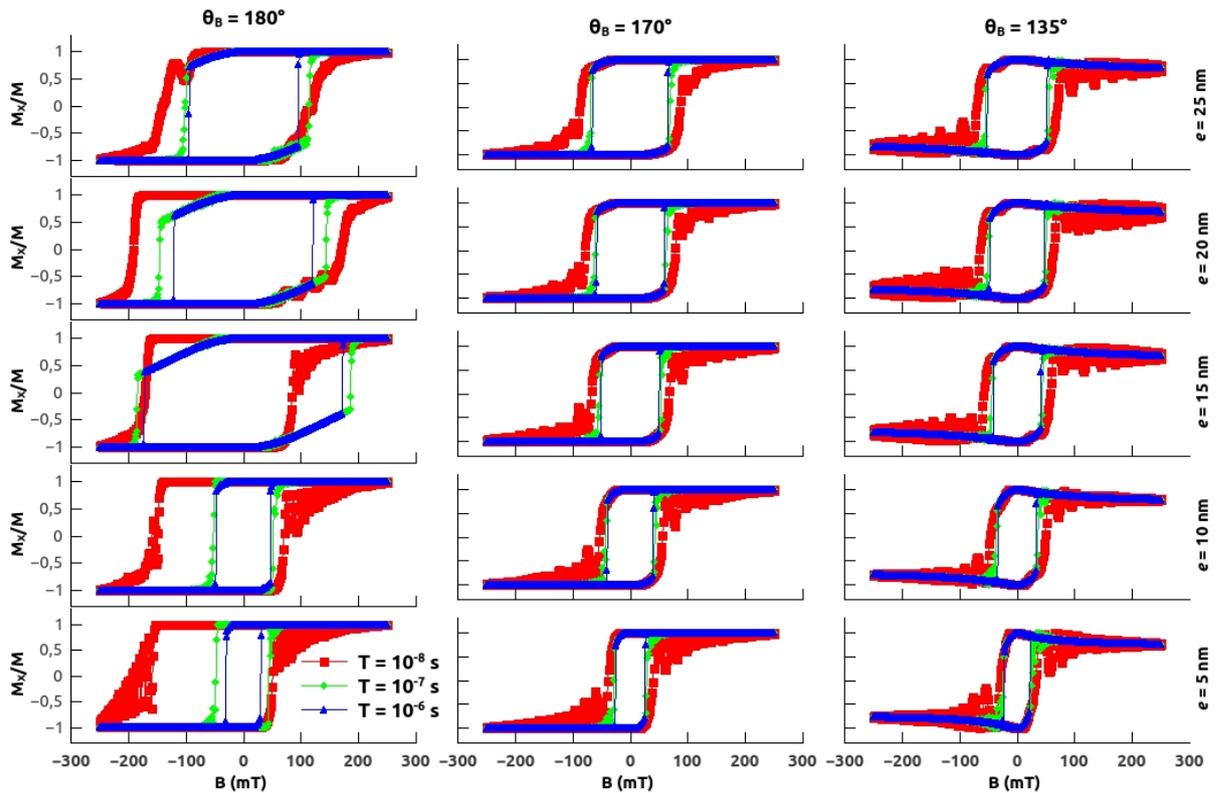


Figura 4.8 – Ciclos de histerese para as nanoilhas com razão de aspecto $q = 1,4$ e dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$. Para cada direção θ_B e espessura e considerada estão ilustrados os ciclos de histerese obtidos em três períodos de tempo T diferentes, de acordo com a legenda em cores do gráfico.

Dentro de cada configuração com espessura e e direção de campo magnético aplicado θ_B diferentes, a figura (4.8) ilustra três ciclos de histerese obtidos nas frequências $f = 10^8 \text{ Hz}$, 10^7 Hz e 10^6 Hz com os respectivos períodos $T = 10^{-8} \text{ s}$, 10^{-7} s e 10^{-6} s , conforme indicado na legenda em cores da figura. Os ciclos obtidos na frequência de $f = 10^9 \text{ Hz}$ foram omitidos por não somarem muita informação adicional e tornarem o entendimento da figura mais complicado. Nessa frequência de campo oscilante não há tempo suficiente para relaxação da magnetização, produzindo um ciclo com oscilações que tornariam a figura razoavelmente confusa.

Pode-se observar na figura (4.8), que as curvas em frequências mais altas tendem à assimetria quando comparadas às curvas em frequência mais baixa, que se aproximam do comportamento observado em condições quase-estáticas. Em geral, observa-se uma discrepância no campo coercivo em diferentes frequências. Em frequências mais altas o tempo de resposta da

magnetização à variação do campo externo se mostra relevante e o efeito no ciclo de histerese é a observação de um valor de campo coercivo ligeiramente maior. Este efeito, no entanto, pode ser compensado pela mudança na direção de aplicação do campo. É visível na figura (4.8) que esta discrepância é reduzida aplicando campo nas direções $\theta_B = 170^\circ$ e 135° , fora do eixo de anisotropia. Em outras palavras, as configurações magnéticas durante as reversões dependem mais fortemente da frequência do campo quando a direção de aplicação é ao longo do eixo de anisotropia $\theta_B = 180^\circ$, conforme observado claramente na figura (4.8).

A figura (4.9) mostra, como exemplo, instantâneos da vista superior das configurações magnéticas para duas reversões da nanoilha elíptica de dimensões $70 \times 50 \times 25 \text{ nm}^3$. As duas reversões ilustradas na figura (4.9) foram obtidas para um campo senoidal de frequência $f = 10^7 \text{ Hz}$, e só diferem em relação à direção do campo externo aplicado: $\theta_B = 180^\circ$ figura (4.9, **(a)**) e $\theta_B = 170^\circ$ figura (4.9, **(b)**). A figura (4.9, **(a)**) confirma por observação direta que o mecanismo de reversão da magnetização para campo externo aplicado em $\theta_B = 180^\circ$ é a criação e aniquilação de um vórtice, nas nanoilhas com espessuras de 15, 20 e 25 nm, conforme observado previamente nas curvas de histerese da figura (4.8). Em todas as outras configurações mostradas na figura (4.8) as reversões ocorrem pelo movimento combinado, mas não perfeitamente coerente dos momentos magnéticos das nanoilhas, reveja, por exemplo, a figura(4.9, **(b)**).

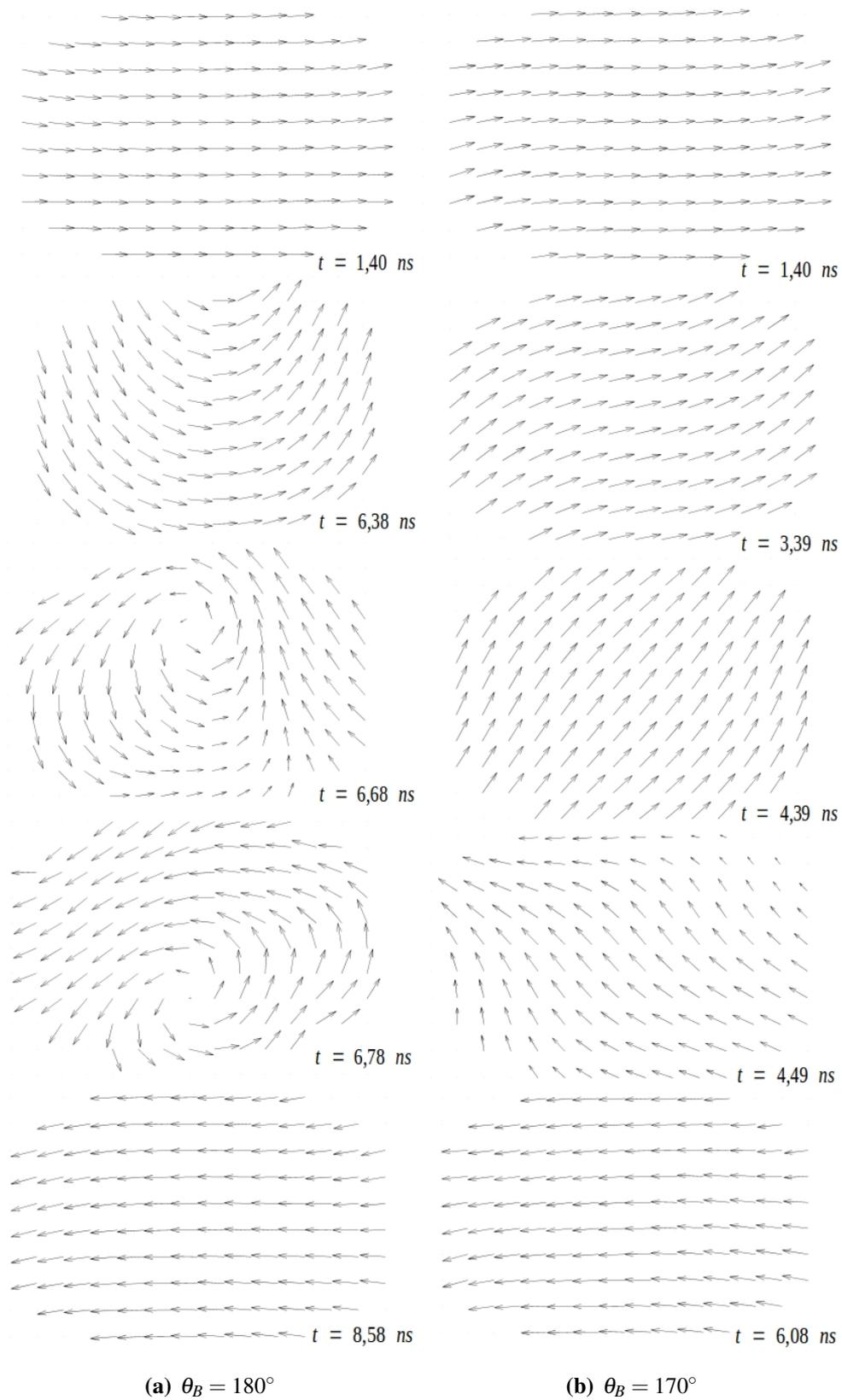


Figura 4.9 – Vista superior de instantâneos das configurações magnéticas durante a reversão da magnetização da nanoilha de dimensões $70 \times 50 \times 25 \text{ nm}^3$, sob campo magnético periódico com frequência $f = 10^7 \text{ Hz}$ aplicado na direção: (a) $\theta_B = 180^\circ$ e (b) $\theta_B = 170^\circ$. Os respectivos instantes de tempo de cada configuração estão indicados na figura.

Os ciclos de histerese obtidos para as nanoilhas com razão de aspecto $q = 2,75$ e dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$ estão ilustrados na figura (4.10) ⁴. Nestas partículas, o efeito da frequência é similar ao observado para as partículas com menor razão de aspecto, sendo muito relevante para aplicação de campo em $\theta_B = 180^\circ$. Nesta direção, em nenhuma configuração de frequência de campo magnético e espessura de nanoilha permite a reversão da magnetização pela rotação combinada dos momentos magnéticos. Todos os processos de reversão da magnetização na direção $\theta_B = 180^\circ$ são mediados por vórtices ou estruturas exóticas.

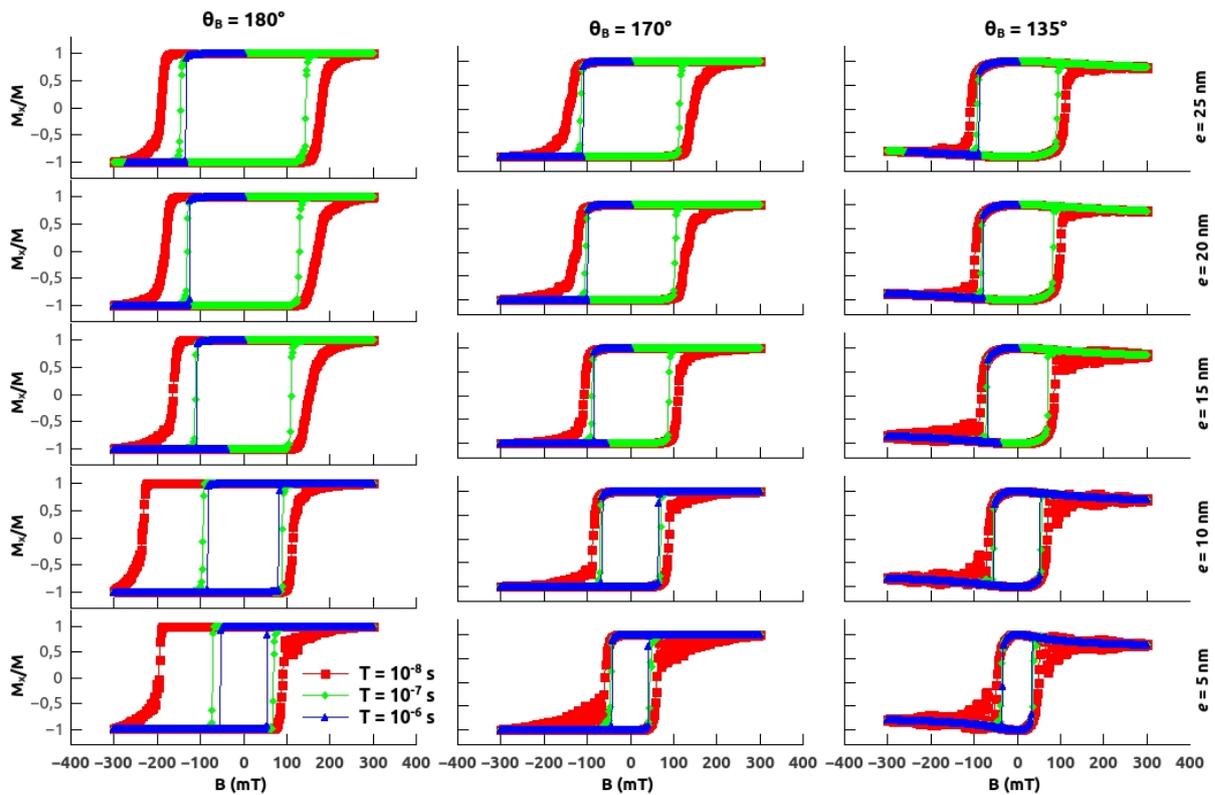


Figura 4.10 – Ciclos de histerese para as nanoilhas com razão de aspecto $q = 2,75$ e dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$. Para cada direção θ_B e espessura e considerada estão ilustrados os ciclos de histerese obtidos em três períodos de tempo T diferentes, de acordo com a legenda em cores do gráfico.

Ainda para as nanoilhas com dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$, a aplicação de campo magnético na direção $\theta_B = 170^\circ$, leva a configurações pouco coerentes do momentos magnéticos nas reversões sob todas as frequências de campo aplicado. Observamos diferentes configurações,

⁴ Os ciclos de histerese para as nanoilhas com dimensões $220 \times 80 \times 15 \text{ nm}^3$, $220 \times 80 \times 20 \text{ nm}^3$ e $220 \times 80 \times 25 \text{ nm}^3$ aparecem incompletos na figura (4.10), pois dado o tamanho das partículas, o tempo computacional necessário para o ciclo completo se mostrou inviável. Os pontos dos ciclos inacabados gastaram aproximadamente 130 dias de simulação.

como por exemplo estruturas tipo ‘S’ que levam a estado intermediários de criação e aniquilação de um, dois ou até mais vórtices. Para simulações de campo magnético aplicado na direção $\theta_B = 135^\circ$, observamos rotações mais coerentes dos momentos magnéticos, que podem ser permeadas por estruturas tipo ‘S’ em todas as frequências de campo, mas sempre com diferentes índices de coerência.

Cabe ressaltar o curioso comportamento observado para as primeiras reversões da magnetização das nanoilhas com dimensões $220 \times 80 \times 5 \text{ nm}^3$ e $220 \times 80 \times 10 \text{ nm}^3$ para campo de frequência $f = 10^8 \text{ Hz}$ aplicado em $\theta_B = 180^\circ$. Pelo que se observa na figura (4.10), nestas configurações há uma inércia mais proeminente da magnetização inicial das nanoilhas, fazendo com que a primeira inversão da magnetização ocorra de forma mais abrupta e em um valor de campo coercivo destacadamente mais alto. No entanto, as segundas reversões desses ciclos tem comportamento normal, similar ao restante do conjunto observado, pois dada a alta frequência de campo e o pequeno tempo de relaxação correspondente, a segunda reversão ocorre com o sistema ainda não totalmente relaxado para o seu estado fundamental. Tal energia residual permite flutuações que aniquilam essa tendência inercial da magnetização do sistema.

Por fim, os ciclos de histerese das figuras (4.8) e (4.10) confirmam o comportamento esperado para a coercividade da magnetização das nanoilhas. De forma geral, o campo coercivo diminui à medida em que a espessura das nanoilhas diminui e também diminui à medida em que a direção de aplicação do campo externo se afasta da direção do eixo de anisotropia L_x das nanoilhas, $\theta_B = 170^\circ$ e 135° , tornando as curvas mais estreitas.

Em vista do grande número de configurações dos momentos observadas durante as reversões, é mais fácil analisarmos o índice de coerência em cada processo de reversão da magnetização, conforme definido na equação (4.3). As figuras (4.11) e (4.12) mostram os índices de coerência I_{Coe} correspondentes à primeira reversão da magnetização de cada histerese ilustrada nas figuras (4.8) e (4.10), respectivamente. Ou seja, a figura (4.11) apresenta os índices de coerência para a reversão da magnetização das nanoilhas com razão de aspecto $q = 1,40$ e dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$ e a figura (4.12) apresenta os os índices de coerência

para a reversão da magnetização das nanoilhas com razão de aspecto $q = 2,75$ e dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$, para o regime de aplicação de campo magnético senoidal. A grosso modo, observa-se nas figuras que a magnetização tende a ser menos coerente durante as reversões sob aplicação de campo em frequências mais altas.

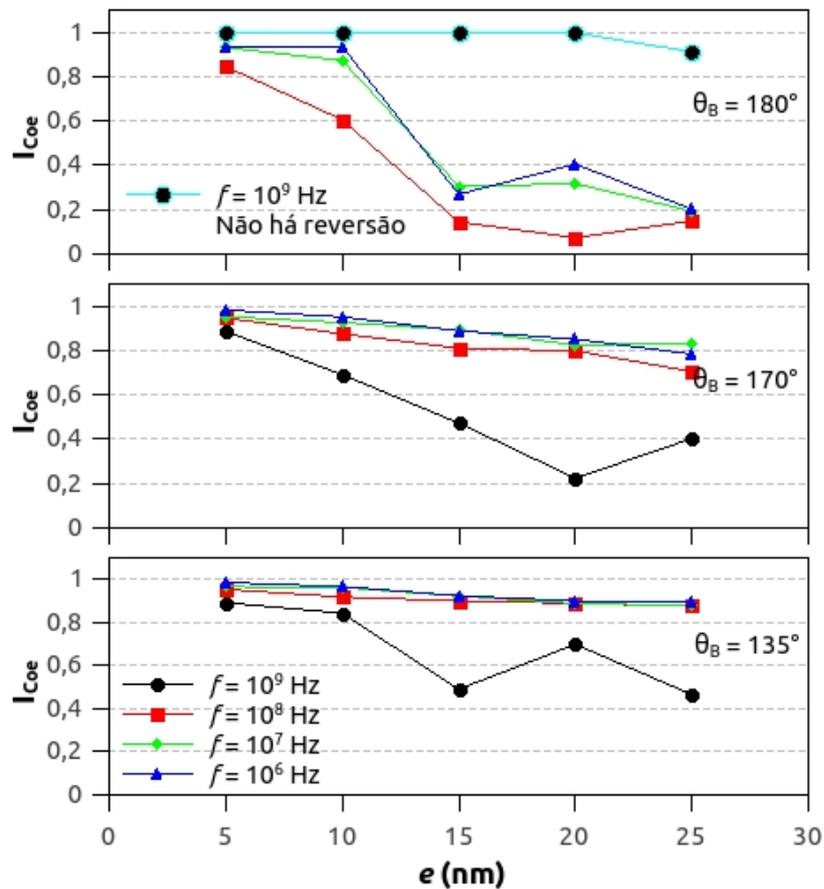


Figura 4.11 – Índices de coerência durante os primeiros processos de reversão da magnetização observados nos ciclos de histerese das nanopartículas com razão de aspecto $q = 1,40$ e dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$, em função da espessura e e para cada direção θ_B de campo externo aplicado. As frequências do campo aplicado estão definidas na legenda em cores da figura.

No primeiro quadro da figura (4.11), resultados para as reversões com campo aplicado em $\theta_B = 180^\circ$, vemos que para a frequência $f = 10^9 \text{ Hz}$ não há reversão da magnetização, dada a inércia da configuração magnética do estado fundamental para todas as espessuras consideradas das nanopartículas com a razão de aspecto $q = 1,40$ e dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$. Ainda neste quadro nota-se a discrepante queda nos valores dos índices de coerência das reversões para as nanoilhas com dimensões $70 \times 50 \times 15 \text{ nm}^3$, $70 \times 50 \times 20 \text{ nm}^3$ e $70 \times 50 \times 25 \text{ nm}^3$, em

virtude da formação de vórtice durante o processo de reversão da magnetização.

Os resultados para os índices de coerência nas reversões da magnetização das nanoilhas com razão de aspecto $q = 2,75$ e dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$ (tamanho experimental usual), apresentados na figura (4.12), revelam o alto grau de desordem na configuração dos momentos magnéticos para todas as frequências de campo aplicado e em todas as espessuras consideradas nos processos de reversão promovidos com campo aplicado ao longo do eixo de anisotropia L_x das nanoilhas ($\theta_B = 180^\circ$), veja o primeiro quadro da figura (4.12).

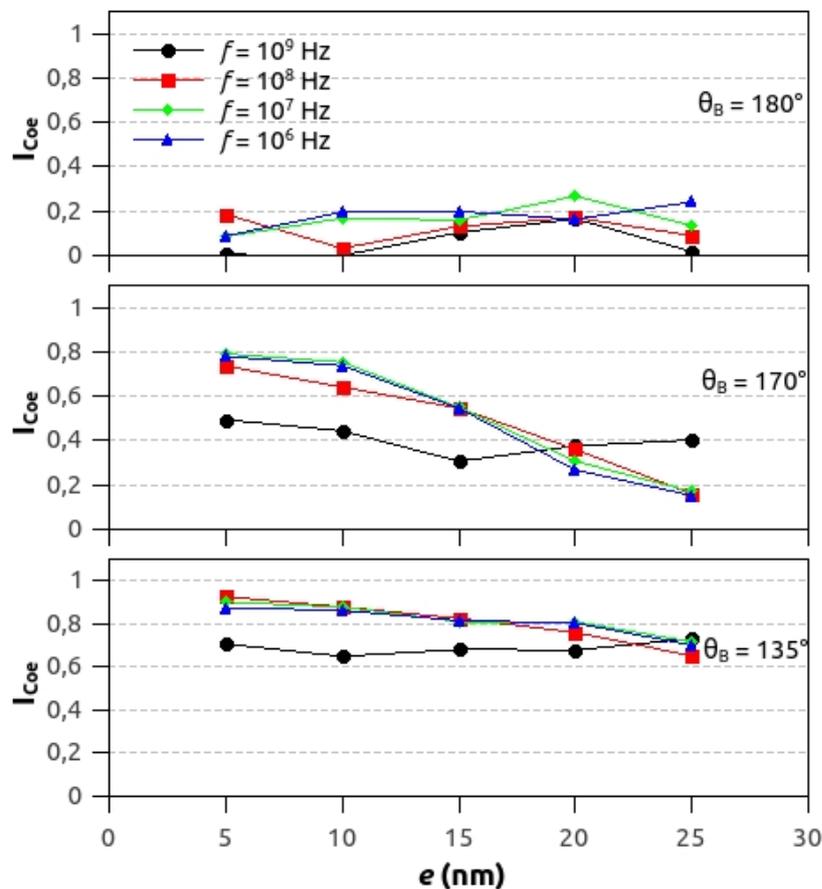


Figura 4.12 – Índices de coerência durante os primeiros processos de reversão da magnetização observados nos ciclos de histerese das nanopartículas com razão de aspecto $q = 2,75$ e dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$, em função da espessura e e para cada direção θ_B de campo externo aplicado. As frequências do campo aplicado estão definidas na legenda em cores da figura.

Embora a coerência das reversões da magnetização nestas nanoilhas melhore com campo aplicado na direção definida por $\theta_B = 170^\circ$, a desordem magnética durante os processos de reversão aumenta com o aumento na espessura das partículas e é grande nas partículas mais

‘grossas’. Especificamente, as nanoilhas com dimensões $220 \times 80 \times 20 \text{ nm}^3$ e $220 \times 80 \times 25 \text{ nm}^3$ tem pequenos índices de coerência da magnetização durante os processos de reversão, veja o segundo quadro da figura (4.12).

De maneira geral, os resultados expressos nas figuras (4.11) e (4.12) mostram que nanopartículas menores e mais finas (de menor espessura e) tendem a ter processos de reversão da magnetização mais coerentes. É notável nas figuras (4.11) e (4.12), que a coerência nas reversões é geralmente menor para partículas com maior espessura, se mantidas as outras configurações de aplicação de campo magnético externo. Além disso, o aumento da frequência do campo externo aplicado também tende a diminuir a coerência das configurações magnéticas durante as reversões de magnetização, embora sejam claras algumas exceções. É importante ressaltar que a aplicação do campo externo em direções cada vez mais ‘afastadas’ da direção do eixo de anisotropia L_x das nanoilhas promove reversões mais coerentes, sendo notável o aumento no índices de coerência nas simulações com campo externo aplicado em $\theta_B = 135^\circ$, principalmente nas nanoilhas de dimensões experimentais, veja o terceiro quadro da figura (4.12).

As figuras (4.13) e (4.14) ilustram os valores máximos das componentes da magnetização fora do plano $M_{z,max}$ durante os primeiros processos de reversão da magnetização observados nos ciclos de histerese das nanopartículas com razão de aspecto $q = 1,40$, e dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$, e das nanopartículas com razão de aspecto $q = 2,75$ e dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$, respectivamente.

Nota-se um comportamento interessante da magnetização das nanoilhas durante os processos de reversão, revelado nas figuras (4.13) e (4.14). A amplitude da magnetização fora do plano das partículas, ou seja, a componente z máxima da magnetização durante os processos de reversão aumenta consideravelmente com o aumento da frequência do campo externo aplicado.

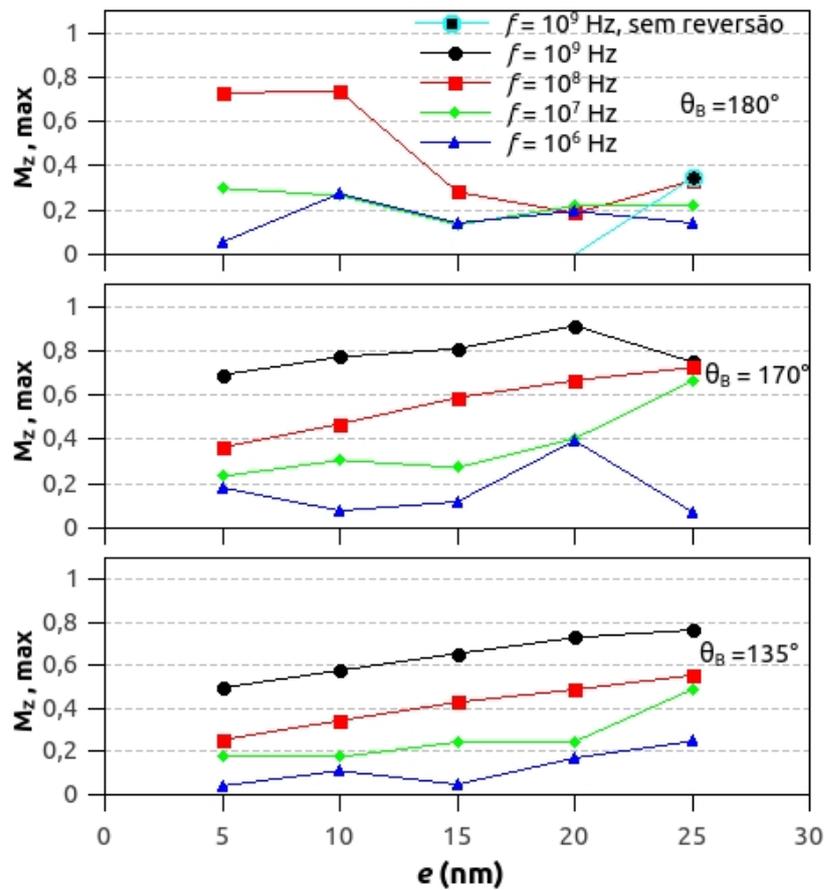


Figura 4.13 – Valores máximos das componentes da magnetização fora do plano $M_{z,max}$ durante os primeiros processos de reversão da magnetização observados nos ciclos de histerese das nanopartículas com razão de aspecto $q = 1,40$ e dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$, em função da espessura e para cada direção θ_B de campo externo aplicado. As frequências do campo aplicado estão definidas na legenda em cores da figura.

Para as nanoilhas com razão de aspecto $q = 1,40$ e dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$, os valores máximos da componente da magnetização fora do plano durante a reversão, aumentam com a espessura das nanopartículas, quando o campo é aplicado nas direções definidas por $\theta_B = 170^\circ$ e 135° , veja a figura (4.13). Vale destacar nesta figura, que os valores de $M_{z,max}$ em frequências mais altas de campo superam até mesmo as componentes $M_{z,max}$ nas reversões das nanoilhas de dimensões $70 \times 50 \times 15 \text{ nm}^3$, $70 \times 50 \times 20 \text{ nm}^3$ e $70 \times 50 \times 25 \text{ nm}^3$ sob campo externo aplicado na direção definida por $\theta_B = 180^\circ$, que são mediadas por vórtices, cuja respectiva configuração resulta naturalmente em uma apreciável componente da magnetização fora do plano da nanoilha.

Nos processos de reversão com campo aplicado em frequências mais baixas, especialmente na frequência $f = 10^6 \text{ Hz}$, o movimento dos momentos magnéticos é mais confinado ao plano das partículas, resultando numa reversão da magnetização com pequenas componentes z . Isso confirma o esperado para uma investigação realizada em condições de campo magnético externo quase-estático. Esse efeito, no entanto, é mais proeminente para as nanoilhas de dimensões experimentais, compare as figuras (4.13) e (4.14).

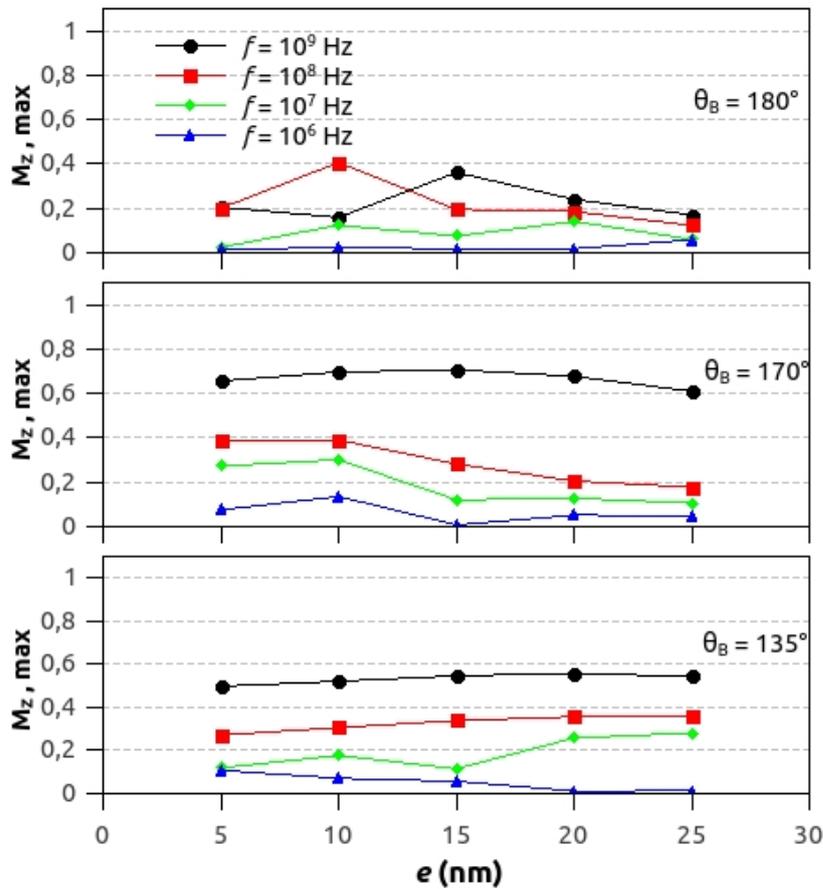


Figura 4.14 – Valores máximos das componentes da magnetização fora do plano durante os primeiros processos de reversão da magnetização observados nos ciclos de histerese das nanopartículas com razão de aspecto $q = 2,75$ e dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$, em função da espessura e e para cada direção θ_B de campo externo aplicado. As frequências do campo aplicado estão definidas na legenda em cores da figura.

De maneira geral, podemos afirmar que o aumento na componente da magnetização fora do plano das nanoilhas (componente z), durante os processos de reversão da magnetização, está associado a um aumento na desordem da configuração dos momentos magnéticos no processo. Em outras palavras, reversões da magnetização com pequeno índice de coerência cor-

respondem a processos mais desorganizados que permitem maior movimento dos momentos magnéticos da nanopartícula fora do plano de anisotropia.

Nosso aprendizado a partir do estudo com campo periódico serviu de guia para um projeto de controle da reversão rápida e coerente da magnetização em nanoilhas elípticas ferromagnéticas com estado fundamental de magnetização tipo C. Até o momento, as observações levam a crer que rotações coerentes da magnetização devem ser obtidas mais facilmente pela aplicação de campo magnético fora do eixo de anisotropia das nanoilhas, especialmente no caso de campo magnéticos de alta frequência ou de curta duração. A partir daí começamos o estudo da reversão da magnetização através de pulsos de campo magnético externo, com perfil gaussiano e largura fixa, aplicados diligentemente em diferentes direções, em passos do ângulo θ_B menores. Tais resultados serão apresentados na próxima seção.

4.2.2 Estudo da Reversão da Magnetização sob Aplicação de Pulsos Curtos de Campo Magnético Externo

Esta seção apresenta os resultados das simulações de reversões da magnetização nas nanoilhas elípticas, sob aplicação de pulsos curtos de campo magnético externo no plano das partículas (plano xy). Nós consideramos pulsos de campo magnético na forma gaussiana, com módulo dado por

$$|\vec{B}_i^{ext}| = |\vec{B}(t)| = B_0 e^{-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (4.5)$$

onde B_0 é a amplitude do pulso com largura de $0,5 \text{ ns}$ ($\sigma = 0.25 \text{ ns}$), localizado temporalmente em $t_0 = 0.937 \text{ ns}$ que é a ordem de grandeza para largura de pulsos rápidos usada em trabalhos experimentais (93, 94), veja a figura (4.15). Evidentemente, existem infinitos valores possíveis para as amplitudes do pulso de campo aplicado. A fim de restringir essa infinidade de valores e permitir um estudo sistemático, variamos os valores de amplitudes dos pulsos de campo magnético aplicados sempre em passos de 10 mT . Assim, todos os nossos resultados são apresentados em amplitudes de campo múltiplas de 10 mT .

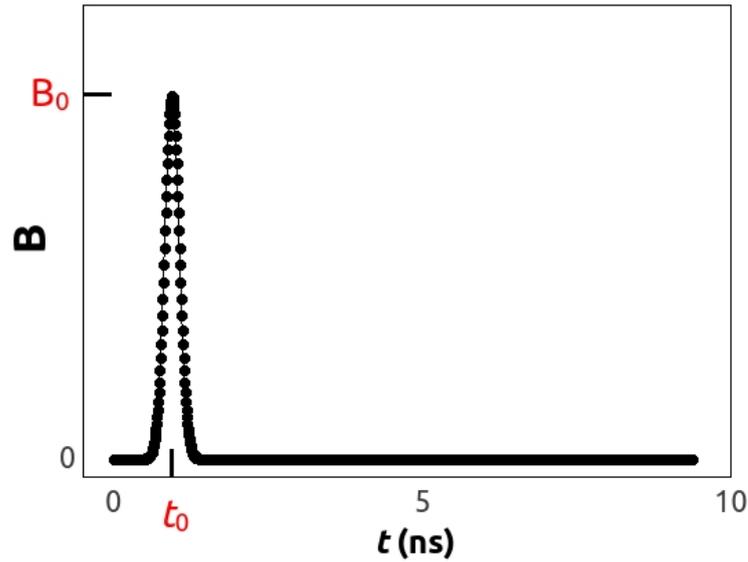


Figura 4.15 – Perfil do pulso de campo magnético aplicado. B_0 é a amplitude do pulso centrado em $t_0 = 0.937$ ns.

Os pulsos de campo magnéticos foram aplicados ao longo das direções definidas por θ_B variando de $\theta_B = 90^\circ$ a $\theta_B = 179^\circ$ em passos de 5° e para $179^\circ \leq \theta_B \leq 180^\circ$ os pulsos foram aplicados em passos de $0,05^\circ = 3'$, veja a figura (4.6).

A figura (4.16) mostra o comportamento do índice de coerência como função de θ_B para reversões da magnetização da nanoilha de dimensões $220 \times 80 \times 25$ nm³ para diferentes amplitudes B_0 do pulso de campo magnético aplicado. Em todo B_0 considerado, nós observamos um decaimento no índice de coerência à medida em que θ_B aumenta. Também observamos, que em pequenas amplitudes de B_0 (100 e 150 mT), não ocorre reversão em todos os valores de θ_B considerados, sendo possível que a magnetização da nanoilha relaxe para algum estado metaestável, como por exemplo a formação e estabilização de um ou dois vórtices, após a excitação pelo pulso de campo externo. Para valores mais altos de B_0 (200, 250 e 300 mT), a reversão ocorre até um ângulo $\theta_B \lesssim 180^\circ$. Por exemplo, para pulsos com amplitude $B_0 = 200$ mT, a reversão ocorre com repetibilidade até um ângulo máximo de $\theta_B^{max} = 179.45^\circ$, veja o quadro em detalhe na figura (4.16). Os resultados para as simulações em direções de aplicação do campo externo próximas ao eixo de anisotropia das nanoilhas ($179^\circ \leq \theta_B \leq 180^\circ$), mostram que tal **ângulo limite para reversão** θ_B^{max} é proporcional à amplitude do campo magnético externo

aplicado.

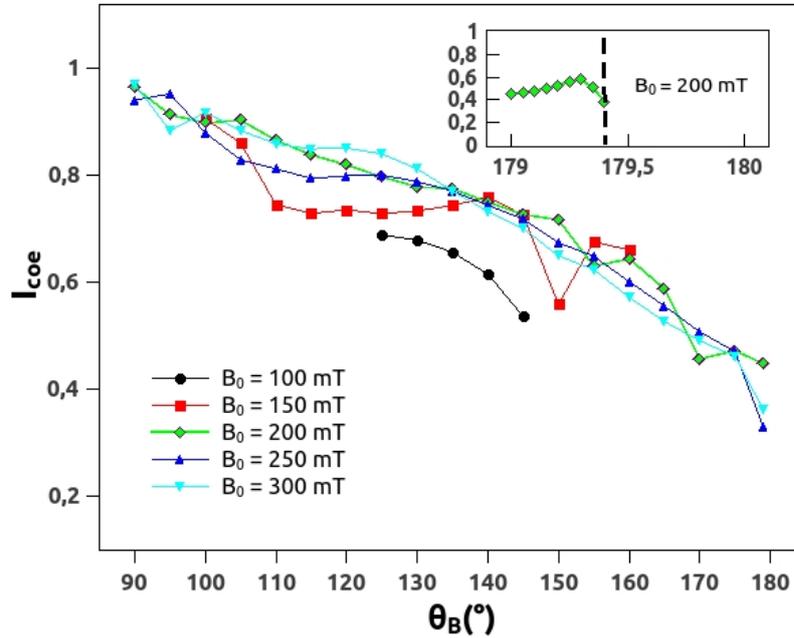


Figura 4.16 – Comportamento do índice de coerência I_{coe} em função de θ_B para a reversão da magnetização da nanoilha de dimensões $220 \times 80 \times 25 \text{ nm}^3$ para diferentes amplitudes B_0 do pulso de campo magnético aplicado. Em detalhe: Comportamento de I_{coe} para ângulos $179^\circ \leq \theta_B \leq 180^\circ$ com $B_0 = 200 \text{ mT}$.

Observamos que neste regime em que usamos pulsos curtos de campo magnético para reversão da magnetização, o campo coercivo para reversão da magnetização da nanoilha elíptica tem o seu valor mínimo em $\theta_B \approx 135^\circ$. Esse resultado contrasta com o observado em condições de variação quase-estática de campo externo aplicado, em que foi observada uma coercividade mínima em situação equivalente à $\theta_B = 90^\circ$ (103).

Da observação direta da figura (4.16) e a partir dos resultados da seção 4.2.1, há claras evidências de que os processos coerentes de reversão da magnetização nas nanoilhas elípticas devem ser mais susceptíveis para campo aplicado próximo à $\theta_B = 90^\circ$. Dessa forma, definimos B_0^{min} como a **mínima amplitude de pulso de campo magnético necessária para reverter a magnetização da nanoilha quando aplicado em $\theta_B = 90^\circ$** . A figura (4.17) mostra o comportamento de B_0^{min} para as nanoilhas com dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$ e $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$ como função da espessura e . Pode-se observar que B_0^{min} aumenta com a espessura das nanoilhas e é sempre maior para a partícula de maiores dimensões.

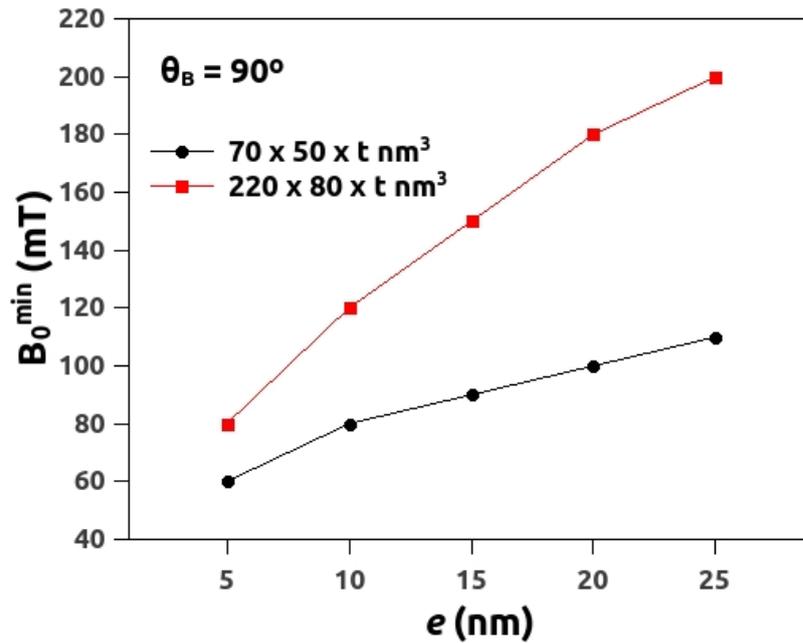


Figura 4.17 – Comportamento de B_0^{min} em função da espessura e para as nanoilhas com dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$ e $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$.

As figuras (4.18) e (4.19) mostram o comportamento dos índices de coerência para as reversões da magnetização das nanoilhas com dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$ e $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$, respectivamente, em função do ângulo θ_B que define a direção de aplicação do pulso de campo magnético. Para cada espessura considerada nós usamos pulsos com a respectiva amplitude $B_0 = B_0^{min}$, veja figura (4.17). Observamos reversões coerentes da magnetização ($I_{coe} > 0,92$) em todas as nanoilhas quando o pulso de campo externo é aplicado na direção perpendicular ao eixo de anisotropia da partícula, ou seja, em $\theta_B = 90^\circ$. Também é notável que I_{coe} diminui à medida que θ_B cresce, em outras palavras, o processo de reversão da magnetização tende a ser menos coerente sob aplicação de pulsos curtos de campo em direções mais próximas ao eixo de anisotropia (L_x) da nanoilha. Embora esse comportamento seja observável nas duas razões de aspecto estudadas, ele é muito mais apreciável em nanopartículas com maiores razões de aspecto. Compare a grande queda do I_{coe} na figura (4.18), para as nano ilhas com dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$, em relação à queda suave do I_{coe} para as nanoilhas menores $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$, figura (4.19).

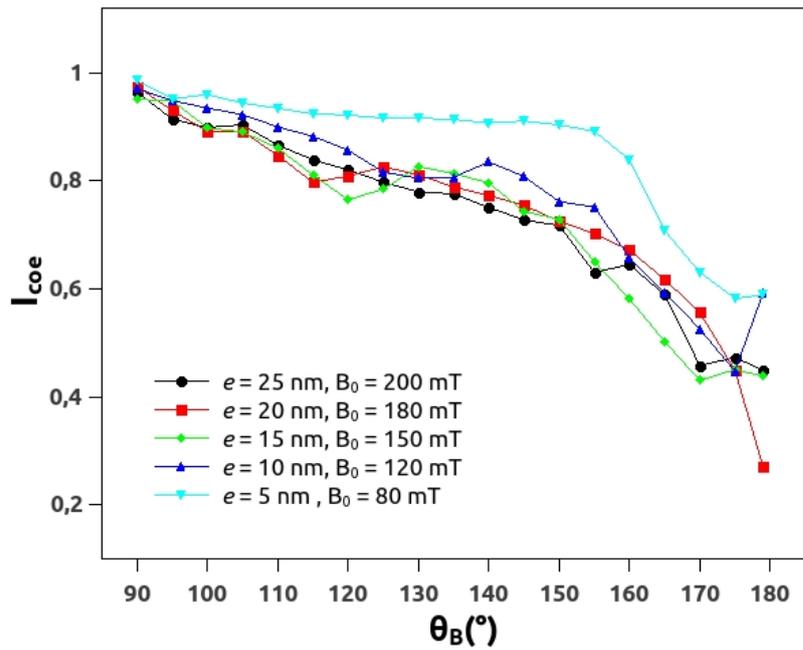


Figura 4.18 – Comportamento do índice de coerência I_{coe} em função de θ_B para a reversão da magnetização das nanoilhas com dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$ com diferentes espessuras e . Para cada espessura foram aplicados pulsos com a respectiva amplitude $B_0 = B_0^{min}$.

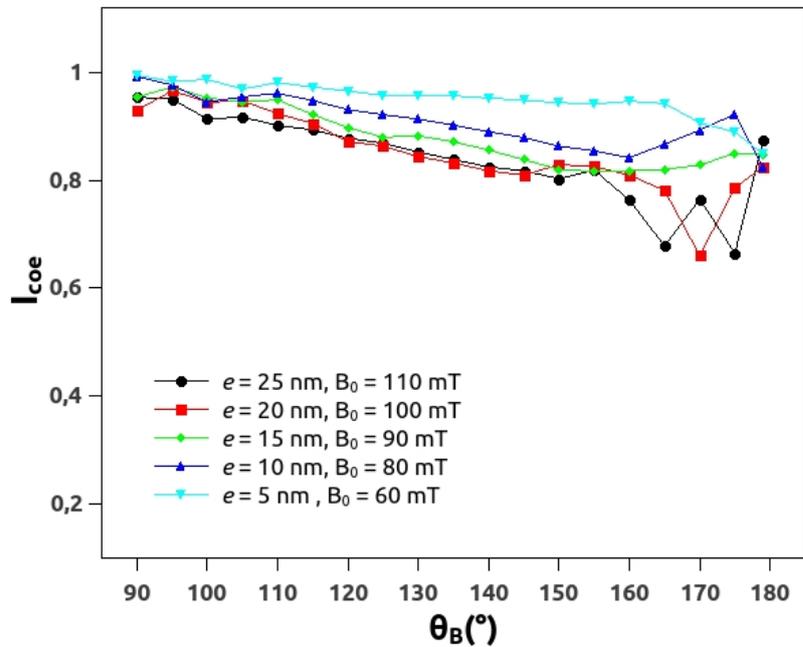


Figura 4.19 – Comportamento do índice de coerência I_{coe} em função de θ_B para a reversão da magnetização das nanoilhas com dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$ com diferentes espessuras e . Para cada espessura foram aplicados pulsos com a respectiva amplitude $B_0 = B_0^{min}$.

Como ilustração das diferenças entre os mecanismos de reversão que levam à grande

discrepância entre os índices de coerência nas reversões das nanoilhas em tamanho experimental $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$, observada na figura (4.18), a figura (4.20) mostra instantâneos da vista superior das configurações magnéticas para duas reversões da nanoilha elíptica exatamente na dimensão experimental $220 \times 80 \times 25 \text{ nm}^3$ (27).

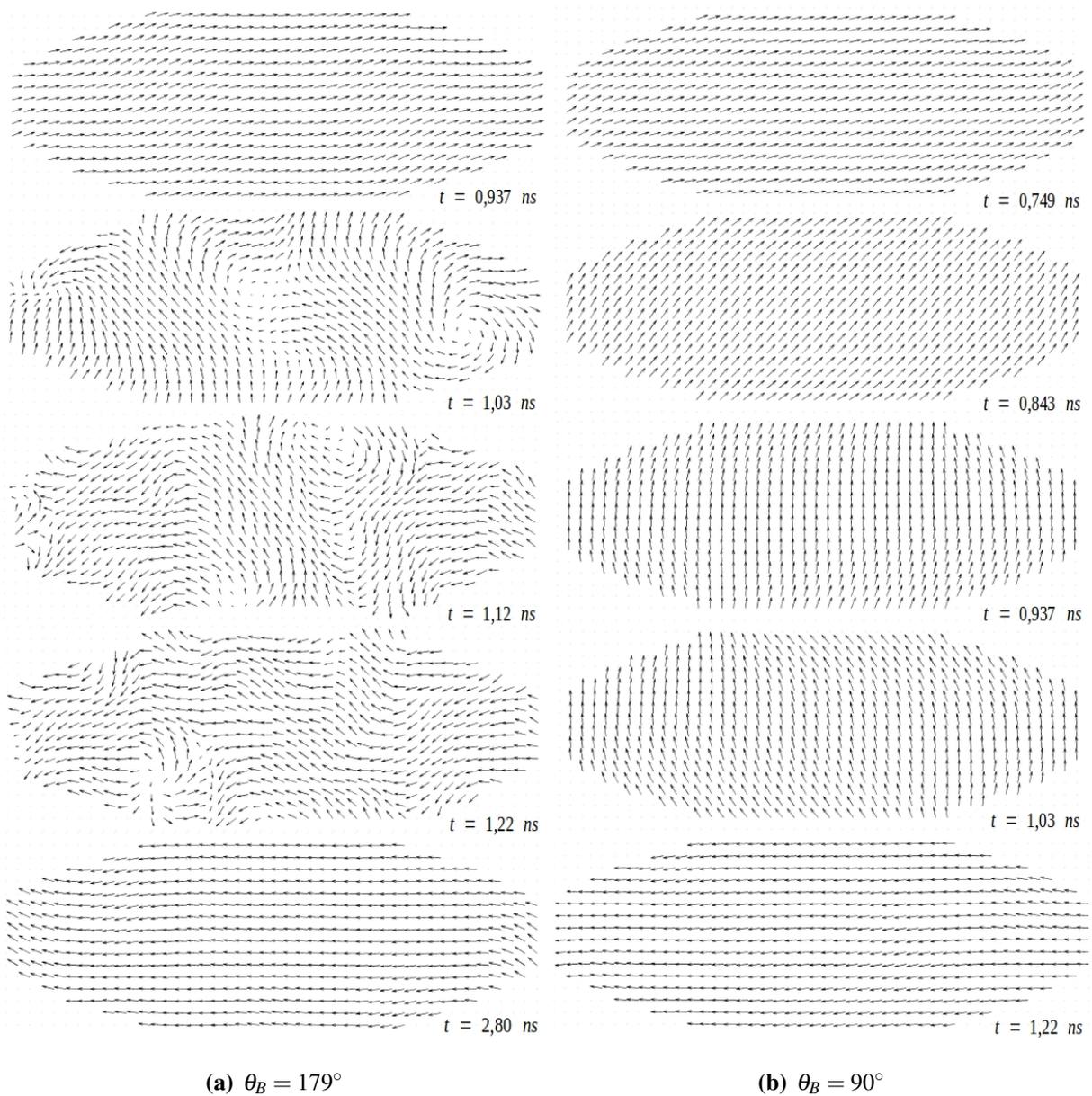


Figura 4.20 – Vista superior de instantâneos das configurações magnéticas durante a reversão da magnetização da nanoilha em tamanho experimental $220 \times 80 \times 25 \text{ nm}^3$ (27), sob pulsos de mesma amplitude $B_0 = B_0^{min} = 200 \text{ mT}$ aplicados nas direções: (a) $\theta_B = 179^\circ$ e (b) $\theta_B = 90^\circ$. Os respectivos instantes de tempo de cada configuração estão indicados na figura.

São ilustradas na figura (4.20) reversões sob pulsos de mesma amplitude $B_0 = B_0^{min} =$

200 mT aplicados nas direções $\theta_B = 179^\circ$ (figura 4.20 - (a)), e $\theta_B = 90^\circ$ (figura 4.20 - (b)). Para $\theta_B = 179^\circ$ a reversão não é coerente, sendo o processo mediado por estruturas complexas com criação e aniquilação de vórtices. Já sob a aplicação de pulso na direção equivalente à $\theta_B = 90^\circ$, a reversão é coerente, resultando em um processo de reversão e posterior relaxação para o estado fundamental naturalmente mais rápido ⁵.

Sob o ponto de vista experimental, nossos resultados mostram que aplicando pulsos de campo magnético na direção equivalente à $\theta_B = 90^\circ$ é possível induzir reversões coerentes da magnetização em nanoilhas elípticas. Além disso, nesta direção de aplicação, é possível controlar a reversão da magnetização nos dois possíveis sentidos de orientação da partícula, por exemplo $+\hat{x}$ e $-\hat{x}$, sem precisar realizar qualquer mudança num possível aparato experimental.

Há ainda um importante resultado a salientar. Aplicando pulsos exatamente em $\theta_B = 180^\circ$, só é possível induzir reversão da magnetização em amplitudes de campo muito maiores que o respectivo valor de B_0^{min} da nanoilha. Por exemplo, $B_0^{min} = 200\text{ mT}$ para a nanoilha de tamanho experimental $220 \times 80 \times 25\text{ nm}^3$. No entanto, só é possível reverter sua magnetização aplicando pulsos, nos mesmos parâmetros descritos aqui, ao longo da direção equivalente a $\theta_B = 180^\circ$ a partir de amplitudes de, no mínimo, 320 mT . Esse efeito é maior para partículas menores e mais finas. Por exemplo, para o outro extremo de nosso estudo em termos de dimensão, a nanoilha com dimensões $70 \times 50 \times 5\text{ nm}^3$ tem um respectivo $B_0^{min} = 60\text{ mT}$. No entanto, sua magnetização mantém-se praticamente estagnada em amplitudes de até 450 mT se o pulso for aplicado exatamente na direção $\theta_B = 180^\circ$. Esse efeito está relacionado ao pequeno torque gerado pelo pulso de campo sobre a magnetização do estado fundamental da nanoilha, em pulsos aplicados na direção $\theta_B = 180^\circ$, devido ao anti-paralelismo entre as direções do campo aplicado e da direção da magnetização e devido ao pouco tempo de interação disponível entre o pulso e os momentos magnéticos da partícula (pulso com apenas $0,5\text{ ns}$ de largura).

Diante do exposto, foram realizadas várias simulações com pulsos aplicados exatamente na direção $\theta_B = 180^\circ$. Além da necessidade de valores de amplitude de campo absurdamente altos, em todas as nanoilhas estudadas, a aplicação de campo nessa direção pode induzir

⁵ Compare na figura (4.20) os diferentes instantes de tempo de cada configuração.

θ_B^{max} para nanoilhas com dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$					
Espessura (nm)	25	20	15	10	5
B_0^{min} (mT)	200	180	150	120	80
θ_B^{max}	179,45°	179,60°	179,50°	179,90°	179,95°
$\pi - \theta_B^{max}$	0,55°	0,40°	0,50°	0,10°	0,05°

Tabela 4.1 – Valores de θ_B^{max} para as nanoilhas com dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$ sob aplicação de pulsos com as respectivas amplitudes $B_0 = B_0^{min}$.

θ_B^{max} para nanoilhas com dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$					
Espessura (nm)	25	20	15	10	5
B_0^{min} (mT)	110	100	90	80	60
θ_B^{max}	179,10°	179,70°	179,90°	179,95°	179,95°
$\pi - \theta_B^{max}$	0,90°	0,30°	0,10°	0,05°	0,05°

Tabela 4.2 – Valores de θ_B^{max} para as nanoilhas com dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$ sob aplicação de pulsos com as respectivas amplitudes $B_0 = B_0^{min}$.

estados metaestáveis da magnetização da nanoilha, como a formação e estabilização de um ou dois vórtices (107, 132), situações observadas e validadas em nossas simulações. No entanto, nossas simulações para $179^\circ \leq \theta_B \leq 180^\circ$, mostram que essa situação estática pode mudar radicalmente para um pequeno desvio, ou seja, se o pulso for aplicado em um pequeno ângulo $\pi - \theta_B$.

Como vimos, para uma determinada amplitude de pulso, a reversão ocorre até um ângulo limite denominado θ_B^{max} , que depende das dimensões da nanoilha e é proporcional à amplitude do pulso de campo magnético externo aplicado. Nossas simulações para $179^\circ \leq \theta_B \leq 180^\circ$ em passos de $0,05^\circ = 3'$, permite-nos estimar tais ângulos máximos sob aplicação de pulsos com a respectiva amplitude mínima para reversão em $\theta_B = 90^\circ$, que definimos por B_0^{min} da nanoilha. Os respectivos valores estimados de θ_B^{max} para essa condição estão resumidos nas tabelas (4.1) para as nanopartículas com dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$ e (4.2) para as nanopartículas com dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$.

Nós podemos usar esses resultados para idealizar um método de controle da reversão da magnetização de nanoilhas em redes quadradas de gelos de spin artificiais. Aplicando pulsos de campo magnético na respectiva amplitude mínima (B_0^{min}) em uma das direções da rede (\hat{x} ou

\hat{y}), será possível induzir reversões nas nanoilhas com eixo maior L_x perpendiculares à direção de aplicação do pulso, deixando inalteradas a magnetização das partículas com eixo maior L_x paralelo à direção de aplicação do pulso. Evidentemente, há uma precisão mínima de alinhamento em que tal condição seria válida em um possível arranjo experimental real. Tal precisão mínima de alinhamento dependeria das dimensões das nanoilhas usadas no arranjo de gelo de spin e da amplitude de pulso do campo aplicado. No nosso caso, se considerarmos pulsos com amplitude $B_0 = B_0^{min}$ para cada nanoilha, tais valores seriam equivalentes ao ângulo $\pi - \theta_B^{max}$, resumidos nas últimas linhas das tabelas (4.1) para as nanopartículas com dimensões $220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$ e (4.2) para as nanopartículas com dimensões $70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$.

Examinando as tabelas (4.1) e (4.2), podemos perceber que a realização de tal prática é mais indicada em partículas mais espessas, onde a precisão mínima de alinhamento necessária para que o método funcione é menos limitante. Por exemplo, usando uma partícula na usual dimensão experimental $220 \times 80 \times 25 \text{ nm}^3$, o respectivo pulso aplicado poderia estar desalinhado da direção realmente pretendida em um ângulo de até $0,55^\circ$ para que o método continuasse válido, vide tabela (4.1). Dentro dos atuais padrões de pesquisa experimental, um desalinhamento de $0,55^\circ$, equivalente a $33'$ de grau, é um valor grosseiro, ou seja, as precisões possíveis são muito mais apuradas. Tais observações mostram que, a princípio, tal método é possível de ser implementado.

Embora tenhamos proposto um método de controle para reversão da magnetização de nanoilhas em redes quadradas de gelos de spin artificiais, nossos resultados são válidos para as nanopartículas elípticas ferromagnéticas estudadas, seja qual for sua possível utilidade prática.

A fim de comparar o comportamento das reversões sob pulsos com larguras diferentes, realizamos algumas simulações com pulsos de larguras diferentes na nanoilha de tamanho experimental $220 \times 80 \times 25 \text{ nm}^3$. Os resultados destes testes estão resumidos na figura (4.21) ⁶, considerando pulsos com larguras de $0,0010 \text{ ns}$, $0,25 \text{ ns}$, $0,50 \text{ ns}$, $0,75 \text{ ns}$ e $1,0 \text{ ns}$.

⁶ À exceção da figura (4.21), todos os dados apresentados foram obtidos considerando pulsos com largura de $0,50 \text{ ns}$.

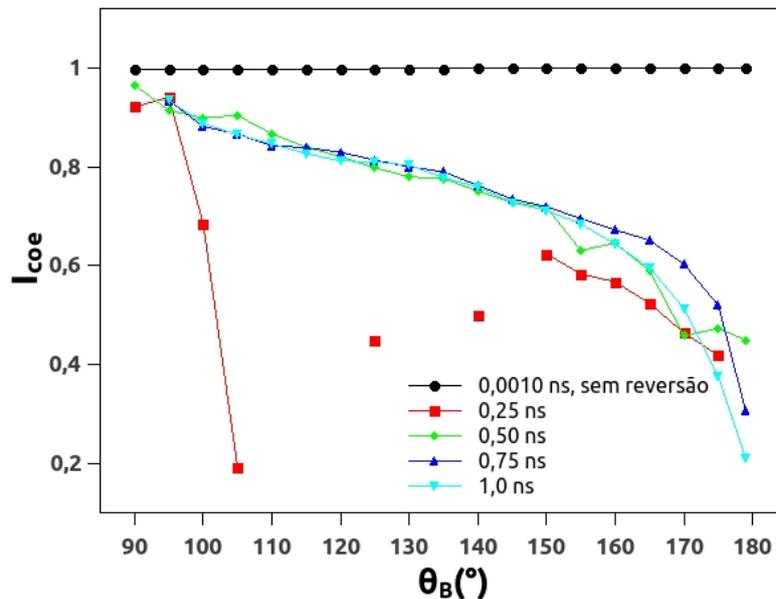


Figura 4.21 – Comportamento do índice de coerência I_{coe} em função de θ_B para a reversão da magnetização da nanoilha de dimensões $220 \times 80 \times 25 \text{ nm}^3$ para pulsos de campo magnético aplicado com larguras diferentes. As respectivas larguras de pulso estão indicadas na legenda em cores da figura.

Podemos observar na figura (4.21) que o pulso mais curto ($0,0010 \text{ ns}$) não foi capaz de reverter a magnetização da nanoilha em nenhuma das direções de aplicação, como era esperado. O pulso de largura $0,25 \text{ ns}$ é capaz de reverter a magnetização com repetibilidade em ângulos próximos à $\theta_B = 90^\circ$ ou $\theta_B = 180^\circ$, sendo insuficiente para garantir processos de reversão controlada na faixa em torno de $\theta_B = 135^\circ$. Tal comportamento é exatamente o oposto ao observado para diferentes amplitudes, reveja a figura (4.16). Por fim, o comportamento das reversões em pulsos mais largos ($0,75 \text{ ns}$ e $1,0 \text{ ns}$) é muito similar ao observado para a largura de pulso usado em todos os outros cálculos realizados ($0,50 \text{ ns}$). Isso confirma a forte dependência da coerência do processo de reversão com a direção de aplicação do pulso de campo magnético, e nos dá a noção da dependência qualitativa do efeito da mudança da largura de pulso efetivamente usado no possível controle da magnetização em tais nanoilhas elípticas.

5 *Conclusões*

Conforme o proposto, estudamos o comportamento da magnetização em nanoilhas elípticas ferromagnéticas, supostamente fabricadas em Permalloy-79. Em nanoescala, os efeitos desmagnetizantes de origem dipolar geram uma forte anisotropia de forma magnética, definindo duas possíveis configurações para o estado fundamental da magnetização das nanoilhas: o estado alinhado tipo C e o estado de vórtice. Diante das aplicações tecnológicas baseadas nesse tipo de nanomagnet, investigamos a competição entre tais configurações em função da forma e das dimensões das nanoilhas e investigamos os processos de reversão da magnetização em nanoilhas com estado fundamental tipo C.

Simulamos nanoilhas magnéticas individuais modeladas por momentos magnéticos localizados em células discretas micromagnéticas, onde cada momento representa os momentos magnéticos atômicos contidos naquela célula. Os momentos magnéticos de cada célula interagem via interação de troca, via interação dipolar e com um possível campo magnético externo. A anisotropia de forma foi contabilizada ao considerarmos todas as possíveis interações dipolo-dipolo entre células, o que restringe nosso método para sistemas de muitos momentos interagentes, devido ao aumento do tempo de computação, mas simula de forma mais fiel o comportamento natural do sistema.

A fim de determinar o estado fundamental da magnetização das nanoilhas, estudamos a competição entre os estados de vórtice e tipo C, em função das dimensões de nanoilhas elípticas planas, que nos permitiu construir um diagrama de estados (vórtice \times tipo C). Nós observamos que é possível obter nanoilhas alongadas, a princípio na forma elíptica, em que a anisotropia de forma define o estado de magnetização alinhado tipo C com dimensões (e razões

de aspecto) muito menores que a dos atuais sistemas experimentais que utilizam tais nanoilhas como unidade fundamental de lógica ou armazenamento magnético de dados. Destacamos como aplicação de nosso maior interesse os sistemas magnéticos artificiais geometricamente frustrados, ou simplesmente gelos de spin artificiais.

Mostramos que é possível obter nanoilhas alongadas no estado de magnetização monodomínio tipo C em razões de aspecto consideravelmente menores que dois, que é um importante resultado do ponto de vista experimental. Uma vez que as redes experimentais de gelos de spin artificiais usam ilhas com razões de aspecto próximas a três ¹, para garantir o estado alinhado da magnetização, nossos resultados revelam a possibilidade teórica de considerável miniaturização de tais sistemas.

Diante do conhecimento adquirido sobre as configurações que definem o estado fundamental da magnetização desejado para as possíveis aplicações tecnológicas destas nanopartículas ², realizamos simulações a fim de investigar os processos de reversão da magnetização. A fim de comparar e testar sua funcionalidade, investigamos as reversões da magnetização em dois conjuntos de partículas com razões de aspecto e dimensões dadas por $q = 2,75$ ($220 \times 80 \times e \text{ nm}^3$), razão de aspecto usual em trabalhos spin ice experimentais e $q = 1,40$ ($70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$), razão de aspecto reduzida proposta por nós e espessuras “ e ” distintas de 5 nm , 10 nm , 15 nm , 20 nm e 25 nm .

Evidentemente, há uma infinidade de possíveis configurações de dimensões para nanoilhas nessa forma geométrica, demonstrado no diagrama de estados vórtice x tipo C, figura (4.3). Em vista da impossibilidade de estudo de todas as configurações, escolhemos uma configuração extremamente reduzida e a comparamos com a nanoilha na configuração de dimensões similar à experimental, nos estudos com campo magnético externo aplicado. Nossos resultados mostram que as nanoilhas com razão de aspecto e dimensões reduzidas proposta por nós ($70 \times 50 \times e \text{ nm}^3$) são perfeitamente estáveis e funcionais no estado de magnetização alinhado tipo C. Tal comportamento previsível nas duas configurações de nanoilhas estudadas nos

¹ Ou até maiores que três.

² As principais aplicações tecnológicas vislumbradas são fundamentadas em nanoilhas alongadas no estado de magnetização alinhado tipo C.

permitem traçar comportamentos gerais para os processos de reversão da magnetização.

Observamos que os processos de reversão da magnetização são susceptíveis às variações na frequência do campo magnético externo que promove a dinâmica da magnetização. Diante disso, é importante considerar as ocasionais diferenças que podem ser observadas entre dados obtidos experimentalmente, geralmente em condições quase-estáticas de campo magnético externo, com dados obtidos por simulações numéricas similares às usadas nesta tese, conhecidas por dinâmica de spin. Mostramos também que essa dependência com a frequência de aplicação do campo magnético pode ser minimizada se aplicarmos campo em direções não coincidentes com o eixo maior (eixo de anisotropia) da nanoilha. Especificamente, quanto mais próxima da direção perpendicular ao eixo de anisotropia é a direção de aplicação do campo, menor é o efeito devido à variação de frequência, ou do tempo de aplicação, do campo magnético externo.

Mostramos que os mecanismos de reversão da magnetização dependem fortemente da direção de aplicação do campo magnético externo e também das dimensões da nanopartícula. De maneira geral, é mais fácil induzir reversões coerentes (reversões por rotações sincronizadas dos momentos magnéticos da nanopartícula) em partículas menores e mais finas. No entanto, a direção de aplicação do campo externo é fundamental para determinar o índice de coerência do respectivo processo de reversão. Todos os nossos resultados indicam claramente que a coerência dos processos de reversão da magnetização aumenta à medida em que aplicamos campo em direções mais próximas à direção perpendicular ao eixo de anisotropia da nanopartícula. Isso acontece mesmo nos processos impulsionados por pulsos rápidos de campo magnético externo, conforme apresentamos na seção 4.2.2. Embora a princípio tal resultado não seja intuitivo, tal direção de aplicação do campo magnético maximiza o torque sobre a magnetização da partícula e implica em processos menos energéticos em comparação à aplicação de campo externo em direções quase paralelas ao eixo de anisotropia da partícula. O resultado são processos de reversão da magnetização mais coerentes, menos energéticos e, conseqüentemente, com menor tempo de reversão e relaxação da nanoilha de volta ao seu estado fundamental da magnetização.

Vale salientar que pequenas variações na direção de aplicação do campo em relação à

aplicação exatamente ao longo do eixo de anisotropia da nanopartícula, pode levar à mudanças drásticas nos processos de reversão da magnetização. Esses resultados confirmam a observação de que tal efeito deve ser considerado na comparação entre dados obtidos experimentalmente e por simulação computacional (99, 101).

Baseado em nossas observações, propomos o controle da reversão da magnetização em nanoilhas elípticas pela aplicação de pulsos curtos, da ordem de nanossegundos, sendo o campo magnético externo aplicado na direção perpendicular ao eixo de anisotropia da partícula. Tal metodologia permite reversões com maior índice de coerência, além da simplicidade de controlar a reversão da magnetização da nanoilha nos dois sentidos possíveis sem mudança alguma na direção ou forma do campo aplicado. Destacamos que tal técnica pode ser especialmente útil em redes quadradas de gelos de spin artificiais e indicamos os limites práticos de validade, que são as dimensões das nanoilhas com real potencial de uso nesse sentido e as respectivas precisões mínimas de alinhamento para aplicação do campo externo.

Acreditamos que nosso trabalho possa ser útil como um guia na fabricação de sistemas artificiais baseados em nanoilhas ferromagnéticas alongadas, através do diagrama de estados em função das dimensões da nanoilha apresentado. Além disso, propomos um método de controle da magnetização por pulsos ultra rápidos de campo magnético, que pode ser especialmente útil ao contribuir para o desenvolvimento de processos de controle e manipulação de cargas magnéticas em gelos de spin artificiais, e que pode ser usado também em dispositivos de lógica ultra rápidos e em sistemas de memória magnética de acesso aleatório (MRAM).

Vale salientar que nossas simulações resultaram na publicação de um artigo, apresentado na íntegra no anexo A e na submissão de um segundo trabalho, que está em processo de revisão, sendo apresentado no anexo B.

Por fim, cabe dizer que este trabalho é apenas mais um passo no entendimento de sistemas magnéticos nano-estruturados, e mais uma referência de método teórico de estudo na área. Há uma série de perspectivas de trabalhos futuros nesse sentido, como o refinamento do modelo, que pode, por exemplo, incluir as flutuações térmicas do sistema. Podemos ainda

repetir todo o procedimento apresentado nesta tese para nanoilhas litografadas a partir de filmes heteroestruturados, ou seja, com camadas de materiais mistos, o que nos daria uma infinidade de sistemas a estudar e permitir a comparação, por exemplo, com os presentes resultados para as nanoilhas de material magnético macio como o Permalloy-79. Podemos também partir para um projeto de mudança da técnica de simulação, que permita estudos similares em sistemas de maiores dimensões.

APÊNDICE A – Limite Contínuo do Modelo de Heisenberg Isotrópico

Apresentamos aqui o desenvolvimento do modelo de Heisenberg isotrópico para o limite contínuo. Os procedimentos desenvolvidos aqui são similares aos desenvolvidos na referência (114), para momentos magnéticos distribuídos numa rede tridimensional cúbica simples.

O hamiltoniano (2.19) pode ser escrito na forma aberta do produto escalar como

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [m_i^x m_j^x + m_i^y m_j^y + m_i^z m_j^z]. \quad (\text{A.1})$$

Considerando um momento magnético i localizado no centro de cada célula, em uma rede cúbica simples com parâmetro de rede a e volume $v = a^3$, temos 6 primeiros vizinhos. Assim, pode-se escrever explicitamente os termos de interação considerados em (A.1), entre o respectivo versor momento magnético \hat{m}_i e os seus vizinhos mais próximos $\hat{m}_{i\pm 1}$, $\hat{m}_{i\pm 2}$ e $\hat{m}_{i\pm 3}$ na forma

$$T_i^\alpha = m_i^\alpha (m_{i+1}^\alpha + m_{i-1}^\alpha) + m_i^\alpha (m_{i+2}^\alpha + m_{i-2}^\alpha) + m_i^\alpha (m_{i+3}^\alpha + m_{i-3}^\alpha), \quad (\text{A.2})$$

onde $\alpha = x, y, z$.

Em baixas temperaturas, as flutuações térmicas são insignificantes e as variações nas direções dos momentos magnéticos são praticamente contínuas, permitindo-nos expandir as componentes dos momentos magnéticos dos primeiros vizinhos em série de Taylor ($f(\vec{r}) =$

$f(\vec{r}_0) + (\vec{r} - \vec{r}_0) \cdot \vec{\nabla} f(\vec{r}_0) + \dots$). Desprezando-se os termos de ordem maior que dois e os termos com derivadas mistas obtemos

$$\begin{aligned}
 m_{i+1}^\alpha &= m_i^\alpha + a \frac{\partial m_i^\alpha}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial x^2} \quad \text{e} \quad m_{i-1}^\alpha = m_i^\alpha - a \frac{\partial m_i^\alpha}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial x^2}, \\
 m_{i+2}^\alpha &= m_i^\alpha + a \frac{\partial m_i^\alpha}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial y^2} \quad \text{e} \quad m_{i-2}^\alpha = m_i^\alpha - a \frac{\partial m_i^\alpha}{\partial y} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial y^2}, \\
 m_{i+3}^\alpha &= m_i^\alpha + a \frac{\partial m_i^\alpha}{\partial z} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial z^2} \quad \text{e} \quad m_{i-3}^\alpha = m_i^\alpha - a \frac{\partial m_i^\alpha}{\partial z} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial z^2}.
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

Levando essas expansões em T_i^α na equação (A.2), as derivadas primeiras se cancelam e assim

$$T_i^\alpha = 6(m_i^\alpha m_i^\alpha) + a^2 m_i^\alpha \left(\frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 m_i^\alpha}{\partial z^2} \right), \tag{A.4}$$

que pode ser reescrita na forma simplificada

$$T_i^\alpha = 6(m_i^\alpha)^2 + a^2 m_i^\alpha \nabla^2 m_i^\alpha. \tag{A.5}$$

Pode-se então trocar a representação discreta da interação entre momentos descrita no hamiltoniano (A.1) por uma integral tripla tomada no volume V do material dada por

$$H \longrightarrow E_{troca} = -J \int_V (T^x + T^y + T^z) \frac{dv}{a^3}. \tag{A.6}$$

Tal integral é conhecida como **energia de troca**. Substituindo nesta expressão para a energia de troca (A.6) os termos de interação na forma da equação (A.5), obtemos

$$\begin{aligned}
E_{tr} = & -J \int_V 6[(m^x)^2 + (m^y)^2 + (m^z)^2] \frac{dv}{a^3} + \\
& -J \int_V a^2 [m^x \nabla^2 m^x + m^y \nabla^2 m^y + m^z \nabla^2 m^z] \frac{dv}{a^3}.
\end{aligned} \tag{A.7}$$

Mas $(m^x)^2 + (m^y)^2 + (m^z)^2 = 1$, vínculo definido na equação (2.20). Assim,

$$\begin{aligned}
E_{tr} = & -\frac{6JV}{a^3} + \\
& -\frac{J}{a} \int_V [m^x \nabla^2 m^x + m^y \nabla^2 m^y + m^z \nabla^2 m^z] dv,
\end{aligned} \tag{A.8}$$

onde o primeiro termo constante representa a energia E_0 do estado fundamental do sistema.

Renormalizando a energia, fazemos $E_{tr} - E_0 \rightarrow E_{tr}$, e identificando que

$$m^x \nabla^2 m^x + m^y \nabla^2 m^y + m^z \nabla^2 m^z = \hat{m} \cdot \nabla^2 \hat{m},$$

pode-se reescrever a equação (A.8) na forma mais compacta

$$E_{tr} = -A \int_V [\hat{m} \cdot \nabla^2 \hat{m}] dv, \tag{A.9}$$

onde $A = \frac{J}{a}$.

Embora o parâmetro A tenha sido obtido para uma rede cúbica simples, ele pode ser generalizado para outras redes com simetria cúbica pela expressão

$$A = \frac{nJ}{a}, \tag{A.10}$$

onde $n = 1$ para a rede cúbica simples (SC, “*simple cubic*”), $n = 2$ para rede cúbica de corpo centrado (BCC, “*body-centered cubic*”) e $n = 4$ para a rede cúbica de face centrada (FCC, “*face-centered cubic*”). O parâmetro n nada mais é do que o número de sub-redes cúbicas simples que são necessárias para gerar as outras redes (123).

Denominado **dureza da constante de troca** (“*exchange stiffness constant*”), ou simplesmente constante de “stiffness”, a constante A é a constante fundamental para descrever um material ferromagnético, sendo intrínseca a ele e determinada experimentalmente. A constante J , depende da natureza magnética do material através de A , do tipo de rede n e do parâmetro de rede a . É fácil ver na equação (A.10) que o parâmetro A é positivo e tem dimensão de energia por comprimento. A constante A representa a intensidade do acoplamento magnético, medindo a dificuldade de um dado momento magnético desviar-se da direção do campo de troca local (123).

Há uma forma mais conveniente de expressar o resultado da equação (A.9) utilizando uma particular identidade vetorial. Partindo do fato que $\hat{m} \cdot \hat{m} = 1$, equação (2.20), tomamos o laplaciano nos dois membros desta equação para obter

$$\nabla^2(\hat{m} \cdot \hat{m}) = 0. \quad (\text{A.11})$$

Usando uma notação compacta, podemos escrever (A.11) em componentes na forma:

$$\partial_i \partial_i (m_j m_j) = 0;$$

$$\partial_i [\partial_i m_j m_j] = 0;$$

$$\partial_i [(\partial_i m_j) m_j + m_j (\partial_i m_j)] = 0;$$

$$2 \partial_i [(\partial_i m_j) m_j] = 0;$$

$$\partial_i [(\partial_i m_j) m_j] = 0;$$

$$(\partial_i \partial_i m_j) m_j + (\partial_i m_j) (\partial_i m_j) = 0;$$

$$(\nabla^2 m_j) m_j + (\vec{\nabla} m_j) \cdot (\vec{\nabla} m_j) = 0,$$

que resulta em

$$-\hat{m} \cdot \nabla^2 \hat{m} = \sum_{j=1}^3 |\vec{\nabla} m_j|^2. \quad (\text{A.12})$$

Dessa forma, podemos reescrever a expressão (A.9) como

$$E_{tr} = A \int_V \sum_{j=1}^3 |\vec{\nabla} m_j|^2 dv = A \int_V (|\vec{\nabla} m^x|^2 + |\vec{\nabla} m^y|^2 + |\vec{\nabla} m^z|^2) dv \quad (\text{A.13})$$

O resultado expresso no último membro da equação (A.13) mostra que a energia de troca é proporcional ao módulo quadrado do gradiente da magnetização. Isso significa que o termo de troca mede a não-uniformidade da magnetização (123). Se, por exemplo, a magnetização for perfeitamente uniforme a energia de troca será nula.

Embora a expressão da constante de “stiffness” A dada na equação (A.10) contabilize a contribuição de redes cristalográficas comuns, será interessante discutirmos aqui seu valor para uma rede particionada em células cúbicas como as da aproximação micromagnética, discutida na seção (3.3). A renormalização das constantes de interação faz-se necessária vista a mudança de escala imposta pela aproximação, a começar pela constante de acoplamento de troca.

Seguindo um procedimento análogo ao das referências (114, 129), podemos contabilizar para o momento magnético da célula localizada na origem, $\hat{m}(\vec{0})$, a energia entre seus primeiros vizinhos, que por simetria quadrada simples, são seis e estão localizados nas posições $\pm a\hat{x}$, $\pm a\hat{y}$ e $\pm a\hat{z}$.

O método de diferenças finitas permite avaliar os gradientes expressos na equação (A.13) para essa situação simplificada. Considerando apenas os três vizinhos situados nas posições cartesianas positivas, a fim de evitar a dupla contagem que surgirá ao analisar a interação de cada vizinho com a célula na origem e desprezando os termos de ordem superior

temos a energia de troca dessa célula dada por

$$E_{tr}^{cel} = A a^3 \left(\left| \frac{\hat{m}(a\hat{x}) - \vec{m}(\vec{0})}{a} \right|^2 + \left| \frac{\hat{m}(a\hat{y}) - \hat{m}(\vec{0})}{a} \right|^2 + \left| \frac{\hat{m}(a\hat{z}) - \vec{m}(\vec{0})}{a} \right|^2 \right). \quad (\text{A.14})$$

Expandido cada termo e reagrupando temos

$$E_{tr}^{cel} = Aa \left[|\hat{m}(a\hat{x})|^2 + |\hat{m}(a\hat{y})|^2 + |\hat{m}(a\hat{z})|^2 + 3 |\hat{m}(\vec{0})|^2 - 2\hat{m}(\vec{0}) \cdot \{\hat{m}(a\hat{x}) + \hat{m}(a\hat{y}) + \hat{m}(a\hat{z})\} \right].$$

Avaliando os produtos escalares entre os unitários, permite-nos escrever a expressão simplificada

$$E_{tr}^{cel} = 2Aa \left[3 - \hat{m}(\vec{0}) \cdot \{\hat{m}(a\hat{x}) + \hat{m}(a\hat{y}) + \hat{m}(a\hat{z})\} \right]. \quad (\text{A.15})$$

A expressão para a energia de troca entre uma célula e seus primeiros vizinhos. Uma vez que o primeiro termo entre colchetes é uma constante, tal expressão demonstra que a constante de acoplamento efetiva J da interação de troca a ser considerada nos cálculos sob o ponto de vista micromagnético é

$$J = 2Aa. \quad (\text{A.16})$$

Uma vez que simulamos um material conhecido na literatura, o valor correspondente de A pode ser obtido de tabelas.

APÊNDICE B – Anisotropia de Forma

Ao estudarmos as propriedades de nanoilhas ferromagnéticas de permalloy, que é um ferromagneto macio, ou seja, com anisotropia magnetocristalina desprezível, o entendimento da anisotropia de forma é fundamental. Tal anisotropia, originária da interação entre os momentos de dipolo magnético do material, manifesta-se em amostras finitas e define as configurações magnéticas do sistema em função da forma geométrica da nanoilha estudada.

Neste apêndice, apresentamos um desenvolvimento para a anisotropia de forma considerando partículas na forma de um elipsóide e alguns sistemas que podem ser considerados como casos limites dessa geometria. Embora desenvolvimentos similares possam ser encontrados na literatura, como nas referências (114, 123, 133), um melhor entendimento sobre o efeito da anisotropia de forma é imprescindível em nosso trabalho. Tanto para efeito de comparação, que permite verificar a validade de nossas observações numéricas, quanto no intuito de tornar esta tese uma referência um pouco mais completa sobre o assunto.

Conforme discutido na seção 2.3, a energia magnetostática E_{ms} é dada pela energia de interação entre a magnetização e o campo magnético criado por ela mesma e escrita como (equação 2.30):

$$E_{ms} = -\frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{M} \cdot \vec{H} \, dv, \quad (\text{B.1})$$

onde a integral é realizada sobre o volume V do sistema considerado.

Pode-se deduzir uma expressão alternativa para a energia magnetostática considerando a integral

$$\frac{\mu_0}{2} \int_{\text{todo espaço}} \vec{H} \cdot \vec{H} \, dv = \frac{\mu_0}{2} \int_{\text{todo espaço}} \left(\frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M} \right) \cdot \vec{H} \, dv = -\frac{\mu_0}{2} \int_{\text{todo espaço}} \vec{M} \cdot \vec{H} \, dv, \quad (\text{B.2})$$

onde primeiro substituímos $\vec{H} = \left(\frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M} \right)$ (equação 2.7) e usamos que $\int_{\text{todo espaço}} \vec{B} \cdot \vec{H} \, dv = 0$. Tal condição é satisfeita sempre que um dos campos for irrotacional ($\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{0}$) e o outro for solenoidal ($\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$) (114).

Como $\vec{M} \neq \vec{0}$ apenas dentro do volume V da amostra considerada, pode-se expressar a **energia magnetostática** pelas duas formas equivalentes

$$E_{ms} = -\frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{M} \cdot \vec{H} \, dv \quad (\text{B.3a})$$

ou

$$E_{ms} = \frac{\mu_0}{2} \int_{\text{todo espaço}} \vec{H} \cdot \vec{H} \, dv. \quad (\text{B.3b})$$

Embora sejam equivalentes, a primeira igualdade na equação (B.3) é a mais usada no cálculo da E_{ms} , uma vez que a integral é tomada apenas sobre o volume da amostra. Por outro lado, a segunda igualdade na equação (B.3) esclarece melhor o conceito de energia magnetostática. Uma vez que $\vec{H} \cdot \vec{H} = |\vec{H}|^2 \geq 0$, pode-se concluir que a energia magnetostática nunca assume valores negativos. Além disso, pode-se escrever as equações da magnetostática em termos de \vec{H} na forma (111)

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{0} \quad (\text{B.4a})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = \rho_M \quad (\text{B.4b})$$

onde $\rho_M = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M}$ é a densidade volumétrica de carga magnética. Nessa formulação, o campo magnético \vec{H} pode ser obtido a partir do potencial escalar magnético Φ na forma

$$\vec{H} = -\vec{\nabla} \Phi, \quad (\text{B.5})$$

de forma que a equação (B.4a) seja automaticamente satisfeita já que o rotacional do gradiente de um campo escalar qualquer ψ é zero ($\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \psi) = \vec{0}$, (118)). Em um material ferromagnético duro com dimensões finitas, \vec{M} sofre variações abruptas na superfície, já que $\vec{M} = 0$ fora do material. Considerando que \vec{M} seja descontínua na superfície do material, o potencial

escalar Φ pode ser calculado por (111)

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_V dv' \frac{\rho_M(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \frac{1}{4\pi} \oint_S da' \frac{\sigma_M(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (\text{B.6})$$

onde a primeira integral é calculada sobre o volume V , e a segunda é calculada sobre a superfície S que delimita a amostra considerada. $\sigma_M = \vec{M} \cdot \hat{n}$ é a densidade superficial de carga magnética e \hat{n} é o vetor unitário normal ao elemento de área local e aponta de dentro para fora do material.

Podemos concluir então que a energia magnetostática é mínima ($E_{ms} = 0$) quando σ_M e ρ_M são simultaneamente nulos, ou seja, quando a amostra não possui excesso de carga magnética, não apresentando pólos magnéticos resultantes. Esta situação especial é ilustrada em exemplos na figura (B.1).

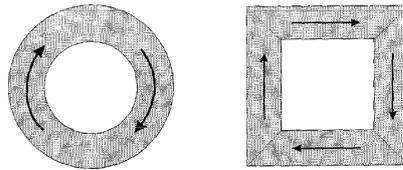


Figura B.1 – Dois exemplos de objetos magnetizados em que a configuração magnética resulta em uma energia magnetostática nula. Em função das geometrias cíclicas, não há excesso de carga magnética e assim não há formação de pólos magnéticos, resultando num campo desmagnetizante nulo. Figura adaptada da referência (133).

No entanto, o nosso objeto de estudo, nanoilhas elípticas planas, não se enquadram na descrição simples em que σ_M e ρ_M são simultaneamente nulos. Ao invés disso, há neste tipo de partícula uma energia magnetostática efetiva que é minimizada pela configuração de magnetização da nanoilha, configurando literalmente o efeito da anisotropia de forma.

Para o caso de partículas elipsoidais ou casos limites da mesma, como em nosso modelo, é possível calcular a energia magnetostática em alguns casos, considerando que o campo desmagnetizante seja uniforme ao longo da amostra (123). Sem campo magnético externo aplicado ($\vec{B} = 0$), o campo desmagnetizante \vec{H} é dado em função da magnetização \vec{M} do elipsoide por

$$\vec{H} = -\mathbf{N}_d \vec{M}, \quad (\text{B.7})$$

onde \mathbf{N}_d é o tensor desmagnetizante, que depende da forma geométrica do sistema em questão.

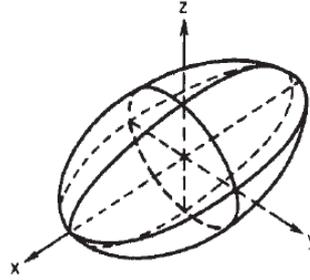


Figura B.2 – Elipsoide com eixos principais coincidentes com os eixos cartesianos x , y e z . Figura disponível em: <http://www.megapeliculasonline.net/ff/Elipsoide>

Considerando um elipsóide em que seus eixos principais coincidem com os eixos cartesianos x , y e z , como ilustrado na figura (B.2), o tensor desmagnetizante \mathbf{N}_d é diagonal e pode ser escrito em termos dos fatores desmagnetizantes N_i ao longo de cada direção x , y e z , na forma

$$\mathbf{N}_d = \begin{bmatrix} N_x & 0 & 0 \\ 0 & N_y & 0 \\ 0 & 0 & N_z \end{bmatrix}. \quad (\text{B.8})$$

Adotando o Sistema Internacional de Unidades (SI), este tensor diagonal (B.8) tem traço 1, ou seja

$$N_x + N_y + N_z = 1.$$

Podemos agora calcular a energia magnetostática para o elipsoide usando o campo desmagnetizante dado pela expressão (B.7), através da equação (B.3a). É fácil mostrar que o resultado pode ser expresso em termos das componentes M_i da magnetização e dos fatores desmagnetizantes N_i pela expressão

$$E_{ms}^{\text{Elipsoide}} = \frac{\mu_0 V}{2} (N_x M_x^2 + N_y M_y^2 + N_z M_z^2). \quad (\text{B.9})$$

Supondo que a magnetização do elipsoide esteja orientada em uma direção arbitrária,

podemos decompô-la em suas respectivas coordenadas cartesianas

$$M_x = M \sin \theta \cos \varphi = M \alpha_x, \quad (\text{B.10a})$$

$$M_y = M \sin \theta \sin \varphi = M \alpha_y, \quad (\text{B.10b})$$

$$M_z = M \cos \theta = M \alpha_z. \quad (\text{B.10c})$$

Podemos escrever então $\vec{M} = M \hat{\alpha}$, onde M é o módulo da magnetização do elipsoide e a direção $\hat{\alpha} = \alpha_x \hat{i} + \alpha_y \hat{j} + \alpha_z \hat{k}$ é definida pelos versores cartesianos e pelos cossenos diretores da magnetização α_i , definidos nas relações (B.10). Como $\hat{\alpha} \cdot \hat{\alpha} = 1$, os cossenos diretores satisfazem a relação

$$\alpha_x^2 + \alpha_y^2 + \alpha_z^2 = 1. \quad (\text{B.11})$$

Podemos então reescrever a energia magnetostática do elipsoide dada na equação (B.9) pela forma mais conveniente

$$E_{ms}^{\text{Elipsoide}} = \frac{\mu_0 V M^2}{2} (N_x \alpha_x^2 + N_y \alpha_y^2 + N_z \alpha_z^2). \quad (\text{B.12})$$

A expressão (B.12) é escrita como uma constante com unidades de energia, em nosso caso “joules” ($[J]$), vezes um termo adimensional que depende da forma geométrica e da direção da magnetização do elipsoide. Tal expressão permite o cálculo direto da energia magnetostática de elipsoides magnetizados, se conhecermos os respectivos fatores desmagnetizantes e a magnetização, o que nem sempre é simples.

Começando pelo exemplo mais simples, podemos calcular a energia magnetostática de uma esfera uniformemente magnetizada. Evidentemente, uma esfera corresponde a um elipsoide com os três eixos iguais, logo $N_x = N_y = N_z$. Lembrando que o traço de \mathbf{N}_d é igual a 1, a única solução possível é $N_x = N_y = N_z = \frac{1}{3}$. De posse dos fatores desmagnetizantes e usando o vínculo entre os cossenos diretores expresso na equação (B.11), é fácil mostrar que a equação (B.12) dá a energia magnetostática para uma esfera de volume V e magnetização uniforme de módulo M na forma simples

$$E_{ms}^{\text{Esfera}} = \frac{\mu_0 V M^2}{6}. \quad (\text{B.13})$$

O resultado da energia magnetostática para a esfera revela um comportamento isotrópico porque todas as direções são energeticamente equivalentes. Em outras palavras, dado a simetria da esfera, a energia magnetostática independe da direção da magnetização, ou seja, a anisotropia de forma não define uma direção preferencial para a magnetização da esfera.

O cálculo de \mathbf{N}_d para um elipsoide qualquer, ou seja, com os três eixos diferentes não é tarefa simples. Uma orientação para o cálculo dos fatores desmagnetizantes para um elipsoide qualquer é dada na referência (123). No entanto, as geometrias mais investigadas podem ser modeladas por **esferoides**, forma geométrica que possui dois eixos iguais e o terceiro eixo é um eixo de simetria rotacional.

Ao passo que a esfera, em que o tensor desmagnetizante tem 3 autovalores degenerados, e o elipsoide genérico que não apresenta degenerescência ($N_x \neq N_y \neq N_z$), o esferoide apresenta uma dupla degenerescência, ou seja, dos três autovalores dois são iguais. Nessa forma geométrica teremos os fatores desmagnetizantes: N_{\parallel} paralelo ao eixo de simetria, e dois N_{\perp} perpendiculares a ele. Lembrando novamente que o tensor desmagnetizante tem traço unitário, pode-se escrever

$$N_{\parallel} + 2N_{\perp} = 1. \quad (\text{B.14})$$

Existem expressões analíticas para os fatores desmagnetizantes de esferoides em função da razão de aspecto α ¹, definida por $\alpha = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}}$, onde r_{\parallel} é o tamanho do eixo paralelo e r_{\perp} é o tamanho dos eixos perpendiculares ao eixo de simetria. Quando o eixo de simetria é o eixo maior do elipsoide este é chamado de **esferoide prolato** ($\alpha > 1$), usualmente conhecido por esferoide “charuto”. Se por outro lado, o eixo de simetria coincide com o eixo menor do elipsoide este é chamado de **esferoide oblato** ($\alpha < 1$), usualmente intitulado esferoide tipo disco. A figura (B.3) ilustra estas duas formas considerando o eixo de simetria como o eixo z . Vale salientar que a esfera delimita a fronteira entre essas duas formas geométricas.

¹ Não confundir com a razão de aspecto q discutida no capítulo 4.

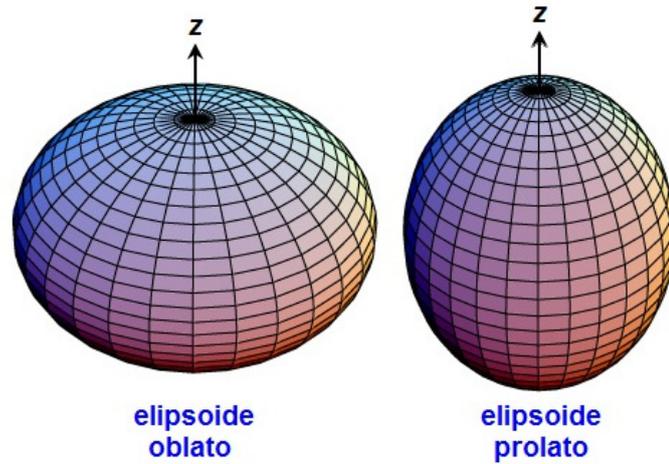


Figura B.3 – Esferoides com eixo de simetria ao longo de z , nas situações em que $\alpha < 1 \rightarrow$ **esferoide oblato** e $\alpha > 1 \rightarrow$ **esferoide prolato**. Figura disponível em: <http://la-mecanica-cuantica.blogspot.com.br/2009/08/el-momento-de-cuadripolo.html>

Para um esferoide, a expressão para o fator desmagnetizante na direção paralela ao eixo de simetria, em função de α N_{\parallel} é dada, para o esferoide oblato por (133):

$$N_{\parallel}^{\text{oblato}} = \frac{1}{1 - \alpha^2} \left[1 - \frac{\alpha}{\sqrt{1 - \alpha^2}} \arcsin(\sqrt{1 - \alpha^2}) \right], \quad \alpha < 1, \quad (\text{B.15})$$

e para o esferoide prolato por

$$N_{\parallel}^{\text{prolato}} = \frac{1}{\alpha^2 - 1} \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 - 1}} \ln(\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 1}) - 1 \right], \quad \alpha > 1. \quad (\text{B.16})$$

Os fatores idênticos N_{\perp} podem ser obtidos pela relação (B.14).

Vale observar que os fatores desmagnetizantes, e conseqüentemente o campo desmagnetizante, dados por (B.15) e (B.16), dependem da forma geométrica do material (α) mas não das dimensões absolutas. Assim, se variamos o tamanho do esferoide preservando a razão α o campo desmagnetizante permanecerá inalterado.

Considerando o eixo z como o eixo de simetria de rotação do elipsoide, situação ilustrada na figura (B.3), temos: $N_z = N_{\parallel}$ e $N_x = N_y = N_{\perp}$, permitindo escrever o tensor desmagne-

tizante na forma

$$\mathbf{N}_d = \begin{bmatrix} N_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & N_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & N_{\parallel} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.17})$$

Assim, substituindo os fatores desmagnetizantes na forma do tensor (B.17) e as formas explícitas dos cossenos diretores α_i definidos nas relações (B.10), é fácil mostrar que a equação (B.12) nos dá a expressão da energia magnetostática para um esferoide (prolato ou oblato) na forma

$$E_{ms}^{\text{esferoide}} = \frac{\mu_0 V M^2}{2} [N_{\perp} \sin^2 \theta + N_{\parallel} \cos^2 \theta]. \quad (\text{B.18})$$

Vale ressaltar, que devido às considerações que nos levam à equação (B.18), θ é o ângulo entre a magnetização da amostra e o eixo de simetria z .

Podemos agora considerar dois casos limites da forma esferoide bastante interessantes do ponto de vista prático, pois levam a formas de nanomagnetos muito pesquisados atualmente: fios e filmes finos. O caso do filme fino é especialmente útil na avaliação qualitativa dos nossos resultados para nanoilhas finas.

Um fio, que corresponde a um cilindro com grande comprimento, é o caso limite de um esferoide prolato, com eixos ao longo de x e y perpendiculares ao eixo de simetria, dados por r_{\perp} , e com o eixo r_{\parallel} ao longo de z . Avaliar o limite em que o esferoide se torna um fio, implica em considerar

$$\alpha = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} \longrightarrow \infty.$$

Nesse limite, a equação (B.16) mostra que $N_{\parallel} = N_z = 0$. Mais uma vez, como o traço do tensor desmagnetizante é unitário, é fácil perceber que $N_{\perp} = N_x = N_y = \frac{1}{2}$. Substituindo tais valores na equação (B.18), obtemos a energia magnetostática para um fio na forma

$$E_{ms}^{\text{Fio}} = \frac{\mu_0 V M^2}{2} \sin^2 \theta. \quad (\text{B.19})$$

Este resultado mostra que a energia magnetostática do fio é mínima em $\theta = 0$ ou $\theta = \pi$,

revelando que nesta geometria a anisotropia de forma favorece a direção de magnetização ao longo do comprimento do fio, ou seja, o eixo de simetria é o eixo fácil de magnetização. Este resultado é comprovado por diversas observações experimentais e cálculos numéricos.

Um filme fino, que corresponde a um cilindro de pequena espessura e grande área, é o caso limite de um esferoide oblato. Neste, os eixos ao longo de x e y , perpendiculares ao eixo de simetria e de dimensões r_{\perp} , são muito maiores que o eixo r_{\parallel} ao longo de z . Isso implica em considerar

$$\alpha = \frac{r_{\parallel}}{r_{\perp}} \longrightarrow 0.$$

Nesse limite, a equação (B.15) mostra que $N_{\parallel} = N_z = 1$. Novamente, como o traço do tensor desmagnetizante é unitário, deduz-se que $N_{\perp} = N_x = N_y = 0$. Para tais valores, a equação (B.18) mostra que energia magnetostática para um filme fino pode ser expressa pela relação

$$E_{ms}^{\text{Filme}} = \frac{\mu_0 V M^2}{2} \cos^2 \theta. \quad (\text{B.20})$$

Este resultado mostra que a energia magnetostática do filme é mínima em $\theta = \frac{\pi}{2}$. Isso significa que nesta geometria plana a anisotropia de forma confina a magnetização no plano do filme, sendo qualquer direção no plano equivalente, dado a simetria circular que se origina do esferoide oblato. Tal efeito configura uma anisotropia de forma que induz um plano fácil de magnetização, o plano do filme.

Tais resultados teóricos predizem e comprovam qualitativamente o que observamos em nossos cálculos numéricos para nanoilhas finas alongadas de material magnético macio (permalloy), ou seja, nanoilhas em que $L_x \approx L_y \gg e$, veja a figura (4.1). A situação geométrica similar ao filme ($L_x \approx L_y \gg e$) cria uma anisotropia de forma que confina a magnetização no plano da nanoilha. Por outro lado, conforme visto no capítulo 4, a partir de uma diferença mínima nas dimensões planares na forma $L_x > L_y$, a anisotropia de forma induz um eixo fácil de magnetização ao longo de L_x , assim como o caso limite do esferoide prolato. Ficam assim validadas pelas considerações teóricas deste apêndice, nossas respectivas observações numéricas.

APÊNDICE C – Dinâmica de Spins

Consideremos agora a equação de movimento de Heisenberg para o momento angular de spin \vec{S}_n , localizado no sítio n , apresentada na equação (3.2)

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_n}{dt} = [\vec{S}_n, H],$$

onde H é o Hamiltoniano do sistema, $i^2 = -1$ é a unidade imaginária e $[\vec{S}_n, H] = \vec{S}_n H - H \vec{S}_n$ é o comutador entre o operador de spin \vec{S}_n e o hamiltoniano H . Tal equação será desenvolvida para cada componente cartesiana de \vec{S}_n . Por conveniência dos cálculos, alteramos por ora o índice do sítio considerado na evolução de $i \rightarrow n$.

O Hamiltoniano do modelo, equação (3.1), pode ser reescrito em termos do momento angular de spin \vec{S} . Usando as relações (2.5), (2.14), a igualdade (2.17) e as equações da seção (2.4) podemos escrever nosso hamiltoniano de interação na forma

$$H = -\frac{J}{2S^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{D}{2S^2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 3(\vec{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] + \gamma \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \vec{B}^{ext}, \quad (C.1)$$

ou em uma forma similar à interação Zeeman

$$H = -\frac{\gamma}{2} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \left\{ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{J}{\gamma S^2} \vec{S}_j \right\} + \frac{\gamma}{2} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \left\{ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{D}{\gamma S^2} \left[\frac{\vec{S}_j - 3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\} + \gamma \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \cdot \{ \vec{B}^{ext} \}. \quad (C.2)$$

onde os termos entre chaves são respectivamente: o campo efetivo de troca

$$B_n^{tr} = \sum_{j=1}^N \frac{J}{\gamma S^2} \vec{S}_j; \quad (C.3)$$

no sítio n , o campo efetivo dipolar

$$\vec{B}_n^{dip} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{D}{\gamma S^2} \left[\frac{\vec{S}_j - 3\hat{r}_{ij}(\vec{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right]; \quad (C.4)$$

no sítio n e \vec{B}^{ext} o campo externo aplicado, igual em todos os sítios. Evidentemente,

$$H = H_{tr} + H_{dip} + H_{ext}. \quad (C.5)$$

O comutador expresso na equação (3.2) pode ser escrito em componentes x , y e z através da notação compacta $\{\eta = x, y, z\}$ na forma

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dS_n^\eta}{dt} &= [S_n^\eta, H] \\ &= [S_n^\eta, (H_{tr} + H_{dip} + H_{ext})] \\ &= [S_n^\eta, H_{tr}] + [S_n^\eta, H_{dip}] + [S_n^\eta, H_{ext}]. \end{aligned} \quad (C.6)$$

O primeiro dos três comutadores na relação (C.6) pode ser escrito na forma explícita se usarmos a expressão (C.1)

$$[S_n^\eta, H_{tr}] = \left[S_n^\eta, -\frac{J}{2S^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right] = -\frac{J}{2S^2} \sum_{\langle i,j \rangle} [S_n^\eta, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j]. \quad (C.7)$$

As regras de comutação para as componentes do momento angular são conhecidas (120) e dadas por

$$[S_n^a, S_m^b] = i\hbar \epsilon^{abc} \delta_{mn} S_m^c, \quad (C.8)$$

onde os índices superiores referem-se as componentes de \vec{S} , no caso x , y e z , e os inferiores aos

sítios, no nosso caso n, i ou j . ε^{abc} é a função anti-simétrica de “Levi-Civita”, definida como

$$\varepsilon^{abc} = \begin{cases} 1, & \text{para } abc \text{ em ordem cíclica positiva;} \\ 0, & \text{quando dois ou mais índices são repetidos;} \\ -1, & \text{para } abc \text{ em ordem cíclica negativa,} \end{cases} \quad (\text{C.9})$$

e δ_{mn} é a função delta de “Kronecker” definida como

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & \text{se } m = n; \\ 0, & \text{se } m \neq n. \end{cases} \quad (\text{C.10})$$

Podemos então calcular o comutador da equação (C.7), supondo $\eta = x$ teremos

$$\begin{aligned} [S_n^x, H_{tr}] &= -\frac{J}{2S^2} \sum_{\langle i,j \rangle} [S_n^x, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j]; \\ &= -\frac{J}{2S^2} \sum_{\langle i,j \rangle} [S_n^x, (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z)]; \\ &= -\frac{J}{2S^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left([S_n^x, S_i^x S_j^x] + [S_n^x, S_i^y S_j^y] + [S_n^x, S_i^z S_j^z] \right); \\ &= -\frac{J}{2S^2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S_i^y [S_n^x, S_j^y] + [S_n^x, S_i^y] S_j^y + S_i^z [S_n^x, S_j^z] + [S_n^x, S_i^z] S_j^z \right); \\ &= -\frac{iJ\hbar}{2S} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\delta_{nj} S_i^y S_j^z + \delta_{ni} S_i^z S_j^y - \delta_{nj} S_i^z S_j^y - \delta_{ni} S_i^y S_j^z \right); \\ &= -\frac{iJ\hbar}{2S} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{nj} \left(S_i^y S_j^z - S_i^z S_j^y \right) - \frac{iJ\hbar}{2S} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{ni} \left(S_i^z S_j^y - S_i^y S_j^z \right); \\ &= -\frac{iJ\hbar}{2S} \sum_i \left(S_i^y S_n^z - S_i^z S_n^y \right) - \frac{iJ\hbar}{2S} \sum_j \left(S_n^z S_j^y - S_n^y S_j^z \right). \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

Nesta simplificação com termos de somatórios independentes, os índices i e j podem ser substituídos por um índice geral k e assim obtemos

$$\begin{aligned} [S_n^x, H_{tr}] &= -\frac{iJ\hbar}{2S} \sum_k \left(S_k^y S_n^z - S_k^z S_n^y \right) - \frac{iJ}{2\hbar} \sum_k \left(S_n^z S_k^y - S_n^y S_k^z \right) \\ &= -\frac{iJ\hbar}{2S} \sum_k \left(S_k^y S_n^z - S_k^z S_n^y + S_n^z S_k^y - S_n^y S_k^z \right) \\ &= -\frac{iJ\hbar}{2S} \sum_k \left(S_k^y S_n^z + S_n^z S_k^y \right) + \frac{iJ}{2\hbar} \sum_k \left(S_k^z S_n^y + S_n^y S_k^z \right). \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

Os parênteses na equação (C.12) representam anti-comutadores $\{A, B\} = AB + BA = \{B, A\}$.

Isso permite-nos reescrever (C.12) na forma reduzida

$$[S_n^x, H_{tr}] = \frac{iJ\hbar}{2S} \sum_{\substack{k \\ k \neq n}}^N (\{S_n^y, S_k^z\} - \{S_n^z, S_k^y\}) . \quad (C.13)$$

O resultado acima pode ser generalizado para as demais componentes, através da função de Levi-Civita ϵ^{abc}

$$[S_n^a, H_{tr}] = \frac{iJ\hbar}{2S} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \epsilon^{abc} \{S_n^b, S_k^c\} . \quad (C.14)$$

Dada a relação de comutação (C.8) e como $n \neq k$ temos que $[S_n^b, S_k^c] = 0$. Isso implica em $S_n^b S_k^c - S_k^c S_n^b = 0$ ou ainda $S_n^b S_k^c = S_k^c S_n^b$. Além disso a definição de anti-comutadores permite escrever $\{S_n^b, S_k^c\} = S_n^b S_k^c + S_k^c S_n^b = 2S_n^b S_k^c$.

Dessa forma podemos reescrever (C.13) na forma

$$\begin{aligned} [S_n^x, H_{tr}] &= \frac{iJ\hbar}{2S} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \epsilon^{abc} 2S_n^b S_k^c \\ &= \frac{iJ\hbar}{2S} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \epsilon^{abc} S_n^b S_k^c \\ &= i\hbar\gamma \sum_{b=1}^3 \sum_{c=1}^3 \epsilon^{abc} S_n^b \left\{ \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \frac{J}{\gamma S^2} S_k^c \right\} , \end{aligned} \quad (C.15)$$

ou ainda, na forma vetorial,

$$[\vec{S}_n, H_{tr}] = i\hbar\gamma \vec{S}_n \times \left\{ \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^N \frac{J}{\gamma S^2} \vec{S}_k \right\} . \quad (C.16)$$

A comparação direta do termo entre chaves com a equação (C.3) mostra que ele representa um campo de troca gerado pelos spins vizinhos ao sítio n , permitindo escrever a forma elegante

$$[\vec{S}_n, H_{tr}] = i\hbar\gamma \vec{S}_n \times \vec{B}_n^{tr} . \quad (C.17)$$

Procedimentos análogos mais trabalhosos para o termo hamiltoniano da interação di-

polar, e mais simples para o termo da interação Zeeman (134, 135), permitem escrever,

$$[\vec{S}_n, H_{dip}] = i\hbar\gamma \vec{S}_n \times \vec{B}_n^{dip}. \quad (\text{C.18})$$

e

$$[\vec{S}_n, H_{ext}] = i\hbar\gamma \vec{S}_n \times \vec{B}_n^{ext}, \quad (\text{C.19})$$

Finalmente, levando as equações C.17, C.18 e C.19 na equação de Heisenberg para as componentes C.6, podemos escrever

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_n}{dt} = [\vec{S}_n, H] = i\hbar\gamma \vec{S}_n \times (\vec{B}_n^{tr} + \vec{B}_n^{dip} + \vec{B}_n^{ext}), \quad (\text{C.20})$$

e na forma compacta de interesse

$$\frac{d\vec{S}_n}{dt} = \gamma \vec{S}_n \times \vec{B}_n. \quad (\text{C.21})$$

A equação de movimento (C.21) para o momento angular de spin \vec{S} é a generalização na representação de Heisenberg da equação de precessão clássica de Larmor. Essa expressão prevê a precessão do momento angular de spin \vec{S} em torno do campo \vec{B} sem amortecimento, que no nosso caso representa o campo efetico local, incluindo as contribuições de troca, dipolar e do campo externo aplicado.

APÊNDICE D – Método de Integração Numérica da Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert

O tratamento matemático de sistemas de muitas partículas são usuais nas pesquisas em Física e geralmente implicam na solução de sistemas de equações diferenciais não-lineares, sem solução analítica simples. Usualmente tais equações são integradas computacionalmente através de métodos numéricos bem conhecidos na literatura (136, 137). No nosso caso, a equação ser integrada é a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (seção 3.2), que é uma equação diferencial de ordem 1. Utilizamos neste trabalho dois métodos simultâneos: o método de Runge-Kutta de 4^a ordem foi usado como método de partida na determinação das configurações iniciais e um método preditor-corretor de 4^a ordem no resto da simulação, a fim de ganhar tempo computacional. A seguir descreveremos tais métodos em linhas gerais.

A fim de apresentar a relação de recorrência numérica que os métodos de 4^a ordem nos fornecem na evolução temporal da função considerada de forma mais didática e sem precisar realizar um dedução formal e longa, vamos começar analisando o caso simples de uma função $y(x)$. Buscamos uma forma de resolver uma equação diferencial da forma

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad (\text{D.1})$$

em que conhecemos $f(x, y)$. Na prática, queremos a solução $y(x)$ numericamente, que significa calcular $y_1 = y(x_0 + \delta x)$, $y_2 = y(x_0 + 2\delta x)$, etc, a partir do conhecimento de $f(x, y)$ e da condição inicial, ou seja, $f(x_0, y_0)$, para valores pequenos mas finitos de δx .

Uma aproximação de 1^a ordem para $f(x_0, y_0)$ permite escrever diretamente

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_0, y_0} = f(x_0, y_0) \approx \frac{y(x_0 + \delta x) - y(x_0)}{\delta x} = \frac{y_1 - y_0}{\delta x}$$

ou seja,

$$y_1 = y_0 + f(x_0, y_0) \delta x, \quad y_2 = y_1 + f(x_1, y_1) \delta x, \dots$$

que leva à relação de recorrência

$$y_{n+1} = y_n + f(x_n, y_n) \delta x, \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots). \quad (\text{D.2})$$

No entanto, y_1 é apenas uma estimativa e $f(x_1, y_1)$ é a estimativa da derivada neste ponto estimado. Ou seja, seguimos acumulando erros a cada passo e dessa forma é preciso usar métodos cuja ordem de grandeza dos erros seja menor. Este método é conhecido por Método de Euler e a representação gráfica do método e da estimativa que ele representa estão ilustrados na figura (D.1 (a)).

Formalmente, o método de Euler representa apenas o primeiro termo ¹ da solução em série de Taylor da equação (D.1). Assim, este é um método de ordem δx e erros da ordem δx^2 . Podemos diminuir a ordem de grandeza dos erros se levarmos em conta a variação da derivada em cada intervalo δx . Pode-se fazer isso considerando a derivada no ponto central do intervalo ou usando a média entre as derivadas no ponto inicial e final do intervalo. Levar em conta essa variação da tangente significa truncar a série de Taylor da solução após o termo quadrático, o que melhora a estimativa, resultando em métodos de ordem δx^2 .

Considerando a derivada no ponto intermediário $x_{med} = x_0 + \frac{\delta x}{2}$ ao invés de no ponto inicial x_0 , e assim calculamos $y_{med} = y_0 + f(x_0, y_0) \frac{\delta x}{2}$ pelo método de Euler. Dessa forma, o passo de integração é dado levando em conta a derivada no ponto médio do intervalo, na forma

$$y_1 = y_0 + f(x_{med}, y_{med}) \delta x,$$

¹ Termo de ordem 1.

que leva à relação

$$y_{n+1} = y_n + f(x_{n+\frac{1}{2}}, y_{n+\frac{1}{2}}) \delta x, \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots). \quad (\text{D.3})$$

Este método é conhecido por método do Ponto Central ou **Método de Euler Modificado**, e está ilustrado graficamente na figura (D.1 (b)).

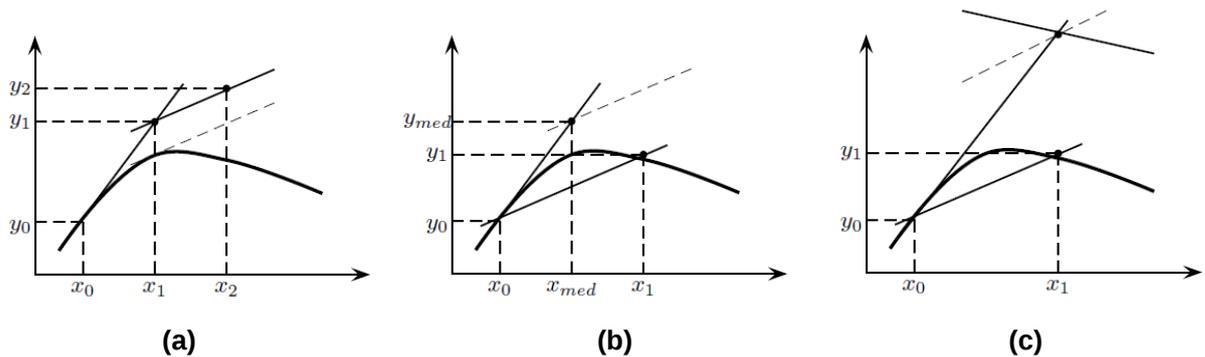


Figura D.1 – Representação gráfica das estimativas fornecidas pelos métodos de Euler para o primeiro passo de integração numérica da equação (D.1). (a) Método de Euler simples. (b) Método do Ponto Central ou Método de Euler Modificado. (c) Método de Euler Aperfeiçoado.

Pode-se também usar a média das derivadas no ponto inicial e final do intervalo. Primeiro, usando o método de Euler simples, estimamos $y_1 \approx y_0 + f(x_0, y_0) \delta x$, que nos permite calcular $f_1 = f(x_1, y_1)$. Assim, recalculamos y_1 pela média das inclinações da função em x_0 (f_0) e em x_1 (f_1), na forma

$$y_1 = y_0 + \frac{f_0 + f_1}{2} \delta x,$$

que leva à recorrência

$$y_{n+1} = y_n + \frac{f_n + f_{n+1}}{2} \delta x. \quad (\text{D.4})$$

Este último método, expresso na equação (D.4), é conhecido por **Método de Euler Aperfeiçoado**, e está ilustrado graficamente na figura (D.1 (c)). Como se pode perceber na figura (D.1), o refinamento do Método de Euler considerando a média das derivadas no intervalo δx (figura D.1, (b) e (c)), melhora consideravelmente a estimativa de y_1 em relação ao método simples (figura D.1, (a)).

Os métodos simples, ilustrados didaticamente até aqui, mostram que é possível extra-

polarm o valor da função até o próximo ponto pela inclinação média no intervalo entre os pontos. Um método que generaliza estas idéias é conhecido por **Método de “Runge-Kutta”**, baseado na média ponderada das inclinações no intervalo entre y_n e y_{n+1} . Métodos como os de Euler Modificado e de Euler Aperfeiçoado são considerados métodos de Runge-Kutta de segunda ordem, pois cada passo da função inclui termos de ordem δx^2 , limitando o erro do método aos termos de ordem superior.

Como nossos cálculos exigem a evolução de um grande número de passos, usamos em princípio o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Neste método considera-se termos na expansão de até quarta ordem δx^4 , diminuindo ainda mais a ordem de grandeza do erro. A demonstração da expressão de recorrência do método não é difícil, mas longa e irrelevante no momento, haja visto o entendimento fundamental do método que é a estimativa da função através das médias das inclinações no respectivo intervalo de interesse. Assim, o método de Runge-Kutta de quarta ordem é expresso por

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\delta x}{6} (f_n + 2f_{n+1} + 2f_{n+2} + f_{n+3}), \quad (\text{D.5})$$

onde

$$\begin{aligned} f_n &= f(x_n, y_n); \\ f_{n+1} &= f\left(x_n + \frac{\delta x}{2}, y_n + \frac{\delta x}{2} f_n\right); \\ f_{n+2} &= f\left(x_n + \frac{\delta x}{2}, y_n + \frac{\delta x}{2} f_{n+1}\right); \\ f_{n+3} &= f(x_n + \delta x, y_n + \delta x f_{n+2}). \end{aligned}$$

Em nosso caso, precisamos resolver N equações de Landau-Lifshitz-Gilbert, uma para cada momento localizado num sítio i da nanoilha, que resulta em $3N$ equações, considerando uma para cada componente cartesiana de cada momento magnético. Considerando a equação a ser implementada numericamente como a expressa em (3.31), vamos lembrar que ela expressa a evolução temporal do i -ésimo momento, localizado no sítio i e sob o efeito do campo efetivo

local \vec{h}_i . Assim omitimos os índices i por conveniência e podemos ver que ela tem a forma

$$\frac{d\hat{m}}{d\tau} = \vec{f}(\tau, \hat{m}, \vec{h}). \quad (\text{D.6})$$

Podemos representar as componentes do versor \hat{m} como $m^\eta = m^{x,y,z}$, onde $(m^x)^2 + (m^y)^2 + (m^z)^2 = 1$. Assim, a equação para cada momento (D.6) pode ser expressa em três equações, uma para cada componente x , y e z , na forma compacta

$$\frac{dm^\eta}{d\tau} = f^\eta(\tau, \hat{m}, \vec{h}). \quad (\text{D.7})$$

Embora a equação (D.7) tenha uma forma aparentemente mais complicada do que a equação (D.1) por ser escrita explicitamente em termos de três variáveis ($f^\eta(\tau, \hat{m}, \vec{h})$), \vec{h} e \hat{m} são variáveis acopladas, no nosso caso, \vec{h} é determinado pela configuração de todos os N momentos da nanoilha. Conhecendo-se \vec{h} podemos calcular a expressão $f^\eta(\tau, \hat{m}, \vec{h})$ da respectiva configuração, que permite o cálculo da nova configuração de momentos pela resolução das $3N$ equações da forma (D.7). Essa condição cíclica permite a implementação e a generalização do método na forma da equação (D.7).

Em princípio, definimos as $3N$ condições iniciais na forma $\hat{m}(\tau = 0) = \hat{m}_0$, calculamos o campo efetivo dessa configuração, que é o campo efetivo inicial $\vec{h}(\tau = 0) = \vec{h}_0$, e podemos calcular a evolução de cada componente $m_0^\eta \rightarrow m_1^\eta$ no intervalo $[\tau_0, \tau_0 + \delta\tau]$. De forma mais geral, podemos enunciar a expressão do método para a evolução da componente do momento de $m_n^\eta \rightarrow m_{n+1}^\eta$ no intervalo $\delta\tau$ na forma

$$m_{n+1}^\eta = m_n^\eta + \frac{\delta\tau}{6} (f_n^\eta + 2f_{n+1}^\eta + 2f_{n+2}^\eta + f_{n+3}^\eta), \quad (\text{D.8})$$

onde

$$\begin{aligned} f_n^\eta &= f^\eta(\tau_n, \hat{m}_n, \vec{h}_n); \\ f_{n+1}^\eta &= f^\eta\left(\tau_n + \frac{\delta\tau}{2}, \hat{m}_n + \frac{\delta\tau}{2} f_n^\eta, \vec{h}_n + \frac{\delta\tau}{2} f_n^\eta\right); \\ f_{n+2}^\eta &= f^\eta\left(\tau_n + \frac{\delta\tau}{2}, \hat{m}_n + \frac{\delta\tau}{2} f_{n+1}^\eta, \vec{h}_n + \frac{\delta\tau}{2} f_{n+1}^\eta\right); \\ f_{n+3}^\eta &= f^\eta(\tau_n + \delta\tau, \hat{m}_n + \delta\tau f_{n+2}^\eta, \vec{h}_n + \delta\tau f_{n+2}^\eta). \end{aligned}$$

Os métodos do tipo Runge-Kutta são conhecidos por métodos de passo simples, pois a solução em τ_{n+1} só depende da função no ponto anterior τ_n . No entanto, antes que um passo seja dado, é necessária calcular as configurações de momentos e, conseqüentemente, o campo efetivo em instantes intermediários, a fim de determinar os parâmetros $f_{n+1}^\eta, f_{n+2}^\eta, e f_{n+3}^\eta$. Isso demanda um considerável tempo de computação se precisarmos de muitos passos de evolução do sistema. Na realidade, contabilizando o cálculo de f_n^η , o método de Runge-Kutta necessita de quatro cálculos do campo efetivo para um passo de evolução.

Existem métodos que usam valores da função em mais de um instante além do último, sendo conhecidos por métodos de passos múltiplos. A fim de poupar um substancial tempo de computação, usamos neste trabalho um método deste tipo, denominado **método de previsão e correção de Adams-Bashforth-Moulton**, para a evolução do sistema depois de conhecermos as configurações iniciais necessárias para o início do método. Na prática, usamos o método de Runge-Kutta de quarta ordem para calcular as quatro primeiras configurações iniciais. Uma vez obtidas, utilizamos o método preditor-corretor até o fim da simulação.

O método funciona da seguinte forma, considerando que as configurações iniciais de cada componente sejam conhecidas e escritas na forma $f_{n-3}^\eta, f_{n-2}^\eta, f_{n-1}^\eta$ e f_n^η , o algoritmo de Adams-Bashforth (**previsão**) nos dá a evolução da componente η do momento pela relação

$$m_{n+1}^\eta = m_n^\eta + \frac{\delta\tau}{24} (55f_n^\eta - 59f_{n-1}^\eta + 37f_{n-2}^\eta - 9f_{n-3}^\eta). \quad (\text{D.9})$$

Com o valor aproximado de m_{n+1}^η , calcula-se o campo efetivo \vec{h}_{n+1} e então f_{n+1}^η . Recalcula-se então um valor mais preciso para m_{n+1}^η usando o algoritmo de Adams-Moulton (correção) através da relação

$$m_{n+1}^\eta = m_n^\eta + \frac{\delta\tau}{24} (9f_{n+1}^\eta + 19f_n^\eta - 5f_{n-1}^\eta + f_{n-2}^\eta). \quad (\text{D.10})$$

Dessa forma, o método preditor-corretor embora precise de quatro configurações conhecidas, realiza apenas dois cálculos do campo efetivo em um passo de integração. Isso representa uma diminuição de metade dos cálculos necessários se usássemos o método Runge-Kutta

até o fim da simulação. Resumindo, usamos o método Runge-Kutta de quarta ordem para obtermos as quatro primeiras configurações de evolução temporal do sistema. Após isso, usamos o método preditor-corretor até o fim da simulação. Comparações realizadas mostraram uma queda substancial no tempo de computação utilizando esta técnica.

Uma vez que os dois métodos são de ordem quatro, os erros resultantes são da ordem de $\delta\tau^5$. Como usamos em nossas simulações $\delta\tau = 0,001 = 10^{-3}$, percebe que os erros acumulados no método são da ordem de 10^{-15} , o que nos confere grande confiabilidade nos resultados.

ANEXO A – Trabalho Publicado

Em anexo, o primeiro trabalho publicado relacionado a esta tese de doutorado.

Ground state study of the thin ferromagnetic nano-islands for artificial spin ice arrays

D. S. Vieira Júnior, S. A. Leonel, R. A. Dias, D. Toscano, P. Z. Coura, and F. Sato

Citation: *Journal of Applied Physics* **116**, 093901 (2014); doi: 10.1063/1.4894252

View online: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4894252>

View Table of Contents: <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jap/116/9?ver=pdfcov>

Published by the [AIP Publishing](#)

Articles you may be interested in

[Effects of dimensionality and spatial distribution on the magnetic relaxation of interacting ferromagnetic nanoclusters: A Monte Carlo study](#)

J. Appl. Phys. **115**, 173906 (2014); 10.1063/1.4873298

[Vortex state in ferromagnetic nanoparticles](#)

J. Appl. Phys. **115**, 17D138 (2014); 10.1063/1.4867597

[Effect of packing fraction on ferromagnetic resonance in NiFe₂O₄ nanocomposites](#)

J. Appl. Phys. **111**, 07E348 (2012); 10.1063/1.3679635

[Magnetic resonance study of Ni nanoparticles in single-walled carbon nanotube bundles](#)

J. Appl. Phys. **100**, 124315 (2006); 10.1063/1.2405122

[Micromagnetic investigation of resonance frequencies in ferromagnetic particles](#)

J. Appl. Phys. **97**, 10E313 (2005); 10.1063/1.1852432

The logo for the Journal of Applied Physics, featuring the letters 'AIP' in a large, white, sans-serif font on the left, followed by a vertical orange bar, and the words 'Journal of Applied Physics' in a smaller, white, sans-serif font on the right. The background is a dark orange with a subtle, abstract pattern of light-colored, curved lines.

Journal of Applied Physics is pleased to announce **André Anders** as its new Editor-in-Chief

Ground state study of the thin ferromagnetic nano-islands for artificial spin ice arrays

D. S. Vieira Júnior,^{1,2,a)} S. A. Leonel,^{2,b)} R. A. Dias,^{2,c)} D. Toscano,^{2,d)} P. Z. Coura,^{2,e)} and F. Sato^{2,f)}

¹*Departamento Acadêmico de Matemática, Física e Estatística, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sudeste de Minas Gerais - Câmpus Rio Pomba, Rio Pomba, Minas Gerais 36180-000, Brazil*

²*Departamento de Física, Laboratório de Simulação Computacional, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Minas Gerais 36036-330, Brazil*

(Received 7 July 2014; accepted 19 August 2014; published online 2 September 2014)

In this work, we used numerical simulations to study the magnetic ground state of the thin elongated (elliptical) ferromagnetic nano-islands made of Permalloy. In these systems, the effects of demagnetization of dipolar source generate a strong magnetic anisotropy due to particle shape, defining two fundamental magnetic ground state configurations—vortex or type C. To describe the system, we considered a model Hamiltonian in which the magnetic moments interact through exchange and dipolar potentials. We studied the competition between the vortex states and aligned states—type C—as a function of the shape of each elliptical nano-islands and constructed a phase diagram vortex—type C state. Our results show that it is possible to obtain the elongated nano-islands in the C-state with aspect ratios less than 2, which is interesting from the technological point of view because it will be possible to use smaller islands in spin ice arrays. Generally, the experimental spin ice arrangements are made with quite elongated particles with aspect ratio approximately 3 to ensure the C-state. © 2014 AIP Publishing LLC. [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4894252>]

I. INTRODUCTION

Recently, the geometrical frustration in spin configuration of the magnetic materials observed and studied in natural compounds over a decade^{1–5} has gained new perspective research after manufacturing the artificial array based on the Permalloy that exhibits properties of frustration, highlighting the pioneering work of Wang *et al.*⁶ In that work, a two-dimensional square lattice of ferromagnetic elongated islands was constructed. The shape anisotropy imposes a ground state of Ising type alignment of the magnetization along the longest dimension of the particle and reveals frustrated behavior at each vertex in the meeting of four islands. It is also observed in this system, as a function of lattice spacing, a ground state configuration with two in and two out spins at each vertex, which is known as spin ice configuration due to the similarity to the setting of positive ions in the formation of crystalline water ice.^{1,3,7} Subsequent works began investigating key features of such spin ice arrangements, from the experimental and theoretical point of view. These works study the thermodynamics of the systems,^{8,9} theoretical models for the interaction of the islands,¹⁰ analysis of demagnetization processes of the networks,^{11,12} and the magnetization reversal of the square^{13–16} and honeycomb^{17–19} lattice.

The description and understanding of such spin ice arrangements have increasing importance not only in the understanding of fundamental aspects of condensed matter but also, especially, on the observation and characterization of excitations of type magnetic monopoles in such artificial systems.²⁰ Although the occurrence of these excitations has already been observed in natural systems at low temperature,^{21,22} its observation in two-dimensional systems artificially frustrated at room temperature can lead to a collection of new phenomena and for several possible technological applications. In this perspective, studies have been conducted to understand the monopole type excitations and their interactions in square networks,^{20,23,24} honeycomb,^{17,19,25} triangular,²⁶ and comparisons due to different possible frustration states.²⁷ The various published results show the fractionalization of magnetic charge in a system whose individual handling of such magnetic monopoles remains a classic magnetic dipole. Given the possible applicability of these excitations in the near future, several recent studies have brought significant contributions to the understanding and control of magnetic monopoles.^{21,26,28–30} Other recent studies have also contributed to the discovery of new geometrically frustrated networks,³¹ development of new spin ice-like materials,^{32,33} thermal effects in non-equilibrium situations,^{34,35} and the observation of chirality at the ends of the islands in each vertex of a triangular or honeycomb lattice.³⁶

It is evident the importance of the study and the characterization of the artificial spin ice arrays, in particular, to determine the structural and the magnetic properties of the ferromagnetic individual islands.^{37,38} The experimental works are based on arrangements whose individual islands have large aspect ratio in order to ensure an Ising like behavior on each island in the network. The question arises: is there

^{a)}Electronic mail: damiaovieira@ifsudestemg.edu.br

^{b)}Author to whom correspondence should be addressed. Electronic mail: sidiney@fisica.ufjf.br

^{c)}Electronic mail: radias@fisica.ufjf.br

^{d)}Electronic mail: danielotocano@fisica.ufjf.br

^{e)}Electronic mail: pablo@fisica.ufjf.br

^{f)}Electronic mail: sjfsato@fisica.ufjf.br

a minimum aspect ratio or geometry for the island that ensures the magnetization along a single axis allowing an Ising like behavior under the influence of an applied magnetic field? It is well known in the literature that the miniaturization of ferromagnetic systems is naturally restricted to the superparamagnetic limit.^{39–43} In addition, in the last decade there has been an increase in the research and in the production of magnetic structures on the nanoscale. In ellipsoidal particles, the break of bulk symmetry and the demagnetization effects generate a strong magnetic anisotropy defining two possible configurations for magnetic ground state: vortex or type C^{44–50} (see Fig. 1 for illustration).

In this work, using spin dynamic simulations, we studied the magnetic ground state of the thin elongated (elliptical) ferromagnetic nano-islands made of Permalloy. Specifically, we studied the competition between the vortex states and aligned states type C, as a function of the shape of the nano-islands and constructed a phase diagram vortex—type C state. We observed that for small aspect ratios the preferred state is the vortex, but as the particle elongation increases, the shape anisotropy naturally favors the aligned C-state along the major axis.

II. MODEL AND METHODOLOGY

The magnetic nano-islands are modeled by magnetic moments with dipole-dipole and exchange interactions. The model Hamiltonian for the nano-islands can be written as^{49–52}

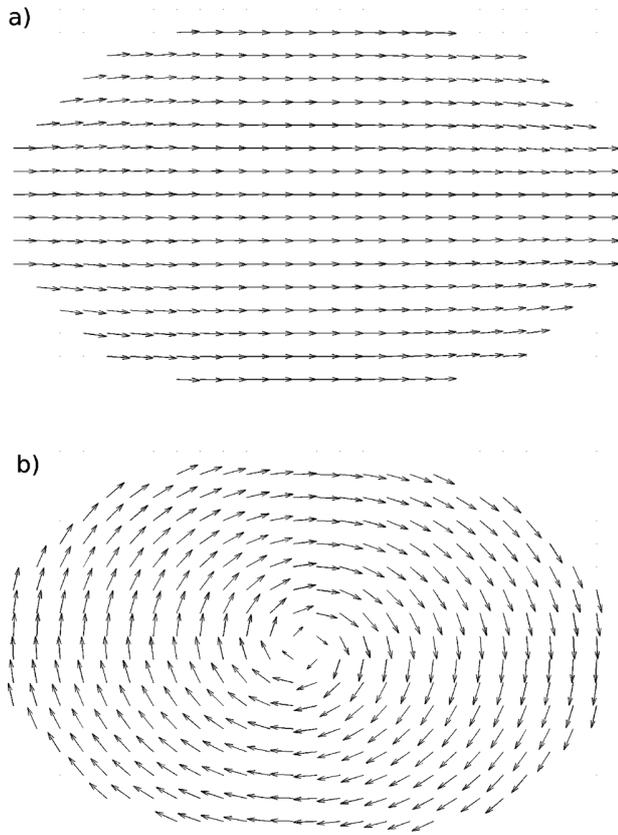


FIG. 1. (a) Top view of the elliptical particle in aligned state type C and (b) top view of the elliptical particle in vortex state.

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{D}{2J} \sum_{(i,j)} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] \right\}, \quad (1)$$

where i and j represent sites of the elliptical particle, \hat{m}_i and \hat{m}_j are dimensionless vectors that satisfy the condition $|\hat{m}| = 1$ representing the magnetic moments located in the sites i and j , respectively; r_{ij} is the distance between the sites i and j measured in units of length and a is the lattice parameter of the material; J (in units of energy) is the exchange coupling constant between \hat{m}_i and \hat{m}_j and D is the dipole strength. The lattice parameter a represents the distance between the first neighbor sites in a cubic lattice.

The sum in the first term is over nearest neighbors, but the sum in the second term is over all sites of the system due to the long-range nature of the dipole interaction. The Hamiltonian (Eq. (1)) can be rewritten as $H = J\mathcal{H}$, where \mathcal{H} is the dimensionless term in curly brackets. The dynamics of the system is followed, as in Refs. 49–54, by solving numerically the discrete version of the Landau-Lifshitz-Gilbert equation given by

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = -\frac{1}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \right], \quad (2)$$

where τ is the dimensionless time defined as $\tau = t \cdot \omega_0$, where t is the Hamiltonian time, measured in seconds,⁵⁵ α is the material damping parameter, and $\vec{b}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{m}_i}$ is the dimensionless effective field at site i , containing individual contributions from the exchange and dipolar fields. We used the reference value $\omega_0 = 2.13 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ for Permalloy-79.⁴⁹ We integrated the equations of motion (Eq. (2)) using a fourth-order predictor-corrector scheme with a damping parameter $\alpha = 0.01$ and time step $d\tau = 0.001$ ($dt = 4.7 \times 10^{-15} \text{ s}$ for Permalloy-79).

In the micromagnetic approach, the interaction constants depend on the material parameters and also the manner in which the system is partitioned into cells. As in Refs. 46,49,50,52, and 53, we have chosen to use cubic cells of edge length a . In this case, the interaction constants between the cells are given by $J = 2Aa$ and $\frac{D}{J} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$. We have used the typical parameters for Permalloy-79: the saturation magnetization $M_S = 8.6 \times 10^5 \text{ A/m}$, and the exchange stiffness constant $A = 1.3 \times 10^{-11} \text{ J/m}$. Using these parameters, we have estimated the exchange length as $\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}} \approx 5.3 \text{ nm}$ and the unit cell size was chosen as $5 \times 5 \times 5 \text{ nm}^3$. The simulations were performed with no cutoff in the dipolar energy term.

We considered thin elliptical particles with thickness t ranged from 5 nm to 30 nm and L_x (major axis), L_y (minor axis) ranged from 50 nm to 650 nm (see Fig. 2 for illustration).

The methodology used to determine the most favorable state (the ground state) as a function of the dimensions of the nano-islands is described as follows. Initially, we considered two particles with the same dimensions, one in the vortex

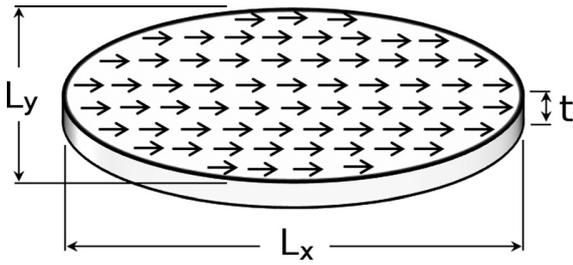


FIG. 2. Schematic view of the elliptical nano-island with thickness t , major axis L_x , and minor axis L_y .

state and the other in the C-state. After the systems reach equilibrium, we compare their energies per spin. We started considering particles with $L_y = L_x$ (disk shaped) and repeat this procedure considering fixed L_y and varying L_x , with $L_x > L_y$. We observe that for small values of the aspect ratio $q = \frac{L_x}{L_y}$ ($q > 1$), the vortex state is the ground state and from a critical value of the q , the C-state becomes the ground state. This procedure allows us to determine the transition aspect ratio $q_{transition}$. Figure 3 shows schematically the method used by us.

III. RESULTS AND DISCUSSIONS

We considered particles with thickness ranged from 5 nm to 30 nm to build a vortex-type C phase diagram. For each thickness considered, we construct a plot of the transition aspect ratio as a function of L_y of the particle as shown in Figure 4. In the diagram, the region below each curve corresponds to aspect ratios for which the vortex state is the magnetic ground state and the region above corresponds to aspect ratios for which the C-state is the magnetic ground state. In the C-state, the magnetization is along L_x and the particle behaves as a large magnetic moment. Thus, in this state, the particle can be used as an individual island in any artificial spin ice array.

It can be seen in Figure 4 that it is possible to construct elongated ferromagnetic islands in the C-state with aspect

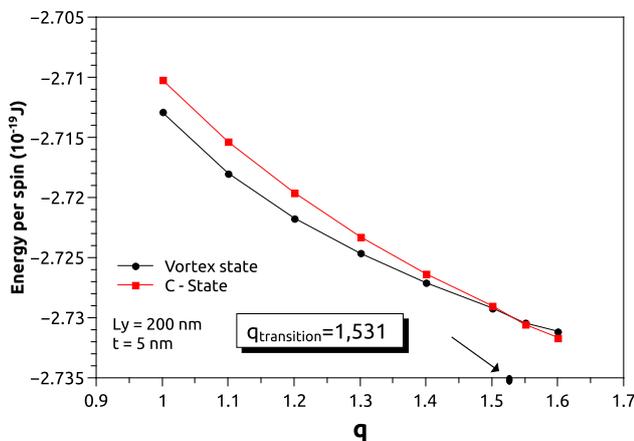


FIG. 3. Energy per spin for the vortex state and C-state as a function of the aspect ratio $q = \frac{L_x}{L_y}$ for an elliptical particle with fixed $L_y = 200$ nm and thickness $t = 5$ nm. For aspect ratio q less than 1.531, the vortex state is the magnetic ground state and for q greater than 1.531 the C-state is the magnetic ground state.

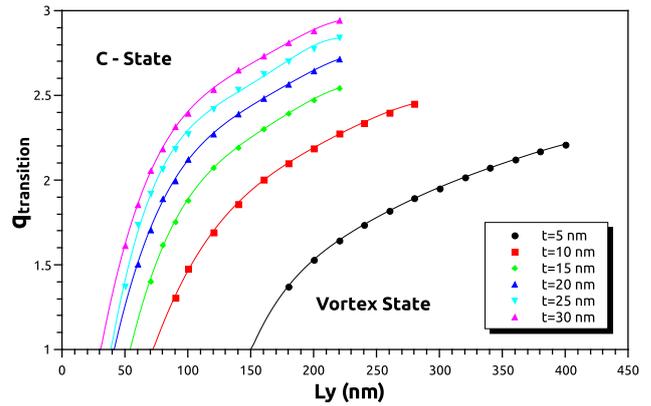


FIG. 4. Phase diagram for elliptical nano-islands showing the behavior of the transition aspect ratio as a function of L_y for thickness ranged from 5 nm to 30 nm. The region below each curve corresponds to aspect ratios for which the vortex state is the magnetic ground state and the region above corresponds to aspect ratios for which the C-state is the magnetic ground state. The solid lines are fourth-order polynomial fits.

ratios less than two. This is interesting from the technological point of view because it will be possible to use smaller islands in spin ice arrays. For example, a particle with a thickness of 25 nm and $L_y = 50$ nm is in the C-state with $L_x = 70$ nm, which is much smaller than the islands used in experimental spin ice arrays which have thickness about 25 nm, $L_y = 80$ nm and $L_x = 220$ nm.^{6,8-11} Figure 4 can be used as a guide to produce, with appropriate dimensions, elliptical ferromagnetic islands in single-domain state (C-state), which can be used in magnetic arrangements artificially frustrated.

As expected, if the thickness of the nano-particles increases, the anisotropy along z increases³⁸ making the vortex state to be more stable at higher aspect ratios. We observed that, for particles with fixed size L_y , the transition aspect ratio increases with thickness t . Figure 5 shows this effect for particles with $L_y = 180$ nm and $L_y = 220$ nm.

We also observed that in large and thin particles in the C-state, there are small deviations of the magnetic moments in the extremities of the particle. These deviations are related

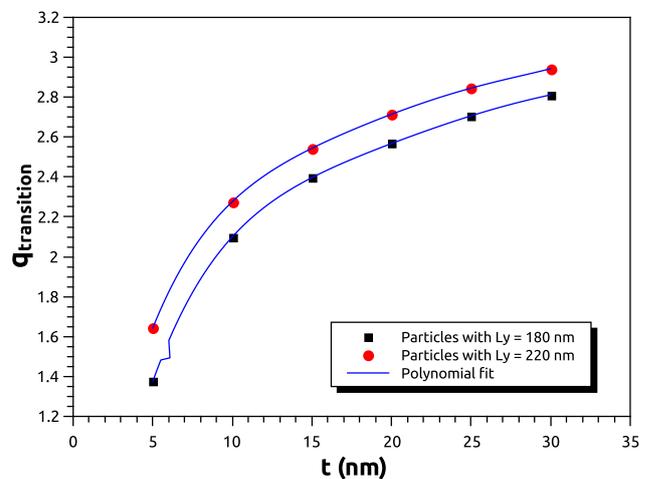


FIG. 5. Behavior of the transition aspect ratio $q_{transition}$ as a function of the thickness t for particles with $L_y = 180$ nm and $L_y = 220$ nm.

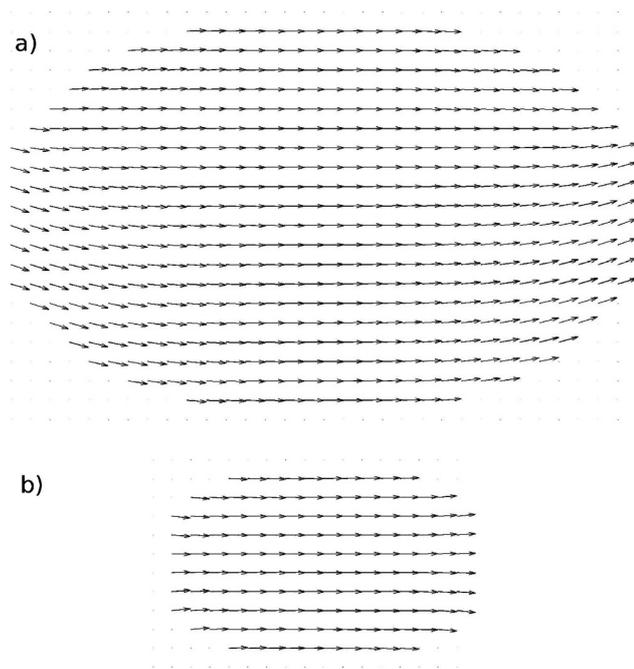


FIG. 6. (a) Small nonuniformities in the magnetization observed in particle with dimensions $160 \times 100 \times 10$ nm. (b) Uniform magnetization of the particle with dimensions $80 \times 50 \times 25$ nm. The two particles have aspect ratios 1.6.

to the competition between the exchange interaction and the dipolar interaction. Small and thick particles do not show this effect even if they have the same aspect ratio, as shown in Figure 6.

IV. CONCLUSION

In summary, we used numerical simulations to study the magnetic ground state of the thin elliptical ferromagnetic nano-islands made of Permalloy. The effects of demagnetization of dipolar source generate a strong magnetic anisotropy due to particle shape, defining two fundamental magnetic ground state configurations—vortex or type C. We studied the competition between the vortex states and aligned states—type C—as a function of the shape of each elliptical nano-islands and constructed a phase diagram.

We observed that it is possible to obtain the elongated nano-islands in the C-state with aspect ratios less than 2, which is an important result. Generally, the experimental spin ice arrangements are made with quite elongated particles with aspect ratio approximately 3 to ensure the C-state. Our results show that it will be possible to use smaller islands in spin ice arrays and we believe that it may be useful as a guide in the process of building magnetic frustrated arrangements.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by CNPq, CAPES, and FAPEMIG (Brazilian Agencies) and Pró - Reitoria de Pesquisa e Pós graduação do IF Sudeste MG - Câmpus Rio Pomba. Numerical works were done at the Laboratório de Simulação Computacional do Departamento de Física da UFJF.

- ¹M. J. Harris, S. T. Bramwell, D. F. McMorrow, T. Zeiske, and K. W. Godfrey, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2554 (1997).
- ²R. Moessner, *Can. J. Phys.* **79**, 1283 (2001).
- ³R. Siddharthan, B. S. Shastry, A. P. Ramirez, A. Hayashi, R. J. Cava, and S. Rosenkranz, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1854 (1999).
- ⁴S. T. Bramwell and J. P. Gingras, *Science* **294**, 1495 (2001).
- ⁵A. P. Ramirez, A. Hayashi, R. J. Cava, R. Siddharthan, and B. S. Shastry, *Nature* **399**, 333 (1999).
- ⁶R. F. Wang, C. Nisoli, R. S. Freitas, J. Li, W. McConville, B. J. Cooley, M. S. Lund, N. Samarth, C. Leighton, V. H. Crespi, and P. Schiffer, *Nature* **439**, 303 (2006).
- ⁷J. D. Bernal and R. H. Fowler, *J. Chem. Phys.* **1**, 515 (1933).
- ⁸C. Nisoli, J. Li, X. Ke, D. Garand, P. Schiffer, and V. H. Crespi, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 047205 (2010).
- ⁹C. Nisoli, R. Wang, J. Li, W. F. McConville, P. E. Lammert, P. Schiffer, and V. H. Crespi, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 217203 (2007).
- ¹⁰G. Möller and R. Moessner, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 237202 (2006).
- ¹¹R. F. Wang, J. Li, W. McConville, C. Nisoli, X. Ke, J. W. Freeland, V. Rose, M. Grimsditch, P. Lammert, V. H. Crespi, and P. Schiffer, *J. Appl. Phys.* **101**, 09J104 (2007).
- ¹²X. Ke, J. Li, C. Nisoli, P. E. Lammert, W. McConville, R. F. Wang, V. H. Crespi, and P. Schiffer, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 037205 (2008).
- ¹³A. Remhof, A. Shumann, A. Westphalen, H. Zabel, N. Mikuszeit, E. Y. Vedmedenko, T. Last, and T. Kunze, *Phys. Rev. B* **77**, 134409 (2008).
- ¹⁴C. Phatak, M. Pan, A. K. Petford-Long, S. Hong, and M. De Graef, *New J. Phys.* **14**, 075028 (2012).
- ¹⁵G. M. Wysin, W. A. Moura-Melo, L. A. S. Mól, and A. R. Pereira, *New J. Phys.* **15**, 045029 (2013).
- ¹⁶J. Sklenar, V. S. Bhat, L. E. DeLong, and J. B. Ketterson, *J. Appl. Phys.* **113**, 17B530 (2013).
- ¹⁷S. Ladak, D. E. Read, G. K. Perkins, L. F. Cohen, and W. R. Branford, *Nat. Phys.* **6**, 359 (2010).
- ¹⁸A. Westphalen, A. Shumann, A. Remhof, H. Zabel, M. Karolak, B. Baxevanis, E. Y. Vedmedenko, T. Last, U. Kunze, and T. Eimüller, *Phys. Rev. B* **77**, 174407 (2008).
- ¹⁹P. Mellado, O. Petrova, Y. Shen, and O. Tchernyshyov, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 187206 (2010).
- ²⁰L. A. S. Mól, R. L. Silva, R. C. Silva, A. R. Pereira, W. A. Moura-Melo, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **106**, 063913 (2009).
- ²¹S. T. Bramwell, S. R. Giblin, S. Calder, R. Aldus, D. Prabhakaran, and T. Fennell, *Nature* **461**, 956 (2009).
- ²²C. Castelnovo, R. Moessner, and S. L. Sondhi, *Nature* **451**, 42 (2008).
- ²³C. Phatak, A. K. Petford-Long, O. Heinonen, M. Tanase, and M. De Graef, *Phys. Rev. B* **83**, 174431 (2011).
- ²⁴R. C. Silva, R. J. C. Lopes, L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo, G. M. Wysin, and A. R. Pereira, *Phys. Rev. B* **87**, 014414 (2013).
- ²⁵S. Ladak, D. E. Read, W. R. Branford, and L. F. Cohen, *New J. Phys.* **13**, 063032 (2011).
- ²⁶L. A. S. Mól, A. R. Pereira, and W. A. Moura-Melo, *Phys. Rev. B* **85**, 184410 (2012).
- ²⁷J. Li, X. Ke, S. Zhang, D. Garand, C. Nisoli, P. Lammert, V. H. Crespi, and P. Schiffer, *Phys. Rev. B* **81**, 092406 (2010).
- ²⁸L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo, and A. R. Pereira, *Phys. Rev. B* **82**, 054434 (2010).
- ²⁹F. S. Nascimento, L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo, and A. R. Pereira, *New J. Phys.* **14**, 115019 (2012).
- ³⁰R. C. Silva, F. S. Nascimento, L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo, and A. R. Pereira, *New J. Phys.* **14**, 015008 (2012).
- ³¹M. J. Morrison, T. R. Nelson, and C. Nisoli, *New J. Phys.* **15**, 045009 (2013).
- ³²R. J. Aldus, T. Fennell, P. P. Deen, E. Ressouche, G. C. Lau, R. J. Cava, and S. T. Bramwell, *New J. Phys.* **15**, 013022 (2013).
- ³³G. Ehlers, A. Huq, S. O. Diallo, C. Adriano, K. C. Rule, A. L. Cornelius, P. Fouquet, P. G. Pagliuso, and J. S. Gardner, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 076005 (2012).
- ³⁴P. E. Lammert, V. H. Crespi, and C. Nisoli, *New J. Phys.* **14**, 045009 (2012).
- ³⁵U. B. Arnalds, A. Farhan, R. V. Chopdekar, V. Kapaklis, A. Balan, E. T. Papaioannou, M. Ahlberg, F. Nolting, L. J. Heyderman, and B. Hjörvarsson, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 112404 (2012).
- ³⁶N. Rougemaille, F. Montaigne, B. Canals, M. Hehn, H. Riahi, D. Lacour, and J.-C. Toussaint, *New J. Phys.* **15**, 035026 (2013).
- ³⁷Z. H. Wei, M. F. Lai, C. R. Chang, N. A. Usov, J. C. Wu, and J. Y. Lai, *J. Magn. Magn. Mater.* **272**, e563 (2004).

- ³⁸G. M. Wysin, W. A. Moura-Melo, L. A. S. Mól, and A. R. Pereira, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 296001 (2012).
- ³⁹H.-D. Pfannes, D. S. Vieira Junior, R. Paniago, and J. H. Filho, *Hyperfine Interact.* **165**, 247 (2005).
- ⁴⁰V. Skumryev, S. Stoyanov, Y. Zhang, G. Hadjipanayis, D. Givord, and J. Nogués, *Nature* **423**, 850 (2003).
- ⁴¹H.-D. Pfannes, A. Mijovilovich, R. Magalhães-Paniago, and R. Paniago, *Phys. Rev. B* **62**, 3372 (2000).
- ⁴²H.-D. Pfannes, J. H. Filho, R. Paniago, and R. Magalhães-Paniago, *Hyperfine Interact.* **148/149**, 243 (2003).
- ⁴³K. K. P. Srivastava, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 549 (2003).
- ⁴⁴B. V. Costa, J. C. S. Rocha, P. Z. Coura, S. A. Leonel, D. Toscano, and R. A. Dias, *Int. J. Mod. Phys.* **23**, 1240003 (2012).
- ⁴⁵J. C. S. Rocha, B. V. Costa, P. Z. Coura, S. A. Leonel, and R. A. Dias, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 2342 (2012).
- ⁴⁶R. A. Dias, E. P. Mello, P. Z. Coura, S. A. Leonel, I. O. Maciel, D. Toscano, J. C. S. Rocha, and B. V. Costa, *Appl. Phys. Lett.* **102**, 172405 (2013).
- ⁴⁷S. A. Leonel, I. A. Marques, P. Z. Coura, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **102**, 104311 (2007).
- ⁴⁸J. C. S. Rocha, P. Z. Coura, S. A. Leonel, R. A. Dias, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **107**, 053903 (2010).
- ⁴⁹D. Toscano, S. A. Leonel, R. A. Dias, P. Z. Coura, J. C. S. Rocha, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **109**, 014301 (2011).
- ⁵⁰D. Toscano, S. A. Leonel, P. Z. Coura, F. Sato, R. A. Dias, and B. V. Costa, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 252402 (2012).
- ⁵¹J. H. Silva, D. Toscano, F. Sato, P. Z. Coura, B. V. Costa, and S. A. Leonel, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3083–3086 (2012).
- ⁵²V. A. Ferreira, D. Toscano, S. A. Leonel, P. Z. Coura, R. A. Dias, and F. Sato, *J. Appl. Phys.* **114**, 013907 (2013).
- ⁵³D. Toscano, S. A. Leonel, R. A. Dias, P. Z. Coura, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **109**, 076104 (2011).
- ⁵⁴D. Toscano, V. A. Ferreira, S. A. Leonel, P. Z. Coura, F. Sato, R. A. Dias, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **115**, 163906 (2014).
- ⁵⁵L. Berger, Y. Labaye, M. Tamine, and J. M. D. Coey, *Phys. Rev. B* **77**, 104431 (2008).

ANEXO B – Trabalho Submetido à Publicação

Em anexo, o segundo trabalho relacionado a esta tese de doutorado. Foi submetido à revista *Journal of Physics D: Applied Physics* e está em processo de revisão.

Magnetization reversal study of the Permalloy thin elliptical nano-islands

D. S. Vieira Júnior,^{1,2, a)} S. A. Leonel,^{2, b)} R. A. Dias,^{2, c)} D. Toscano,^{2, d)} P. Z. Coura,^{2, e)} and F. Sato^{2, f)}

¹⁾*Departamento Acadêmico de Matemática, Física, e Estatística, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sudeste de Minas Gerais - Campus Rio Pomba, Rio Pomba, Minas Gerais, 36180-000, Brazil*

²⁾*Departamento de Física, Laboratório de Simulação Computacional, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, Minas Gerais 36036-330, Brazil*

(Dated: 3 November 2015)

In this work we have used numerical simulations to study the magnetization reversal behavior in Permalloy thin elongated (elliptical) nano-islands. To describe the system we considered a model hamiltonian in which the magnetic moments interact through exchange and dipolar potentials besides the interaction with an external magnetic field pulse. The ultrafast reversal behavior was investigated as function of the direction and amplitude of the applied magnetic field pulse and the thickness of the nano-islands. It was observed that the coherence of magnetization reversal strongly depends on the direction of the applied field and the nano-island dimensions. We showed that by applying pulses of magnetic field orthogonal to the anisotropic axis of the nano-islands it is possible to obtain controlled coherent ultrafast magnetization reversals. We believe that it might be useful not only for technological applications such as ultrafast information-storage or logic devices but also for controlling and handling magnetic monopoles in square artificial spin ice arrays.

PACS numbers: 74-76

I. INTRODUCTION

Dynamics of the magnetization reversal in ferromagnetic nanoparticles has attracted the attention of both theoretical¹⁻⁴ and experimental⁵⁻⁸ researchers. In nanostructures made of a soft magnetic material, the shape anisotropy dominates over the magnetocrystalline anisotropy. The shape anisotropy originates in the dipolar interaction and the magnetic configurations that emerge in nanostructured systems are very sensitive to the geometric form and dimensions of the nanomagnet. Under suitable conditions, the lowest energy magnetization configuration of a flat elongated nanostructure made of a soft material can correspond to a “monodomain” state, in which most of magnetic moments point along the long axis of the nanomagnet; the magnetization easy axis.

The geometrical frustration in spin configurations observed in natural compounds⁹⁻¹¹ has gained new research perspective after the manufacturing of the artificial spin ice array. In the work of Wang *et al*¹², a two-dimensional square lattice of ferromagnetic elongated islands was fabricated. The shape anisotropy imposes a ground state of Ising type alignment of the magnetization along the longest dimension of the particle and reveals frustrated behavior at each vertex in the meeting of four islands. It is also observed in this system, as a function of lattice

spacing, a ground state configuration with two in and two out spins at each vertex, which is known as spin ice configuration due to the similarity to the setting of positive ions in the formation of crystalline water ice¹³⁻¹⁵.

The detailed understanding of spin ice arrays has become a subject of relevance not only for new potential technological applications but also for the observation of excitations of type magnetic monopoles¹⁶. Although these excitations have already been observed in natural systems at low temperature^{17,18} its observation in two-dimensional systems artificially frustrated at room temperature can lead to a collection of new phenomena and to several potential technological applications. Thus, studies have been conducted to understand the monopole type excitations and their interactions in square^{19,20}, honeycomb²¹⁻²³ and triangular networks²⁴. Comparisons between different possible frustration states²⁵ and studies of the control of magnetic monopoles²⁶⁻²⁸ have also been done. In this way, the understanding of the control of the magnetization reversal in elongated thin ferromagnetic nano-islands are of crucial importance.

Subsequent works have investigated the fundamental relations between the induced soft spin waves by application of quasistatic magnetic field and the magnetization reversal processes in elliptical particles^{29,30} and if the magnetization reversal process of nanomagnets is strongly dependent on the dipolar interaction strength³¹. Recent theoretical works have shown the dependence of the magnetization reversal with magnetic anisotropy in elliptical nano-islands³² and with the shape anisotropy in elliptical and stadium-shaped nanoparticles³³. In addition, the investigations of the magnetization reversal mechanisms in stadium-shaped particles³⁴ and in magnetic nanowires³⁵ also brought significant contributions to this subject. In these studies were observed different magnetic moments configurations during reversal such as

^{a)}Electronic mail: damiao.vieira@ifsudestemg.edu.br

^{b)} Author to whom correspondence should be addressed. Electronic mail: sidiney@fisica.ufjf.br

^{c)}Electronic mail: radias@fisica.ufjf.br

^{d)}Electronic mail: danilotoscano@fisica.ufjf.br

^{e)}Electronic mail: pablo@fisica.ufjf.br

^{f)}Electronic mail: sjfsato@fisica.ufjf.br

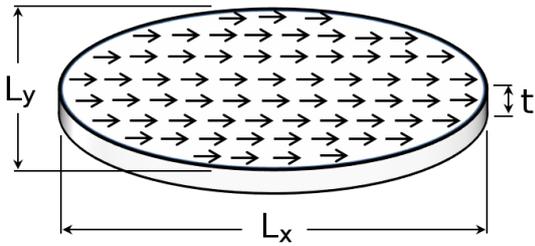


FIG. 1. Schematic view of the elliptical nano-island with thickness t ; major axis L_x and minor axis L_y .

vortices formation or uniform rotation. It was observed that in general these configurations depend on the shape, size, aspect ratio of the nanoparticles^{2,3,7,33,34} and on the applied magnetic field^{29,30} but it is not clear how these dependencies are in ultrafast processes.

In order to control the magnetic charges in spin ice systems, it is crucial to understand the ultrafast magnetization reversal processes in elongated ferromagnetic nanoparticles which involve the application of high frequency magnetic fields in carefully defined directions^{5,6}. The ferromagnetic materials have small relaxation times³⁶ and the behavior of the magnetization reversal process with ultrafast applied magnetic field has not been clearly investigated yet.

In this work, numerical simulations have been performed to investigate the ultrafast magnetization reversal processes in Permalloy thin elongated nano-islands with different aspect ratio and thickness. We considered elliptical nano-islands with dimensions $L_x \times L_y \times t$, where L_x is the major axis, L_y is the minor axis and t is the thickness (see Fig. 1 for illustration). We studied nano-islands with two different sizes: $220 \times 80 \times t \text{ nm}^3$, which is usually the individual particle size used in the experimental spin ice arrangements and $70 \times 50 \times t \text{ nm}^3$, which is the reduced size for particles in spin ice arrays proposed by us in previous work³⁷ for $t = 5, 10, 15, 20$ and 25 nm . In our study, we considered ultrafast magnetic field pulses (order of tenth nanoseconds) applied in different directions. In these ultrafast processes, we observed a strong dependence of the magnetization reversal coherence with the applied magnetic field direction and a significant difference in the angular dependence of coercivity on elliptic particles compared to those found previously for quasistatic applied magnetic field³³. Finally, based on our results, we suggest a way to control the uniform rotation of the magnetic moments during the magnetization reversal process for individual nano-islands which can be used in square artificial spin ice arrays and in other possible applications.

II. MODEL AND METHODOLOGY

The magnetic nano-islands are modeled by magnetic moments with dipole-dipole and exchange interactions.

The model Hamiltonian for the nano-islands under the influence of an applied magnetic field can be written as

$$H = J \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{D}{2J} \sum_{i,j} \left[\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{(r_{ij}/a)^3} \right] - \frac{Z}{J} \sum_i \hat{m}_i \cdot \vec{b}_i^{ext} \right\} \quad (1)$$

where i and j represent sites of the elliptical particle, \hat{m}_i and \hat{m}_j are dimensionless vectors that satisfy the condition $|\hat{m}_i| = 1$ representing the magnetic moments located in the sites i and j respectively, r_{ij} is the distance between the sites i and j measured in units of length, a is the lattice parameter of the material and represents the distance between the first neighbor sites in a cubic lattice, J (in units of energy) is the exchange coupling constant between \hat{m}_i and \hat{m}_j , D is the dipole strength. The last term represent the Zeeman interaction where Z/J is the coefficient of Zeeman interaction and $\vec{b}_i^{ext} = \frac{1}{\mu_0 M_S} \vec{B}$ is the dimensionless applied magnetic field with M_S the saturation magnetization and \vec{B} the magnetic applied induction in tesla (T). The sum in the first term is over the nearest neighbors sites but the sum in the second term is over all sites of the system due to the long-range nature of the dipole interaction and the Zeeman term takes into account the interaction between the applied field and the magnetic moments of the nano-island. The Hamiltonian (1) can be rewritten as $H = J\mathcal{H}$, where \mathcal{H} is the dimensionless term in curly brackets. As in Refs.³⁷⁻⁴⁰, the dynamics of the system is followed by solving numerically the discrete version of the Landau-Lifshitz-Gilbert equation given by

$$\frac{d\hat{m}_i}{d\tau} = -\frac{1}{1+\alpha^2} \left[\hat{m}_i \times \vec{b}_i + \alpha \hat{m}_i \times (\hat{m}_i \times \vec{b}_i) \right] \quad (2)$$

where τ is the dimensionless time defined as $\tau = t' \cdot \omega_0$ where t' is the Hamiltonian time, measured in seconds, α is the material damping parameter and $\vec{b}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{m}_i}$ is the dimensionless effective field at site i , containing individual contributions from the exchange, dipolar and external fields. We used the reference value $\omega_0 = 2.13 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ for Permalloy-79⁴¹ and integrated the equations of motion (2) using a fourth-order predictor-corrector scheme with a damping parameter $\alpha = 0.01$ and time step $d\tau = 0.001$ ($dt' = 4.7 \times 10^{-15} \text{ s}$ for Permalloy-79).

In the micromagnetic approach the interaction constants depend on the material parameters and also the manner in which the system is partitioned into cells. As in Refs.³⁸⁻⁴¹ we have used cubic cells of edge length a . In this case, the interaction constants between the cells are given by $J = 2Aa$ and $\frac{D}{J} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$. In the presence of an applied magnetic field, the coefficient of Zeeman

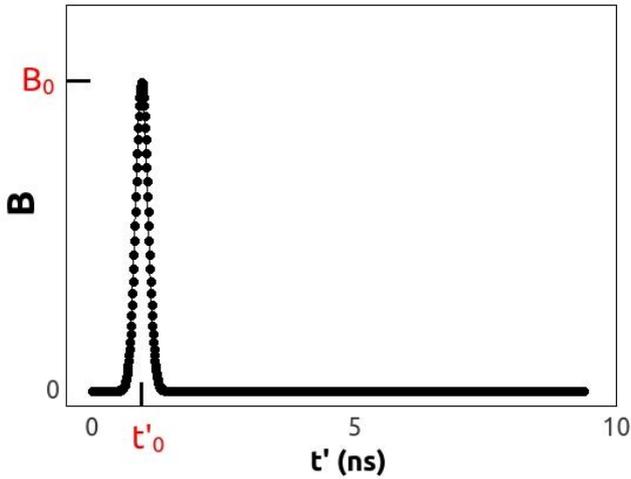


FIG. 2. Applied magnetic field profile. B_0 is the pulse amplitude centered in $t'_0 = 0.937$ ns.

interaction is $\frac{Z}{J} = \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2$. We have used the typical parameters for Permalloy-79: the saturation magnetization $M_S = 8.6 \times 10^5$ A/m and the exchange stiffness constant $A = 1.3 \times 10^{-11}$ J/m. Using these parameters we have estimated the exchange length as $\lambda = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}} \approx 5.3$ nm and the unit cell size was chosen as $5 \times 5 \times 5$ nm³ to ensure that all microscopic magnetic moments in each cell are aligned due to exchange interaction. The simulations were performed with no cutoff in the dipolar energy term.

In recent work³⁷, we demonstrated for elliptical particles that for small values of the aspect ratio $q = \frac{L_x}{L_y}$ the vortex state is the magnetic ground state and from a critical value of the q , the aligned state becomes the ground state. We chose thin elliptical particles with different aspect ratios $q = 1.40$ ($L_x = 70$ nm, $L_y = 50$ nm) and $q = 2.75$ ($L_x = 220$ nm, $L_y = 80$ nm), which have aligned magnetic ground state. The thickness t of the particles ranged from 5 to 25 nm in steps of 5 nm.

To studied the influence of magnetic field pulses in elliptical nano-islands magnetization behavior. We considered gaussian applied magnetic field pulse given by

$$|\vec{B}(t')| = B_0 e^{-\frac{(t'-t'_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (3)$$

where B_0 is the pulse amplitude with fixed width 0.5 ns ($\sigma = 0.25$ ns) centered in $t'_0 = 0.937$ ns which is usually the order of magnitude for pulses used in experimental studies^{5,6}, see Fig. 2. The magnetic field pulses were applied along the directions defined by θ_B ranged from $\theta_B = 90^\circ$ to $\theta_B = 179^\circ$ in steps of 5° and for $179^\circ \leq \theta_B \leq 180^\circ$ the pulses were applied in steps of 0.05° , see Fig. 3 for illustration.

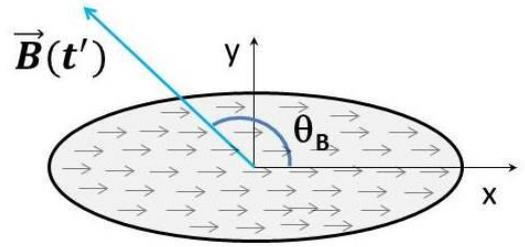


FIG. 3. Schematic view of the applied magnetic field direction defined by angle θ_B .

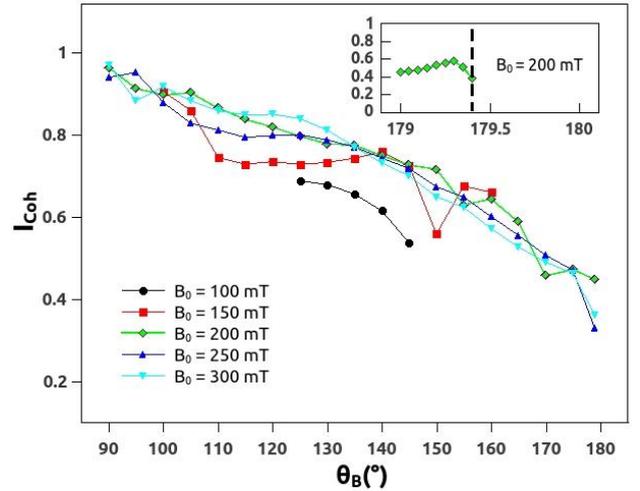


FIG. 4. Behavior of the coherence index (I_{Coh}) as function of θ_B for the magnetization reversals of $220 \times 80 \times 25$ nm³ nano-island for different applied magnetic field amplitudes B_0 . Inset: behavior of I_{Coh} for angles $179^\circ \leq \theta_B \leq 180^\circ$ with $B_0 = 200$ mT.

III. RESULTS AND DISCUSSIONS

In our simulations results we observed a variety of magnetization reversal mechanisms as creation and annihilation of vortices, coherent movement of the magnetic moments and other exotic structures that vary with the direction of the applied field and the nano-island dimensions. In order to follow these reversal mechanisms we defined a coherence index for magnetization reversal as

$$I_{Coh} = \frac{|\vec{M}_{min}|}{|\vec{M}|} \quad (4)$$

where \vec{M}_{min} is the minimum nano-island magnetization during the reversal process and \vec{M} is the nano-island saturation magnetization. If the magnetization reversal is perfectly coherent, $I_{Coh} = 1$ and if it is not coherent, I_{Coh} tends to zero.

Figure 4 shows the behavior of coherence index as function of θ_B for the magnetization reversals of $220 \times 80 \times 25$ nm³ nano-island for different magnetic field amplitudes

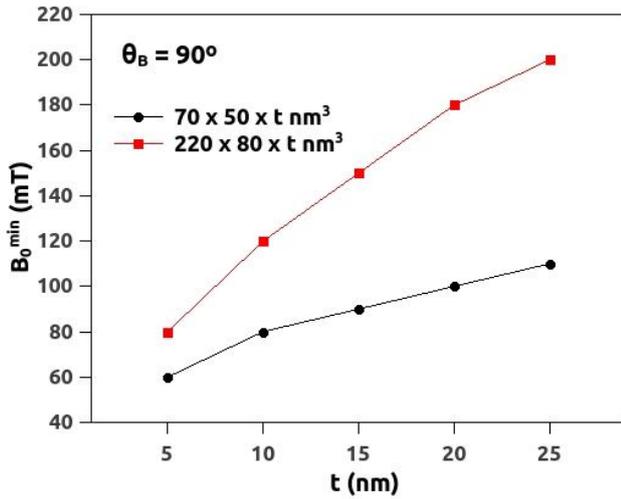


FIG. 5. Behavior of the B_0^{min} as function of thickness t for $220 \times 80 \times t \text{ nm}^3$ and $70 \times 50 \times t \text{ nm}^3$ nano-islands.

(B_0). For all B_0 considered, we observed a decrease in the coherence index as θ_B increases. We also observed that for low values of B_0 (100 and 150 mT) reversal does not occur for all θ_B considered and the nano-island magnetization can relax to one or two vortices states. For higher values of B_0 (200, 250 and 300 mT) reversal occurs for $\theta_B \lesssim 180^\circ$. For example, to $B_0 = 200$ mT reversal occurs up to $\theta_B = 179.45^\circ$, see inset in figure 4.

It can also be observed in the simulations that if field pulses are used for magnetization reversal the coercivity of elliptical nano-island has its minimum value close to $\theta_B = 135^\circ$ different from that observed in quasistatic conditions³³.

We have defined B_0^{min} as the minimum amplitude B_0 necessary to reverse the magnetization in $\theta_B = 90^\circ$. Figure 5 shows the behavior of the B_0^{min} for $220 \times 80 \times t \text{ nm}^3$ and $70 \times 50 \times t \text{ nm}^3$ nano-islands as function of thickness t and it can be observed that the B_0^{min} increases with thickness.

Figures 6 and 7 show the behavior of I_{Coh} as function of θ_B for $220 \times 80 \times t \text{ nm}^3$ and $70 \times 50 \times t \text{ nm}^3$ nano-islands respectively for different thicknesses. For each considered thickness we used B_0^{min} . We observed coherent rotation for $\theta_B = 90^\circ$ in all nano-islands considered with $I_{Coh} > 0.92$. It can also be observed that I_{Coh} decreases as θ_B increases for all nano-islands and that the reversal is more coherent in smaller nano-islands.

As illustration, figures 8 and 9 show the snapshots of the reversal for field pulses with $B_0 = B_0^{min} = 200$ mT applied in the directions $\theta_B = 179^\circ$ and $\theta_B = 90^\circ$ respectively in $220 \times 80 \times 25 \text{ nm}^3$ nano-island, which is the individual particle size used in the experimental spin ice arrays. For $\theta_B = 179^\circ$ (Fig.8) it is not observed coherent reversal and for $\theta_B = 90^\circ$ (Fig.9) it is and the reversal time is smaller than for $\theta_B = 179^\circ$.

For $\theta_B = 180^\circ$ it is possible reversal only with pulse amplitude B_0 approximately three times larger than

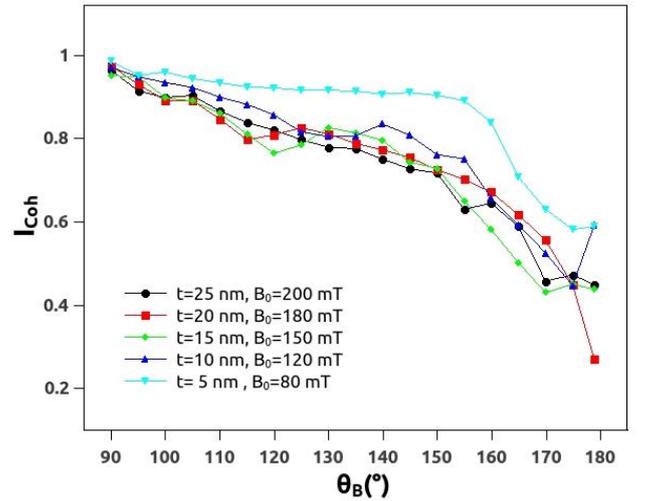


FIG. 6. Behavior of the coherence index (I_{Coh}) as function of θ_B for the magnetization reversals of $220 \times 80 \times t \text{ nm}^3$ nano-island for different thickness t using B_0^{min} .

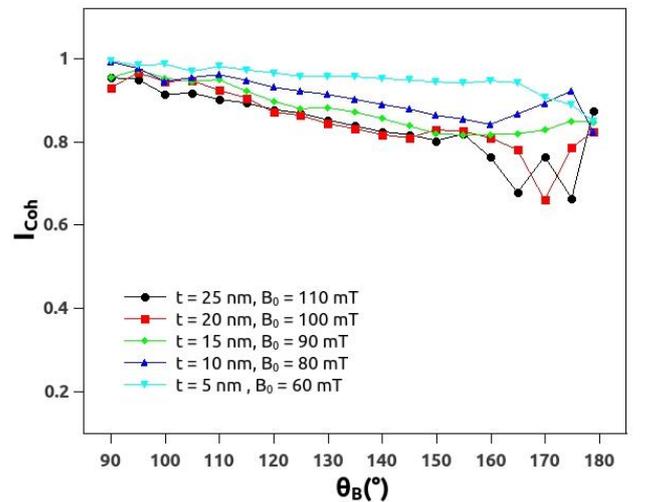


FIG. 7. Behavior of the coherence index (I_{Coh}) as function of θ_B for the magnetization reversals of $70 \times 50 \times t \text{ nm}^3$ nano-island for different thickness t using B_0^{min} .

B_0^{min} but it can induce metastable states of the magnetization as the formation and stabilization of one or two vortices⁴².

From technological view point, our results show that by applying a magnetic field in the direction $\theta_B = 90^\circ$ it is possible to obtain coherent magnetization reversals and also to control them in both directions ($+\hat{x}$ and $-\hat{x}$) in these nano-islands without having to change any experimental setup. We can use these results as a method for controlling the magnetization reversal of particles in square artificial spin ice arrays. Applying field pulses of amplitude B_0^{min} in one of the square spin ice array directions (\hat{x} or \hat{y}) a magnetization reversal will occur in the nano-islands with L_x perpendicular to the applied

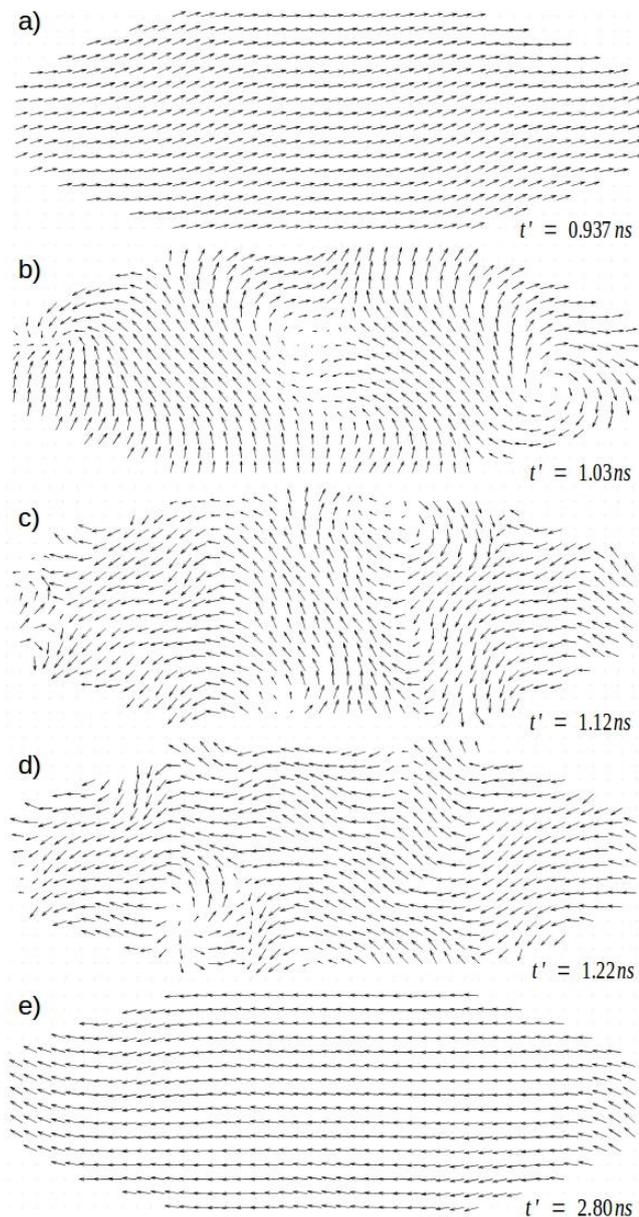


FIG. 8. Snapshots of the magnetization reversal of the $220 \times 80 \times 25 \text{ nm}^3$ nano-island for $\theta_B = 179^\circ$ with $B_0 = B_0^{min} = 200 \text{ mT}$. The respective instants t' are indicated in the figure.

pulse direction while leaving the magnetization of the nano-islands with L_x parallel to the pulse direction unchanged.

IV. CONCLUSION

In summary, we have used numerical simulations to study the ultrafast magnetization reversal process of Permalloy thin elliptical nano-islands considering ultrafast gaussian applied magnetic field pulses. It was investigated the reversal process behavior as function of

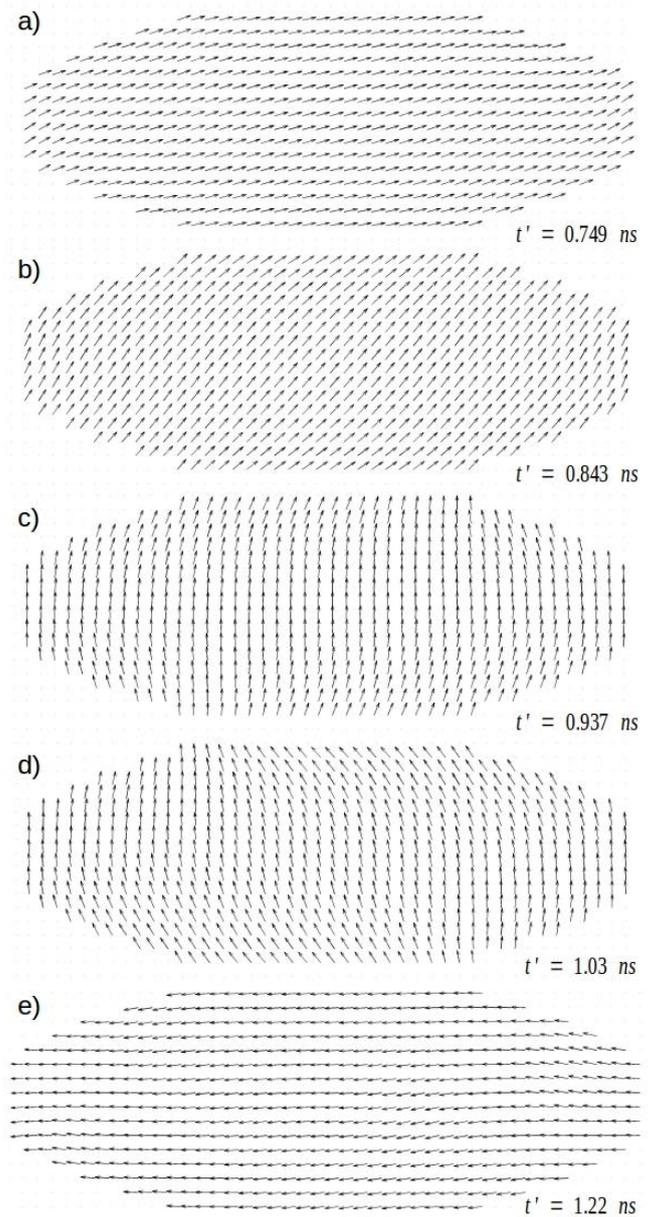


FIG. 9. Snapshots of the magnetization reversal of the $220 \times 80 \times 25 \text{ nm}^3$ nano-island for $\theta_B = 90^\circ$ with $B_0 = B_0^{min} = 200 \text{ mT}$. The respective instants t' are indicated in the figure.

direction and amplitude of the applied magnetic field pulse and thickness (t) of nano-islands in two different aspect ratios: $220 \times 80 \times t \text{ nm}^3$ and $70 \times 50 \times t \text{ nm}^3$. We have observed that the magnetization reversal mechanism can occur or not via coherent rotation of the magnetic moments. Thus we have introduced a “coherence index” which measures how much coherence the magnetization is reversed.

It has been showed that we can obtain controlled coherent ultrafast magnetization reversals applying pulses of magnetic field orthogonal to the anisotropic axis of the nano-islands (L_x direction). We have observed that the

coherence of the reversal decreases as the application direction of the magnetic field pulse increases from 90° and that the reversal is more coherent in smaller nano-islands.

Our results show that it will be possible to use ultrafast field pulses to obtain coherent magnetization reversal of individual particles in frustrated magnetic systems. We believe that this mechanism might be useful in the process of controlling and handling magnetic monopoles in square artificial spin ice arrays and can also be used in ultrafast logic devices and in magnetic random access memory devices.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by CNPq, FAPEMIG (Brazilian Agencies) and Pró - Reitoria de Pesquisa e Pós graduação IF Sudeste MG - Diretoria de Pesquisa e Pós graduação Campus Rio Pomba. Numerical works were done at the Laboratório de Simulação Computacional do Departamento de Física da UFJF.

- ¹L. Torres, L. Lopez-Diaz, O. Alejos, and J. Iñiguez, *Physica B* **275**, 59 (2000).
- ²Yu. B. Grebenshchikov, N. A. Usov, and K. S. Pestchanyi, *J. Appl. Phys.* **94**, 6649 (2003).
- ³N. A. Usov, Yu. B. Grebenshchikov, L. G. Kurkina, Ching-Ray Chang, and Zung-Hang Wei, *J. Magn. Magn. Mat.* **258**, 6 (2003).
- ⁴Zung-Hang Wei, Mei-Feng Lai, Ching-Ray Chang, N. A. Usov, J. C. Wu, and Jun-Yang Lai, *J. Magn. Magn. Mat.* **272**, e563 (2004).
- ⁵B. C. Choi, M. Belov, W. K. Hiebert, G. E. Ballentine, and M. R. Freeman, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 728 (2001).
- ⁶Th. Gerrits, H. A. M. van den Berg, J. Hohlfeld, L. Bär, and Th. Rasing, *Nature* **418**, 509 (2002).
- ⁷P. Vavassori, N. Zaluzec, V. Metlushko, V. Novosad, B. Ilic, and M. Grimsditch, *Phys. Rev. B* **69**, 214404 (2004).
- ⁸S. Goolaup, and A. O. Adeyeye, *J. Appl. Phys.* **98**, 084318 (2005).
- ⁹R. Moessner, *Can. J. Phys.* **79**, 1283 (2001).
- ¹⁰A. P. Ramirez, A. Hayashi, R. J. Cava, R. Siddharthan, and B. S. Shastry, *Nature* **399**, 333 (1999).
- ¹¹S. T. Bramwell and J. P. Gingras, *Science* **294**, 1495 (2001).
- ¹²R. F. Wang, C. Nisoli, R. S. Freitas, J. Li, W. McConville, B. J. Cooley, M. S. Lund, N. Samarth, C. Leighton, V. H. Crespi, and P. Schiffer, *Nature* **439**, 303 (2006).
- ¹³J. D. Bernal and R. H. Fowler, *J. Chem. Phys.* **1**, 515(1933).
- ¹⁴M. J. Harris, S. T. Bramwell, D. F. McMorrow, T. Zeiske, and K. W. Godfrey, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2554 (1997).
- ¹⁵R. Siddharthan, B. S. Shastry, A. P. Ramirez, A. Hayashi, R. J. Cava, and S. Rosenkranz, *Phys. Rev. Lett.* **83** 1854 (1999).
- ¹⁶L. A. S. Mól, R. L. Silva, R. C. Silva, A. R. Pereira, W. A. Moura-Melo, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **106**, 063913 (2009).
- ¹⁷S. T. Bramwell, S. R. Giblin, S. Calder, R. Aldus, D. Prabhakaran, and T. Fennell; *Nature*, **461**, 956 (2009).
- ¹⁸C. Castelnovo, R. Moessner, and S. L. Sondhi, *Nature* **451**, 42 (2008).
- ¹⁹C. Phatak, A. K. Petford-Long, O. Heinonen, M. Tanase, and M. De Graef, *Phys. Rev. B* **83**, 174431 (2011).
- ²⁰R. C. Silva, R. J. C. Lopes, L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo, G. M. Wysin, and A. R. Pereira, *Phys. Rev. B* **87**, 014414 (2013).
- ²¹P. Mellado, O. Petrova, Y. Shen, and O. Tchernyshyov, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 187206 (2010).
- ²²S. Ladak, D. E. Read, G. K. Perkins, L. F. Cohen, and W. R. Branford, *Nat. Phys.* **6**, 359 (2010).
- ²³S. Ladak, D. E. Read, W. R. Branford, and L. F. Cohen, *New J. Phys.* **13**, 063032 (2011).
- ²⁴L. A. S. Mól, A. R. Pereira, and W. A. Moura-Melo, *Phys. Rev. B* **85**, 184410 (2012).
- ²⁵J. Li, X. Ke, S. Zhang, D. Garand, C. Nisoli, P. Lammert, V. H. Crespi, and P. Schiffer, *Phys. Rev. B* **81**, 092406 (2010).
- ²⁶R. C. Silva, F. S. Nascimento, L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo, and A. R. Pereira, *New J. Phys.* **14**, 015008 (2012).
- ²⁷L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo, and A. R. Pereira, *Phys. Rev. B* **82**, 054434 (2010).
- ²⁸F. S. Nascimento, L. A. S. Mól, W. A. Moura-Melo, and A. R. Pereira, *New J. Phys.* **14**, 115019 (2012).
- ²⁹F. Montoncello, L. Giovannini, F. Nizzoli, P. Vavassori, M. Grimsditch, T. Ono, G. Gubbiotti, S. Tacchi, and G. Carlotti, *Phys. Rev. B* **76**, 024426 (2007).
- ³⁰F. Montoncello, L. Giovannini, F. Nizzoli, P. Vavassori, and M. Grimsditch, *Phys. Rev. B* **77**, 214402 (2008).
- ³¹Ying Li, TianXing Wang, and YangXian Li, *Phys. Status Solidi B* **247**, 1237 (2010).
- ³²G. M. Wysin, W. A. Moura-Melo, L. A. S. Mól, and A. R. Pereira, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 296001 (2012).
- ³³R. M. Corona, D. Altbir, and J. Escrig, *J. Magn. Magn. Mat.* **324**, 3824 (2012).
- ³⁴S. Castillo-Sepúlveda, D. Altbir, N. M. Vargas, and S. Allende, *J. Appl. Phys.* **112**, 083906 (2012).
- ³⁵M. P. Proença, J. Ventura, C. T. Sousa, M. Vazquez, and J. P. Araujo, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 116004 (2014).
- ³⁶H.-D. Pfannes, D. S. Vieira Junior, R. Paniago, and J. H. Filho, *Hyp. Interactions* **165**, 247 (2005).
- ³⁷D. S. Vieira Júnior, S. A. Leonel, R. A. Dias, D. Toscano, P. Z. Coura, and F. Sato, *J. Appl. Phys.* **116**, 093901 (2014).
- ³⁸D. Toscano, S. A. Leonel, P. Z. Coura, F. Sato, R. A. Dias, and B. V. Costa, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 252402 (2012).
- ³⁹J. H. Silva, D. Toscano, F. Sato, P. Z. Coura, B. V. Costa, and S. A. Leonel, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3083-3086 (2012).
- ⁴⁰V. A. Ferreira, D. Toscano, S. A. Leonel, P. Z. Coura, R. A. Dias, and F. Sato, *J. Appl. Phys.* **114**, 013907 (2013).
- ⁴¹D. Toscano, S. A. Leonel, R. A. Dias, P. Z. Coura, J. C. S. Rocha, and B. V. Costa, *J. Appl. Phys.* **109**, 014301 (2011).
- ⁴²H. Zhang, Y. Liu, Ming Yan, and R. Hertel, *IEEE Trans. on Magn.* **46**, 1675 (2010).

Referências Bibliográficas

- 1 LAUTERBUR, P. C. Image Formation by Induced Local Interactions: Examples Employing Nuclear Magnetic Resonance. **Nature**, v. 242, p. 190–191, 1973.
- 2 ZAHN, M.; HATTON, T. A.; KHUSHRUSHABI, S. R. Magnetic Colloid Petroleum Oil Spill Clean-up of Ocean Surface, Depth, and Shore Regions. **Patente US. n. 20120211428**, 2012.
- 3 ROSS, C. A.; HARATANI, S.; SHIMA, M. Magnetic behavior of lithographically patterned particle arrays. **Journal of Applied Physics**, v. 91, n. 10, p. 6848, 2002.
- 4 MARTÍN, J. I. et al. Ordered magnetic nanostructures: fabrication and properties. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 256, p. 449–501, 2003.
- 5 SBIAA, R.; PIRAMANAYAGAM, S. N. Patterned Media Towards Nano-bit Magnetic Recording: Fabrication and Challenges. **Recent Patents on Nanotechnology**, v. 100, p. 29–40, 2007.
- 6 PIRAMANAYAGAM, S. N.; SRINIVASAN, K. Recording media research for future hard disk drives. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 321, p. 485, 2009.
- 7 A., H.; SCHÄFER, A. **Magnetic Domains**. [S.l.]: Springer, 1998.
- 8 AHARONI, A. **Introduction to th Theory of Ferromagnetism**. [S.l.]: Oxford University Press, 1996.
- 9 BUSCHOW, K. H. J.; BOER, F. R. **Physics of Magnetism and Magnetic Materials**. [S.l.]: Kluwer Academic Publishers, 2003.
- 10 NOLTING, W.; RAMAKANTH, A. **Quantum Theory of Magnetism**. [S.l.]: Springer, 2009.
- 11 SCHNEIDER, M.; HOFFMANN, H.; ZWECK, J. Lorentz microscopy of circular ferromagnetic permalloy nanodisks. **Applied Physics Letters**, v. 77, n. 18, p. 2909, 2000.
- 12 COWBURN, R. P. et al. Single-domain circular nanomagnets. **Physical Review Letters**, v. 83, n. 5, p. 1042, 1999.
- 13 SHINJO, T. et al. Magnetic vortex core observation in circular dots of permalloy. **Science**, v. 289, p. 930, 2000.
- 14 WACHOWIAK, A. et al. Direct Observation of Internal Spin Structure of Magnetic Vortex Cores. **Science**, v. 298, p. 577, 2002.

- 15 MILTAT, J.; THIAVILLE, A. Vortex Cores—Smaller Than Small. **Science**, v. 298, p. 555, 2002.
- 16 LEONEL, S. et al. A model for vortex formation in magnetic nanodot. **Journal of Applied Physics**, v. 102, n. 104311, 2007.
- 17 ROCHA, J. et al. Diagram for vortex formation in quasi-two-dimensional magnetic dots. **Journal of Applied Physics**, v. 107, n. 053903, 2010.
- 18 ROSSLER, U.; BOGDANOV, A.; PFLEIDERER, C. Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals. **Nature Letters**, v. 442, p. 797–801, 2006.
- 19 MUHLBAUER, S. et al. Skyrmion Lattice in a Chiral Magnet. **Science**, v. 323, p. 915–919, 2009.
- 20 PFLEIDERER, C.; ROSCH, A. Condensed-matter physics: Single skyrmions spotted. **Nature**, v. 465, p. 880–881, 2010.
- 21 YU, X. Z. et al. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal. **Nature**, v. 465, p. 901–904, 2010.
- 22 ROMMING, N. et al. Writing and deleting single magnetic skyrmions. **Science**, v. 341, p. 636–639, 2013.
- 23 DUPE, B. et al. Tailoring magnetic skyrmions in ultra-thin transition metal films. **Nature Communications**, v. 5, p. 4030, 2014.
- 24 COWBURN, R. P.; WELLAND, M. E. Room Temperature Magnetic Quantum Cellular Automata. **Science**, v. 287, p. 1466–1468, 2000.
- 25 CHAPMAN, J. N. et al. Direct observation of magnetization reversal processes in micron-sized elements of spin-valve material. **Journal of Applied Physics**, v. 83, n. 5321, 1998.
- 26 HEINRICH, B.; BLAND, J. **Ultrathin Magnetic Structures IV - Applications of Nanomagnetism**. [S.l.]: Springer, 2005.
- 27 WANG, R. F. et al. Artificial ‘spin ice’ in a geometrically frustrated lattice of nanoscale ferromagnetic islands. **Nature**, v. 439, p. 303–306, 2006.
- 28 HANAWA, M. et al. Superconductivity at 1 K in $Cd_2Re_2O_7$. **Physical Review Letters**, v. 87, p. 187001, 2001.
- 29 FRAUENFELDER, H.; WOLYNES, P. G.; AUSTIN, R. H. Biological Physics. **Review of Modern Physics**, v. 71, p. S419, 1999.
- 30 HARREIS, H.; LIKOS, C. N.; LÖWEN, H. Azimuthal Frustration and Bundling in Columnar DNA Aggregates. **Biophysical Journal**, v. 84, p. 3607, 2003.
- 31 RAMIREZ, A. P. Strongly Geometrically Frustrated Magnets. **Annual Review of Materials Research**, v. 24, p. 453, 1994.
- 32 SADOC, J. F.; MOSSERI, R. **Geometrical Frustration**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1999.

- 33 MOESSNER, R. Magnets with strong geometric frustration. **Canadian Journal of Physics**, v. 79, p. 1283, 2001.
- 34 MOESSNER, R.; RAMIREZ, A. P. Geometrical Frustration. **Physics Today**, v. 59, p. 2, 2006.
- 35 WANNIER, G. H. Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net. **Physical Review**, v. 79, p. 357, 1950.
- 36 RAMIREZ, A. P. et al. Zero-point entropy in 'spin ice'. **Nature**, v. 399, p. 333, 1999.
- 37 GIAUQUE, W. F.; ASHLEY, M. F. Molecular Rotation in Ice at 10 K. Free Energy of Formation and Entropy of Water. **Physical Review**, v. 43, p. 81, 1933.
- 38 GIAUQUE, W. F.; STOUT, J. W. The Entropy of Water and the Third Law of Thermodynamics. The Heat Capacity of Ice from 15 to 273 K. **Journal of the American Chemical Society**, v. 58, p. 1144, 1936.
- 39 PAULING, L. The Structure and Entropy of Ice and of Other Crystals with Some Randomness of Atomic Arrangement. **Journal of the American Chemical Society**, v. 57, p. 2680, 1935.
- 40 BERNAL, J. D.; FOWLER, R. H. A Theory of Water and Ionic Solution, with Particular Reference to Hydrogen and Hydroxyl Ions. **The Journal of Chemical Physics**, v. 1, p. 515, 1933.
- 41 BRAMWELL, S. T.; GINGRAS, M. J. P. Spin Ice State in Frustrated Magnetic Pyrochlore Materials. **Science**, v. 294, p. 1495, 2001.
- 42 HARRIS, M. J. et al. Geometrical Frustration in the Ferromagnetic Pyrochlore $H_{0.2}Ti_2O_7$. **Physical Review Letters**, v. 79, p. 2554, 1997.
- 43 HARRIS, M. J. et al. Magnetic structures of highly frustrated pyrochlores. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 177, p. 757, 1998.
- 44 SIDDHARTHAN, R. et al. Ising Pyrochlore Magnets: Low-Temperature Properties, "Ice Rules", and Beyond. **Physical Review Letters**, v. 83, p. 1854, 1999.
- 45 GINGRAS, M. J. P. Spin Ice. **arXiv:cond-mat/0903.2772v1**, 2009.
- 46 CHERN, G. W. et al. Electronic Transport in the Coulomb Phase of the Pyrochlore Spin Ice. **Physical Review Letters**, v. 110, p. 146602, 2013.
- 47 LI, J. et al. Comparing artificial frustrated magnets by tuning the symmetry of nanoscale permalloy arrays. **Physical Review B**, v. 81, p. 092406, 2010.
- 48 WYSIN, G. M. et al. Order and thermalized dynamics in Heisenberg-like square and Kagomé spin ices. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 27, p. 076004, 2015.
- 49 MÖLLER, G.; MOESSNER, R. Artificial Square Ice and Related Dipolar Nanoarrays. **Physical Review Letters**, v. 96, p. 237202, 2006.
- 50 REMHOF, A. et al. Magnetostatic interactions on a square lattice. **Physical Review B**, v. 77, p. 134409, 2008.

- 51 NISOLI, C. et al. Ground State Lost but Degeneracy Found: The Effective Thermodynamics of Artificial Spin Ice. **Physical Review Letters**, v. 98, p. 217203, 2007.
- 52 NISOLI, C. et al. Effective Temperature in an Interacting Vertex System: Theory and Experiment on Artificial Spin Ice. **Physical Review Letters**, v. 105, p. 047205, 2010.
- 53 GOBBI, R. S. **Estudo termodinâmico de gelos de spin em uma geometria do tipo de malha**. Dissertação (Mestrado) — UFV, 2014.
- 54 WANG, R. F. et al. Demagnetization protocols for frustrated interacting nanomagnet arrays. **Journal of Applied Physics**, v. 101, p. 09J104, 2007.
- 55 KE, X. et al. Energy Minimization and ac Demagnetization in a Nanomagnet Array. **Physical Review Letters**, v. 101, p. 037205, 2008.
- 56 PHATAK, C. et al. Magnetic interactions and reversal of artificial square spin ices. **New Journal of Physics**, v. 14, p. 075028, 2012.
- 57 WYSIN, G. M. et al. Dynamics and hysteresis in square lattice artificial spin ice. **New Journal of Physics**, v. 15, p. 045029, 2013.
- 58 SKLENAR, J. et al. Broadband ferromagnetic resonance studies on an artificial square spin-ice island array. **Journal of Applied Physics**, v. 113, p. 17B530, 2013.
- 59 WESTPHALEN, A. et al. Magnetization reversal of microstructured kagome lattices. **Physical Review B**, v. 77, p. 174407, 2008.
- 60 MELLADO, P. et al. Dynamics of Magnetic Charges in Artificial Spin Ice. **Physical Review Letters**, v. 105, p. 187206, 2010.
- 61 RODRIGUES, J. H. **Processo de desmagnetização e histerese de um gelo de spin artificial em uma geometria triangular**. Dissertação (Mestrado) — UFV, 2013.
- 62 MORRISON, M. J.; NELSON, T. R.; NISOLI, C. Unhappy vertices in artificial spin ice: new degeneracies from vertex frustration. **New Journal of Physics**, v. 15, p. 045009, 2013.
- 63 ALDUS, R. J. et al. Ice rule correlations in stuffed spin ice. **New Journal of Physics**, v. 15, p. 013022, 2013.
- 64 EHLERS, G. et al. Low energy spin dynamics in the spin ice $Ho_2Sn_2O_7$. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 24, p. 076005, 2012.
- 65 LAMMERT, P. E.; CRESPI, V. H.; NISOLI, C. Gibbsianizing nonequilibrium dynamics of artificial spin ice and other spin systems. **New Journal of Physics**, v. 14, p. 045009, 2012.
- 66 ARNALDS, U. B. et al. Thermalized ground state of artificial kagome spin ice building blocks. **Applied Physics Letters**, v. 101, n. 112404, 2012.
- 67 ROUGEMAILLE, N. et al. Chiral nature of magnetic monopoles in artificial spin ice. **New Journal of Physics**, v. 15, p. 035026, 2013.
- 68 MÓL, L. A. S. et al. Magnetic monopole and string excitations in two-dimensional spin ice. **Journal of Applied Physics**, v. 106, p. 063913, 2009.

- 69 LADAK, S. et al. Direct observation of magnetic monopole defects in an artificial spin-ice system. **Nature Physics**, v. 6, p. 359, 2010.
- 70 CASTELNOVO, C.; MOESSNER, R.; SONDHI, S. L. Magnetic monopoles in spin ice. **Nature**, v. 451, p. 42, 2008.
- 71 BRAMWELL, S. T. et al. Measurement of the charge and current of magnetic monopoles in spin ice. **Nature**, v. 461, p. 956, 2009.
- 72 MÓL, L. A. S.; MOURA-MELO, W. A.; PEREIRA, A. R. Conditions for free magnetic monopoles in nanoscale square arrays of dipolar spin ice. **Physical Review B**, v. 82, p. 054434, 2010.
- 73 MORGAN, J. P. et al. Thermal ground-state ordering and elementary excitations in artificial magnetic square ice. **Nature Physics**, v. 7, p. 75, 2011.
- 74 PHATAK, C. et al. Nanoscale structure of the magnetic induction at monopole defects in artificial spin-ice lattices. **Physical Review B**, v. 83, p. 174431, 2011.
- 75 SILVA, R. C. et al. Thermodynamics of elementary excitations in artificial magnetic square ice. **New Journal of Physics**, v. 14, p. 014414, 2012.
- 76 SILVA, R. C. **Investigações de excitações magnéticas em gelos de spin bidimensionais**. Dissertação (Mestrado) — UFV, 2012.
- 77 SILVA, R. C. et al. Nambu monopoles interacting with lattice defects in a two-dimensional artificial square spin ice. **Physical Review B**, v. 87, p. 014414, 2013.
- 78 NASCIMENTO, F. S. et al. From confinement to deconfinement of magnetic monopoles in artificial rectangular spin ices. **New Journal of Physics**, v. 14, p. 115019, 2012.
- 79 LADAK, S. et al. Direct observation and control of magnetic monopole defects in an artificial spin-ice material. **New Journal of Physics**, v. 13, p. 063032, 2011.
- 80 MÓL, L. A. S.; PEREIRA, A. R.; MOURA-MELO, W. A. Extending spin ice concepts to another geometry: The artificial triangular spin ice. **Physical Review B**, v. 85, p. 184410, 2012.
- 81 LORETO, R. P. **Proposta para realização de correntes magnéticas em gelos de spin artificiais**. Dissertação (Mestrado) — UFV, 2014.
- 82 LORETO, R. P. et al. Emergence and mobility of monopoles in a unidirectional arrangement of magnetic nanoislands. **Nanotechnology**, v. 26, n. 29, p. 295303, 2015.
- 83 BUCHANAN, K. S. et al. Soliton pair dynamics in patterned ferromagnetic ellipses. **Nature Physics**, v. 1, p. 172, 2005.
- 84 HANKEMEIER, S. et al. Magnetic Ground State of Single and Coupled Permalloy Rectangles. **Physical Review Letters**, v. 103, p. 147204, 2009.
- 85 LI, Y.; WANG, T.; LI, Y. The influence of dipolar interaction on magnetic properties in nanomagnets with different shapes. **Physica Status Solidi**, v. 247, p. 1237, 2010.
- 86 WYSIN, G. M. et al. Magnetic anisotropy of elongated thin ferromagnetic nano-islands for artificial spin ice arrays. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 24, p. 296001, 2012.

- 87 BROWN, G.; NOVOTNY, M. A.; RIKVOLD, P. A. Micromagnetic simulations of thermally activated magnetization reversal of nanoscale magnets. **Journal of Applied Physics**, v. 87, p. 4792, 2000.
- 88 TORRES, L. et al. Micromagnetic study of lithographically defined non-magnetic periodic nanostructures in magnetic thin films. **Physica B**, v. 275, p. 59, 2000.
- 89 BROWN, G.; NOVOTNY, M. A.; RIKVOLD, P. A. Thermal magnetization reversal in arrays of nanoparticles. **Journal of Applied Physics**, v. 89, p. 7588, 2001.
- 90 GUSLIENKO, K. Y. et al. Magnetization reversal due to vortex nucleation, displacement, and annihilation in submicron ferromagnetic dot arrays. **Physical Review B**, v. 65, n. 024414, 2001.
- 91 GREBENSHCHIKOV, Y. B.; USOV, N. A.; PESTCHANYI, K. S. Thickness dependence of magnetization reversal in a soft cylindrical particle. **Journal of Applied Physics**, v. 94, p. 6649, 2003.
- 92 XIAO, Q. F. et al. Dynamics of ultrafast magnetization reversal in submicron elliptical Permalloy thin film elements. **Physical Review B**, v. 73, p. 104425, 2006.
- 93 CHOI, B. C. et al. Ultrafast Magnetization Reversal Dynamics Investigated by Time Domain Imaging. **Physical Review Letters**, v. 86, n. 4, p. 728, 2001.
- 94 GERRITS, T. et al. Ultrafast precessional magnetization reversal by picosecond magnetic field pulse shaping. **Nature**, v. 418, p. 509, 2002.
- 95 GOOLAP, S.; ADEYEYE, A. O.; SINGH, N. Magnetization reversal in diamond-shaped pseudo-spin-valve nanomagnets. **Journal of Applied Physics**, v. 98, p. 084318, 2005.
- 96 ADEYEYE, A. O.; SINGH, N.; GOOLAP, S. Spin state evolution and magnetic anisotropy of elongated Ni₈₀Fe₂₀ nanorings. **Journal of Applied Physics**, v. 98, p. 094301, 2005.
- 97 WEI, Z.-H. et al. Magnetization processes in single domain elliptical permalloy thin films. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 272, p. e563–e564, 2004.
- 98 VAVASSORI, P. et al. Magnetization reversal via single and double vortex states in submicron Permalloy ellipses. **Physical Review B**, v. 69, p. 214404, 2004.
- 99 MONTONCELLO, F. et al. Soft spin waves and magnetization reversal in elliptical Permalloy nanodots: Experiments and dynamical matrix results. **Physical Review B**, v. 76, p. 024426, 2007.
- 100 WANG, T. et al. Magnetization reversal of Co/Cu/Co elliptical elements studied by in-field magnetic force microscope and micromagnetic simulation. **Journal of Applied Physics**, v. 103, p. 093910, 2008.
- 101 MONTONCELLO, F. et al. Dynamic origin of first and second order phase transitions in magnetization reversal of elliptical nanodots. **Physical Review B**, v. 77, p. 214402, 2008.
- 102 CASTILLO-SEPÚLVEDA, S. et al. Mechanisms of magnetization reversal in stadium-shaped particles. **Journal of Applied Physics**, v. 112, p. 083906, 2012.

- 103 CORONA, R. M.; ALTBIR, D.; ESCRIG, J. Magnetic properties of elliptical and stadium-shaped nanoparticles: Effect of the shape anisotropy. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 324, p. 3824, 2012.
- 104 SCHNEIDER, M. et al. Stability of magnetic vortices in flat submicron permalloy cylinders. **Journal of Applied Physics**, v. 92, p. 1466, 2002.
- 105 BUCHANAN, K. S. et al. Vortex dynamics in patterned ferromagnetic ellipses. **Journal of Applied Physics**, v. 99, p. 08C707, 2006.
- 106 ROCHA, J. C. S. et al. Diagram for vortex formation in quasi-two-dimensional magnetic dots. **Journal of Applied Physics**, v. 107, p. 053903, 2010.
- 107 ZHANG, W. et al. Scaling analysis and application: Phase diagram of magnetic nanorings and elliptical nanoparticles. **Physical Review B**, v. 77, n. 144428, 2008.
- 108 JÚNIOR, D. S. V. et al. Ground state study of the thin ferromagnetic nano-islands for artificial spin ice arrays. **Journal of Applied Physics**, v. 116, p. 093901, 2014.
- 109 ASHCROFT, N.; MERMIM, N. **Solid State Physics**. College edition. [S.l.]: Saunders College Publishers, 1976.
- 110 REITZ, J.; MILFORD, F. J. **Foundations of Electromagnetic Theory**. [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1960.
- 111 JACKSON, J. D. **Classical Electrodynamics**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1962.
- 112 GETZLAFF, M. **Fundamentals of Magnetism**. [S.l.]: Springer, 2008.
- 113 SALINAS, S. **Introdução à Física Estatística**. [S.l.]: EDUSP, 1999.
- 114 TOSCANO, D. **Estudo via simulação computacional da dinâmica da magnetização em nanomagnetos contendo uma distribuição de impurezas magnéticas**. Tese (Doutorado) — UFJF, 2015.
- 115 DATTA GUPTA, S. **A paradigm called magnetism**. [S.l.]: World Scientific, 2008.
- 116 LIMA, A. B. **Simulação de Monte Carlo e percolação no modelo XY completamente frustrado**. Tese (Doutorado) — UFMG, 2005.
- 117 MÓL, L. A. S. **Transição de fase em modelos magnéticos bi-dimensionais com interações dipolares**. Tese (Doutorado) — UFMG, 2009.
- 118 GRIFFITHS, D. J. **Introduction to Electrodynamics**. [S.l.]: Prentice Hall, 2008.
- 119 EISBERG, R.; RESNICK, R. **Física Quântica**. [S.l.]: Campus, 1979.
- 120 SAKURAY, J. **Modern Quantum Mechanics**. [S.l.]: Addison-Wesley, 1994.
- 121 LANDAU, L.; LIFSHITS, E. ON THE THEORY OF THE DISPERSION OF MAGNETIC PERMEABILITY IN FERROMAGNETIC BODIES. **Phys. Zeitsch**, v. 8, p. 153–169, 1935.
- 122 GILBERT, T. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 40, n. 6, p. 3443–3449, 2004.

- 123 GUIMARAES, A. P. **Principles of Nanomagnetism**. [S.l.]: Springer, 2009.
- 124 TOSCANO, D. et al. Dynamics of the vortex core in magnetic nanodisks with a ring of magnetic impurities. **Applied Physics Letters**, v. 101, n. 252402, 2012.
- 125 FERREIRA, V. A. et al. Transverse domain wall scattering and pinning by magnetic impurities in magnetic nanowires. **Journal of Applied Physics**, v. 114, n. 013907, 2013.
- 126 DIAS, R. A. et al. Molecular dynamics simulation of Lorentz force microscopy in magnetic nano-disks. **Applied Physics Letters**, v. 102, n. 172405, 2013.
- 127 TOSCANO, D. et al. Position of the transverse domain wall controlled by magnetic impurities in rectangular magnetic nanowires. **Journal of Applied Physics**, v. 115, n. 163906, 2014.
- 128 KETRZYN, J. W. **Non-Local / Local Gilbert Damping in Nickel and Permalloy Thin Films**. Tese (Doutorado) — Georg-August-Universität zu Göttingen, 2007.
- 129 WYSIN, G. M. Vortex-in-nanodot potentials in thin circular magnetic dots. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 22, n. 376002, 2010.
- 130 MAKAROV, A. **Modeling of Emerging Resistive Switching Based Memory Cells**. Tese (Doutorado) — Technischen Universität Wien, 2014.
- 131 ARAUJO, C. I. L. et al. Magnetic vortex crystal formation in the antidot complement of square artificial spin ice. **Applied Physics Letters**, v. 104, n. 092402, 2014.
- 132 ZHANG, H. et al. Azimutal Spin Wave Modes Excited in an Elliptical Nanomagnet With Vortex Pair States. **IEEE Transactions on Magnetics**, v. 46, p. 1675, 2010.
- 133 BERTOTTI, G. **Hysteresis in Magnetism for Physicists, Materials Scientists and Engineers**. [S.l.]: Academic Press, 1998.
- 134 TOSCANO, D. **Estudo via simulação computacional da formação de vórtice e do modo girotrópico em nanodiscos magnéticos**. Dissertação (Mestrado) — UFJF, fev. 2011.
- 135 FERREIRA, V. A. **Estudo da dinâmica da parede de domínio transversal em nanofios magnéticos**. Tese (Doutorado) — UFJF, 2013.
- 136 KOONIN, S. E. **Computational Physics**. 1. ed. [S.l.]: The Benjamin/Cummings, 1986.
- 137 BOYCE, W.; DIPRIMA, R. **Elementary differential equations and boundary value problems**. 6. ed. [S.l.]: John Willey & Sons, 1997.