

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

Evandro Bastos dos Santos

**Exchange-Bias em Nanoestruturas Magnéticas Usando o
Modelo de Heisenberg Anisotrópico**

Juiz de Fora
Novembro, 2011

Evandro Bastos dos Santos

Exchange-Bias em Nanoestruturas Magnéticas Usando o Modelo de Heisenberg Anisotrópico

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

Orientador: Prof. Dr. Pablo Z. Coura

Juiz de Fora

Novembro, 2011

Aos meus pais,
Alberto Geraldo Faria dos Santos
Iane Esther Bastos dos Santos

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus e a meus Pais, Alberto e Iane, ao meu irmão Leandro, aos meus avós, Eny e Arlete, aos meus primos e tios.

À minha namorada Michele, que muito me apoiou em todas as decisões, vivenciei comigo importantes momentos desse trabalho e tornou minha vida cada dia mais feliz e inesquecível.

Ao meu Orientador Prof. Pablo Zimmerman, pela paciência, dedicação e ajuda, durante quase 4 anos entre iniciação científica e mestrado. Sem ele eu não conseguiria chegar até aqui e, hoje, eu sei que somos grandes amigos.

Ao Prof. Rodrigo, pela grande e inestimável ajuda durante tanto tempo.

Aos Prof. Sidiney e Sato, que sempre estão prontos para ajudar e foram de grande contribuição para a conclusão deste trabalho.

Aos demais professores do PPG Física.

À coordenação do programa, representada pelo Prof. Sócrates e a Secretaria representada pelo grande Domingos.

Aos meus grandes amigos de pós-graduação: Tiago Rochedo, Adriano, Rogério, Thiago, Sebastião, Danilo, Denilson, Alberto, Baltazar, Elaine, Filipe Salles, Alisson, Alysson, Amancio, Felipe Pedrosa, Vahid, Mateus, Dante, Luciana, Vanessa, Alexandre, Cleber, Cristiano, Fabiana, Felix, Leandro, Geraldo, Marcelino, Douglas, Rizzuti, Poliane, Lyane, Felipe Lara, Marcelo, Rodrigo, Raphael Tagliatti, Rafael, Wesley, Everton, Jackson, Paulo, Rodrigo Paçoquinha, Leonarde, Zé Henrique, Erichardson, Alan, Jeferson, Monalisa e Gabriel.

Agradeço aos amigos que estiveram comigo durante os bons momentos na UFJF, onde me diverti bastante.

O meu muito obrigado também à UFJF, pela estrutura.

À CAPES pelo apoio financeiro, através da bolsa.

Nunca deixe que lhe digam que não vale a pena
acreditar nos sonhos que se tem
ou que os seus planos nunca vão dar certo
ou que você nunca vai ser alguém.

Renato Russo

RESUMO

Nas últimas décadas, muitas pesquisas em filmes finos magnéticos foram impulsionadas por várias propriedades interessantes relacionados com interfaces que envolvem os materiais magnéticos. A chave para a compreensão dessas estruturas magnéticas é o conhecimento sobre as energias básicas envolvidas. Há três conceitos básicos de energia: energias dipolar, de troca e anisotropia. O primeiro controla a ordenação magnética, o segundo controla a forma das estruturas magnéticas e este último controla a orientação preferencial. Ambas são descrições fenomenológicas de correlações fundamentais e energias associadas com a estrutura eletrônica e cristalina dos materiais.

Um dos efeitos mais importantes estudados é o estudo sobre o Exchange-Bias (EB), descoberto em 1956. O efeito EB ocorre devido ao acoplamento de troca entre camadas ferromagnéticas (FM) e antiferromagnéticas (AFM). Sua característica básica é o desvio horizontal do ciclo de histerese. Várias propriedades interessantes são obtidos a partir do ciclo de histerese como a magnetização remanescente, que é uma magnetização residual no material quando o campo de alinhamento é reduzido a zero, o campo coercivo necessário para cancelar a magnetização residual e o campo de saturação, que é o campo necessário para forçar todos os momentos magnéticos da amostra a apontar na direção do campo externo.

Nos vários modelos apresentados, pode-se prever que o campo de Exchange-Bias depende fortemente dos valores de J_{int} , mas esses valores para o campo de Exchange-Bias são muitas ordens de grandeza maior do que os resultados experimentais.

Neste trabalho apresentamos um estudo do comportamento magnético de uma camada FM colocada sobre a face (100) de um substrato AFM descompensado, ambos com uma estrutura de BCC. Para estudar esses efeitos realizamos simulações de dinâmica de spins.

ABSTRACT

In the last decades much work in thin magnetic films has been motivated by several interesting properties associated with interfaces involving magnetic materials. The key to the understand these magnetic structures is the knowledge about the basic energies involved. There are three basic energy concepts: exchange, dipolar and anisotropy energies. The first controls the magnetic ordering, the second controls the form of the magnetic structures and the latter controls the preferred orientation. Both are phenomenological descriptions of fundamental correlations and energies associated with the electronic and crystalline structure of the material.

One of the most important effects studied is the study about Exchange-Bias (EB) effect, discovered in 1956 . The EB effect occurs due to exchange coupling between ferromagnetic (FM) and antiferromagnetic (AFM) layers. Its signature is a shifted hysteresis loop dislocated from zero field. The shift is attributed to the frozen in global unidirectional anisotropy of the system. Several interesting properties are obtained from hysteresis loop as the remanent magnetization which is a residual magnetization in the material when the aligning field is reduced to zero, the coercive field required for cancelling the residual magnetization and the saturation field which is the field required for forcing all magnetic moments of the sample to point in the direction of the external field.

In several models presented in recent works, it is predicted that the exchange bias field depends strongly of the values of J_{int} , but these values for the exchange bias field is many orders of magnitude larger than the experimental results.

In this work we study the magnetic behavior of a FM layer put over the (100) face of an uncompensated AFM substrate both with a BCC structure. To study these effects we performed spin dynamic simulations.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 Esquema de uma válvula de spin, a interface entre a camada AFM e a FM presa apresenta Exchange-Bias.	15
Figura 1.2 Ilustração esquemática simplificada de uma cabeça de leitura de um disco rígido baseada em uma válvula de spin dupla	15
Figura 2.1 Material Paramagnético, na presença de um campo H e uma temperatura $T > 0$. representa o momento magnético do material.	17
Figura 2.2 Material Ferromagnético. representa o momento magnético do material. . .	18
Figura 2.3 Material Antiferromagnético. representa o momento magnético do material. . .	19
Figura 2.4 Interação entre dois momentos magnéticos	20
Figura 3.1 Curva de Histerese Magnética $M \times H_{ext}$	30
Figura 3.2 Sistema em que temos um material FM sobre um substrato AFM. Inicialmente desordenado, e fica ordenado após a aplicação do campo de cooling.	32
Figura 3.3 Procedimento que mostra como o congelamento dos spins AFM causam o desvio horizontal na curva de histerese. [17]	33
Figura 3.4 Visão superior do material AFM. Na figura (a), o temos uma superfície compensada, magnetização líquida na camada é nula. Na figura (b), a superfície é descompensada, magnetização líquida na camada é não-nula.	34
Figura 3.5 Curvas de histerese, torque e energia para partículas convencionais de cobalto [23]. Histerese simétrica e com centro em zero.	37
Figura 3.6 Curvas de torque e energia para partículas de cobalto acopladas a óxido de	

cobalto [23]. Histerese não é simétrica com o centro fora do ponto zero.	38
Figura 3.7 Esquema dos momentos magnéticos de cada material e os eixos de anisotropia [17].	39
Figura 3.8 Esquema dos momentos magnéticos de cada material e os eixos de anisotropia [17].	42
Figura 3.9 Esquema dos momentos magnéticos de cada material e os eixos de anisotropia, para o nosso sistema simulado.	42
Figura 3.10 Rugosidade no acoplamento AFM/FM. A linha tracejada vermelha indica a separação entre os materiais FM (acima) e AFM (abaixo), enquanto a linha azul indica os sítios com as rugosidades.	45
Figura 4.1 Representação de uma rede BCC	47
Figura 4.2 Representação do sistema. A figura mostra a camada FM colocada sobre um substrato AFM, e uma região (<i>int</i>) de interação entre elas.	54
Figura 4.3 Configuração de eixo-fácil (a) e plano-fácil (b).	55
Figura 4.4 Energia em função do ângulo θ entre o campo externo e o eixo-z, $J_{int} = -0.5$	56
Figura 4.5 Efeito do EB como função de J_{int} para o modelo isotrópico com 2 camadas FM	58
Figura 4.6 Efeito do EB como função de J_{int} para o modelo isotrópico com 6 camadas FM	59
Figura 4.7 Histereses da Magnetização \vec{M} em função do campo aplicado \vec{B}_{ext} para diversos valores de J_{int} para o modelo isotrópico com 2 camadas FM	60
Figura 4.8 Histereses da Magnetização \vec{M} em função do campo aplicado \vec{B}_{ext} para diversos valores de J_{int} para o modelo isotrópico com 6 camadas FM	60
Figura 4.9 Campo de Exchange-Bias, como função do parâmetro J_{int} , para diversos valores de λ_y , quando $\lambda_x = 1$ e $\lambda_z = 0$	61
Figura 4.10 Campo de Exchange-Bias, como função do parâmetro J_{int} , para diversos valores	

de λ_z , quando $\lambda_x = 1$ e $\lambda_y = 0$	62
Figura 4.11 Campo de coercivo, como função do parâmetro J_{int} , para diversos valores de λ_y , quando $\lambda_x = 1$ e $\lambda_z = 0$	63
Figura 4.12 Campo de coercivo, como função do parâmetro J_{int} , para diversos valores de λ_z , quando $\lambda_x = 1$ e $\lambda_y = 0$	63
Figura 4.13 Ciclos do histerese para diversos λ_y quando são mantidos constantes $J_{int} = -0.5$, $\lambda_x = 1$ e $\lambda_z = 0$	64
Figura 4.14 Ciclos do histerese para diversos λ_z quando são mantidos constantes $J_{int} = -0.5$, $\lambda_x = 1$ e $\lambda_y = 0$	65
Figura 4.15 Esquema da magnetização nas direções x,y,z . Aqui, definimos isotrópico como sendo $\lambda_x = \lambda_y = 1, \lambda_z = 0$ e anisotrópico para $\lambda_x = 1, \lambda_y = 2, \lambda_z = 0$	66
Figura 4.16 Esquema da magnetização nas direções x,y,z . Aqui, definimos isotrópico como sendo $\lambda_x = \lambda_z = 1, \lambda_y = 0$ e anisotrópico para $\lambda_x = 1, \lambda_y = 0, \lambda_z = 2$	67
Figura 4.17 Acoplamento perpendicular entre as camadas da interface, a camada FM tende a girar escolhendo esse caminho. A coloração vermelha indica os spins orientados totalmente na direção y	68
Figura 4.18 Acoplamento perpendicular entre as camadas da interface, a camada FM tende a girar escolhendo esse caminho. A coloração vermelha indica os spins orientados totalmente na direção z	69
Figura 4.19 Variação do campo de exchange-bias como função do ângulo entre o eixo o campo aplicado e o eixo de anisotropia, no plano da amostra. $\lambda_x = 1, \lambda_y = 1$ e $\lambda_z = 1$, para 2 camadas FM. A função ajustada foi $H_{eb} = -0.8460 \cos(\phi)$	72
Figura 4.20 Variação do campo de exchange-bias e do campo coercivo como função do ângulo entre o eixo o campo aplicado e o eixo de anisotropia, no plano da amostra. $\lambda_x = 1, \lambda_y = 1$ e $\lambda_z = 1$, isotrópico, para 6 camadas FM.	73
Figura 4.21 Variação do campo de exchange-bias e do campo coercivo como função do	

<p>ângulo entre o eixo o campo aplicado e o eixo de anisotropia, no plano da amostra. $\lambda_x = 1, \lambda_y = 1$ e $\lambda_z = 1$, isotrópico, para 12 camadas FM.</p>	74
<p>Figura 4.22Variação do campo de exchange-bias e do campo coercivo como função do ângulo entre o eixo o campo aplicado e o eixo de anisotropia, no plano da amostra. $\lambda_x = 1, \lambda_y = 2$ e $\lambda_z = 0$, para 6 camadas FM.</p>	75
<p>Figura 4.23Variação do campo de exchange-bias e do campo coercivo como função do ângulo entre o eixo o campo aplicado e o eixo de anisotropia, no plano da amostra. $\lambda_x = 1, \lambda_y = 2$ e $\lambda_z = 0$, para 12 camadas FM.</p>	76
<p>Figura A.1Esquema do algoritimo utilizado para a dinâmica de spins</p>	78
<p>Figura B.1Movimento de precessão do momento magnético de um elétron em relação a um campo magnético constante. [34]</p>	79
<p>Figura B.2O torque de precessão e o torque de amortecimento agindo sobre o momento magnético de um elétron num campo magnético constante. [34]</p>	80
<p>Figura C.1Energia x Tempo calculado por Runge-Kutta, para um passo $h = 10^{-4}$</p>	85
<p>Figura C.2Energia x Tempo calculado por Preditor-Corretorpara um passo $h = 10^{-4}$</p>	85

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	CONCEITOS BÁSICOS EM MAGNETISMO	16
2.1	MAGNETIZAÇÃO	16
2.1.1	Susceptibilidade Magnética	16
2.2	MATERIAIS MAGNÉTICOS	17
2.2.1	Paramagnetos	17
2.2.2	Ferromagnetos (FM)	18
2.2.3	Antiferromagnetos (AFM)	18
2.3	ENERGIAS BÁSICAS EM MAGNETISMO	19
2.3.1	A Interação Dipolar Clássica	19
2.3.2	A Interação Zeeman	20
2.3.3	Modelo de Heisenberg (Interação de Troca)	21
3	EXCHANGE-BIAS EM NANOESTRUTURAS MAGNÉTICAS	30
3.1	HISTERESE MAGNÉTICA	30
3.2	EXCHANGE-BIAS	31
3.2.1	Congelamento - Anisotropia Uniaxial	32
3.2.2	Histerese	33
3.2.3	A Interface AFM-FM	34

3.2.4	Modelos Teóricos	35
	O Modelo Ideal de Meiklejohn e Bean	36
	O Modelo Realístico de Meiklejohn e Bean	41
	Modelos de Interfaces Aleatórias	44
4	MODELO ANISTRÓPICO NA INTERFACE AFM-FM	47
4.1	MODELO ISOTRÓPICO E ANISOTRÓPICO DE HEISENBERG	47
4.2	HAMILTONIANA	48
4.3	SIMULAÇÕES EM NANOMAGNETISMO	49
4.3.1	Dinâmica de Spins	50
4.4	MODELO ANISTRÓPICO NA INTERFACE AFM-FM	54
4.5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	55
4.5.1	Modelo Isotrópico	56
4.5.2	Modelo Anisotrópico	61
4.6	DEPENDÊNCIA ANGULAR DO EXCHANGE-BIAS	70
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	77
	APÊNDICE A – PROGRAMA UTILIZADO	78
	APÊNDICE B – EQUAÇÕES DE MOVIMENTO	79
B.1	A EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITS-GILBERT (LLG)	79
	APÊNDICE C – MÉTODOS NUMÉRICOS	82
C.1	O MÉTODO RUNGE-KUTTA	82

C.2	O MÉTODO PREDITOR-CORRETOR	84
	REFERÊNCIAS	86

1 INTRODUÇÃO

Os efeitos magnéticos estão no nosso dia-a-dia e a sua aplicação se torna cada dia mais importante, como pode ser visto em armazenamento de dados, discos rígidos e até em situações mais avançadas, como por exemplo, em medicina. A importância dos materiais magnéticos para a produção de componentes tecnológicos é um tema muito atual e tornou-se fonte de muitas pesquisas e discussões. O desenvolvimento de novos materiais ocorre devido à necessidade de desenvolver e aperfeiçoar novas tecnologias.

Não apenas em novas aplicações, mas também a possibilidade de poder aumentar a capacidade e velocidade dos dispositivos incentivam a produção de materiais magnéticos nanoestruturados, para isso existe a necessidade de se fazer pesquisa em simulação, em que somos capazes de enxergar fenômenos limitados por outras técnicas de pesquisa.

Existem diversos fenômenos interessantes em magnetismo e que estão sendo aplicados em tecnologia atual, por exemplo a magnetoresistência gigante, tunelamento magnético, acoplamento bicamada e ondas de spin.

A motivação desse trabalho é poder entender e controlar o mecanismo do Exchange-Bias, pois existem diversos modelos teóricos sobre o assunto e cada um busca explicar um aspecto diferente, colocando defeitos, interações, impurezas. Essa dificuldade surge pois em todos esses modelos o campo de Exchange-Bias encontrado é muito maior que o campo encontrado experimentalmente. Nosso principal objetivo é entender o por que desse fato e tentar solucioná-lo.

O Exchange-Bias foi inicialmente utilizado para estabilizar a magnetização de camadas ferromagnéticas moles em cabeças de leitura baseadas em magnetoresistência anisotrópica (AMR) [1]. Sem a estabilização, o estado de domínio magnético da cabeça de leitura pode

ser imprevisível, levando a problemas de confiabilidade.

Atualmente [1] o Exchange-Bias é usado para fixar a camada de referência mais dura na cabeça de leitura da válvula de spin (figura 1.1) e circuitos de memória MRAM que utilizam a magnetorresistência gigante ou efeito de tunelamento magnético. Da mesma forma as mídias mais avançadas são acopladas antiferromagneticamente, fazendo uso de Exchange-Bias para aumentar [1] a estabilidade de pequenas partículas magnéticas cujo comportamento de outra forma seriam superparamagnético.

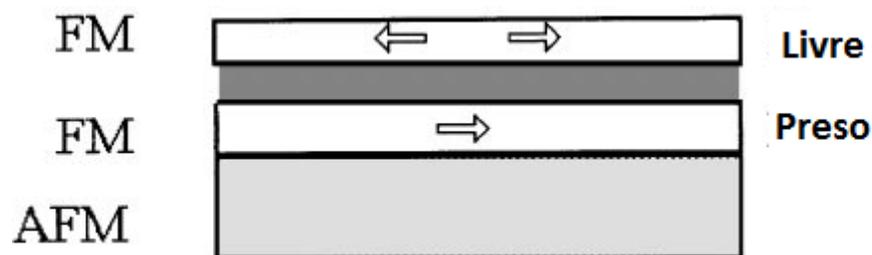


Figura 1.1: Esquema de uma válvula de spin, a interface entre a camada AFM e a FM presa apresenta Exchange-Bias.

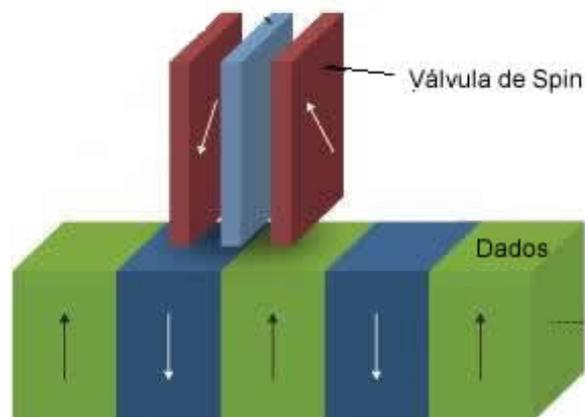


Figura 1.2: Ilustração esquemática simplificada de uma cabeça de leitura de um disco rígido baseada em uma válvula de spin dupla .

2 CONCEITOS BÁSICOS EM MAGNETISMO

Para auxiliar o nosso estudo sobre Exchange-Bias, vamos fazer uma rápida revisão de alguns conceitos básicos em magnetismo.

2.1 MAGNETIZAÇÃO

Magnetização é a medida física dos materiais magnéticos que é capaz de nos informar sobre o ordenamento dos momentos magnéticos do material. Esse ordenamento pode ser devido à interação com um campo externo (interação de Zeeman), interação dipolar clássica ou a interação entre os momentos vizinhos (interação de troca). A magnetização de um material está diretamente ligada à resposta do material ao campo externo, definida como Susceptibilidade Magnética [2].

2.1.1 Susceptibilidade Magnética

Nos materiais magnéticos, sob ação de um campo, ocorre uma resposta da magnetização ao campo, conhecido como susceptibilidade magnética. Para a maioria dos materiais essa resposta impõe uma dependência linear da magnetização com o campo aplicado:

$$\vec{M} = \chi \vec{H} \quad (2.1.1)$$

em que, χ é a susceptibilidade magnética (adimensional) do material. A resposta ao campo pode ser no mesmo sentido do campo (materiais paramagnéticos) ou em sentido contrário ao

campo (materiais diamagnéticos). Essa relação é válida para campos fracos, uma vez que existe um valor de saturação para a magnetização do material.

2.2 MATERIAIS MAGNÉTICOS

Existem alguns materiais na natureza que, mesmo na ausência de campos magnéticos externos, possuem uma magnetização espontânea diferente de zero à temperatura ambiente. Vamos agora abordar os diferentes tipos de materiais magnéticos, que possuem ou não magnetização espontânea. A origem dessa magnetização espontânea será explicada mais à frente.

2.2.1 Paramagnetos

Os materiais paramagnéticos são materiais que não apresentam nenhum tipo de ordenamento magnético espontâneo.

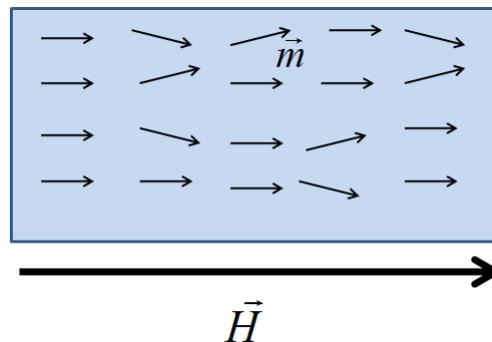


Figura 2.1: Material Paramagnético, na presença de um campo H e uma temperatura $T > 0$.
representa o momento magnético do material.

Os momentos magnéticos permanecem desorientados e se orientam apenas na presença de um campo magnético externo. Em caso de desligamento do campo magnético os momentos perdem o alinhamento e a magnetização do material se torna novamente nula.

2.2.2 Ferromagnetos (FM)

Estes materiais se caracterizam por ter uma magnetização espontânea, ordenamento magnético, abaixo de uma temperatura T_c , conhecida como temperatura de Curie, nesta temperatura o ferromagneto muda de fase, deixando a fase ferromagnética para a fase paramagnética, e a partir de então se comporta como um paramagneto. Isto ocorre porque existe uma interação entre os momentos magnéticos que os ordena direcionalmente resultando em um momento magnético total não nulo. Esta interação será vista mais à frente quando for discutido o modelo de Heisenberg.

Ao se aplicar um campo magnético externo, os momentos se alinham rapidamente de forma paralela ao campo e mesmo que o campo seja desligado os momentos continuarão nessa orientação.

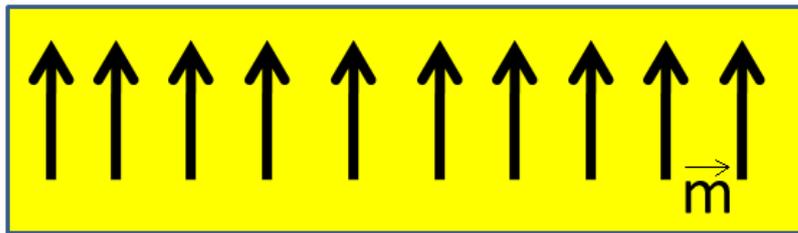


Figura 2.2: Material Ferromagnético. representa o momento magnético do material.

Em amostras macroscópicas, materiais ferromagnéticos nem sempre apresentam momento magnético total não-nulo. Isso existe devido a criação de domínios magnéticos.

São exemplos ferro, gadolínio, níquel e cobalto.

2.2.3 Antiferromagnetos (AFM)

Assim como os materiais ferromagnéticos, os materiais antiferromagnéticos apresentam um certo ordenamento magnético, abaixo de uma temperatura T_n , conhecida como temperatura de Neél, nesta temperatura o antiferromagneto muda de fase, deixando a fase antiferromagnética para a fase paramagnética, e a partir de então se comporta como um paramagneto. Diferentemente

dos ferromagnetos, os antiferromagnetos possuem um ordenamento antiparalelo, tornando o momento magnético total nulo.

Na presença de um campo externo o antiferromagneto pode se alinhar na direção do campo e manter os momentos magnéticos antiparalelos entre si ou, devido à um campo magnético muito forte, se alinham na direção do campo e os momentos magnéticos ficam paralelos entre si, como num ferromagneto.

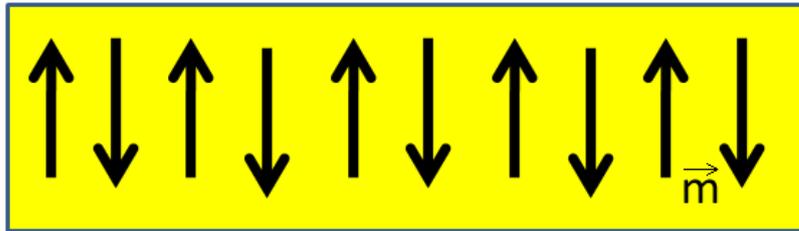


Figura 2.3: Material Antiferromagnético. representa o momento magnético do material.

Os antiferromagnetos, podem ser divididos em sub-redes cujo momento magnético seja não nulo, por exemplo na figura 2.3 temos uma subrede para os momentos *up* e uma para os momentos *down*.

2.3 ENERGIAS BÁSICAS EM MAGNETISMO

Vamos, a seguir, apresentar os três tipos básicos de energia envolvidos em materiais magnéticos. Dipolar, Zeeman e Troca.

2.3.1 A Interação Dipolar Clássica

Do eletromagnetismo clássico é conhecido que quando expandimos o campo magnético em multipolos, encontramos [3] que o termo de dipolo, devido à um momento magnético $\vec{\mu}$ é dado por:

$$\vec{B}_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3\hat{r}(\hat{r} \cdot \vec{\mu}) - \vec{\mu}}{r^3} \right] \quad (2.3.1)$$

Podemos escrever, a interação de um momento $\vec{\mu}_1$ e $\vec{\mu}_2$, como:

$$E_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2 - 3(\vec{\mu}_1 \cdot \hat{r})(\vec{\mu}_2 \cdot \hat{r})] \quad (2.3.2)$$

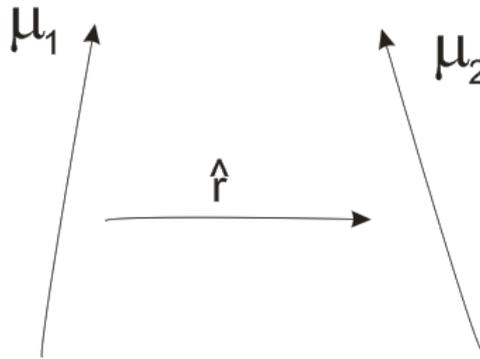


Figura 2.4: Interação entre dois momentos magnéticos

Essa interação dipolar é extremamente importante quando tratamos sistemas finitos, quando as condições na borda influenciam o sistema. Esse termo de energia dipolar faz com que os momentos magnéticos do material se alinhem à borda e como pode ser verificado é uma interação de longo alcance, diferentemente da interação de troca que veremos mais à frente.

2.3.2 A Interação Zeeman

A energia devido à interação de um momento magnético $\vec{\mu}$ com um campo externo $\vec{H}_{ext} = \frac{\vec{B}_{ext}}{\mu_0}$ é conhecida como interação Zeeman [3], e é definida por:

$$E_z = -\mu_0 \vec{\mu} \cdot \vec{H}_{ext} \quad (2.3.3)$$

em que, μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo. Então, com uma análise simples, vemos

que para que a energia seja mínima existe a necessidade de alinhamento paralelo dos vetores $\vec{\mu}$ e \vec{H}_{ext} . Tal condição de minimização é muito importante em nossos estudos, pois a saturação da magnetização de uma material irá ocorrer quando todos os momentos magnéticos estiverem alinhados em uma mesma direção. Para vários momentos magnéticos $\vec{\mu}_i$, temos:

$$E_z = -\mu_0 \sum_i \vec{\mu}_i \cdot \vec{H}_{ext} \quad (2.3.4)$$

2.3.3 Modelo de Heisenberg (Interação de Troca)

O modelo de Heisenberg é uma aproximação para a explicação da interação entre os momentos magnéticos vizinhos que resultam na magnetização espontânea de ferromagnetos e antiferromagnetos.

Heisenberg mostrou, em 1928, que esse campo interno em um material magnético tem origem quântica na interação entre spins de átomos vizinhos. \vec{H}_{ex} é conhecido como campo de troca, devido à interação de troca entre os spins. Correspondentemente temos o campo magnético total no material, \vec{B}_{ex} , através da relação [3].

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) \quad (2.3.5)$$

Como sabemos que na temperatura $T = T_c$ (Temperatura de Curie) é o ponto crítico para o alinhamento ferromagnético, vamos fazer uma análise da ordem de grandeza de \vec{B}_{ex} comparando com a energia térmica no ponto crítico T_c , para isso, vamos lembrar que da termodinâmica sabemos que a energia livre é dada por:

$$F = U - TS \quad (2.3.6)$$

em que, U é a energia interna, T a temperatura e S a entropia. No equilíbrio temos que condição de que F é mínima. Considerando um material ferromagnético, a uma temperatura T , temos

que enquanto o campo externo, \vec{B}_{ex} , tenta ordenar o sistema, minimizando a energia interna, U , a temperatura, T , tenta desordenar o sistema, maximizando a entropia, S .

Temos que para $T < T_c$ o sistema está ordenado, então a energia magnética é maior que a energia térmica. Para $T > T_c$, o sistema se desordena e a energia térmica é maior que energia magnética. Então podemos estimar o valor de \vec{B}_{ex} , pela seguinte relação, quando $T = T_c$:

$$K_B T_c = \mu_B B_{ex} \quad (2.3.7)$$

$K_B T_c$ é a energia térmica e $\mu_B B_{ex}$ é a energia magnética de um momento magnético de modulo μ_B sob a influência de um campo B_{ex} . Conhecendo os valores experimentais de T_c [4], e das constantes K_B [5] e μ_B [3], podemos então, calcular o valor de B_{ex} . Temos como exemplo:

- Fe: $T_c = 1043K \rightarrow B_{ex} = 1552,79$ Tesla
- Co: $T_c = 1393K \rightarrow B_{ex} = 2073,86$ Tesla
- Ni: $T_c = 631K \rightarrow B_{ex} = 939,42$ Tesla

Observando esses valores, vemos que estão, muito acima dos valores de campo produzidos em laboratório ($B \approx 10T$). Podemos também fazer uma análise para mostrar que B_{ex} não pode ter origem na interação dipolar clássica.

Vamos considerar, novamente, dois momentos magnéticos μ_1 e μ_2 , cujo a interação entre eles é, do tipo dipolar clássica, dada por [3]:

$$E = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2 - 3(\vec{\mu}_1 \cdot \hat{r})(\vec{\mu}_2 \cdot \hat{r})] \quad (2.3.8)$$

Podemos escrever a energia de interação de um momento μ_i com varios momentos μ_j , separados por uma distância r_{ij} , como:

$$E^{(i)} = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_j \left[\frac{\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.3.9)$$

Para temperaturas abaixo da temperatura crítica, temos os momentos emparelhados. E somando a expressão 2.3.9, até os 4 primeiros vizinhos, considerando que os momentos magnéticos têm módulo μ_B e $r_{ij} = 2$ (primeiros vizinhos), temos que a energia para um momento μ_i :

$$E^{(i)} = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{\pi r_{ij}^3} = 4,2 \times 10^{-24} J \quad (2.3.10)$$

como $E = \mu_B B_{ex}^D$, podemos encontrar o valor de B_{ex}^D .

$$B_{ex}^D = \frac{E}{\mu_B} = \frac{4,2 \times 10^{-24} J}{9,27 \times 10^{-24} J/T} \quad (2.3.11)$$

$$B_{ex}^D = 0,45T \quad (2.3.12)$$

comparando com o valor de B_{ex} encontrado anteriormente, para Fe, Ni e Co, vemos que $B_{ex}^D \ll B_{ex}$. Desse modo percebemos que a interação dipolar clássica não é suficiente para explicar o ordenamento magnético em um ferromagneto. Então devemos buscar essa explicação na mecânica quântica.

Vamos considerar um exemplo de um sistema de dois elétrons que interagem via potencial coulombiano:

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad (2.3.13)$$

Nesse sistema existem quatro estados possíveis de spin, onde cada estado é representado pela combinação de spin para cima ou para baixo de cada elétron. São os quatros estados desse sistema: $|\uparrow\uparrow\rangle$; $|\uparrow\downarrow\rangle$; $|\downarrow\uparrow\rangle$; $|\downarrow\downarrow\rangle$;

Podemos representar um estado de spin como função dos números quânticos $|S, m_s\rangle$, em que S é o spin total do sistema e pode, nesse exemplo, assumir valores 0 ou 1, m_s assume valores entre $-S$ e $+S$. Para $S = 0$, $-S \leq m_s \leq +S$, logo $m_s = 0$, portanto apenas uma configuração é possível para o sistema (equação 2.3.14), esse estado é conhecido como singlete.

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.3.14)$$

É uma função anti-simétrica, com spins anti-paralelos. A interação de troca, que é responsável pela magnetização espontânea, que não pode ser explicada classicamente, tem origem na mecânica quântica mas é de natureza puramente eletrostática, sendo consequência direta do princípio de exclusão de Pauli.

Para $S = 1$, temos $m_s = -1, 0, 1$, então o estado de tripleto (três configurações possíveis) é representado por:

$$|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \quad (2.3.15)$$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] \quad (2.3.16)$$

$$|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \quad (2.3.17)$$

Pelo princípio de Pauli, a função de onda total deve ser anti-simétrica, dada pelo produto da parte espacial e de spin. Vamos definir χ_A e χ_S , como as funções de spin anti-simétrica e simétrica, respectivamente e, $\Phi_1(\vec{r}_1)$ e $\Phi_2(\vec{r}_2)$ como funções de onda individuais para cada elétron. Temos que as partes espaciais das funções de onda será:

$$\Psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi_1(\vec{r}_1)\Phi_2(\vec{r}_2) + \Phi_1(\vec{r}_2)\Phi_2(\vec{r}_1)] \quad (2.3.18)$$

$$\Psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi_1(\vec{r}_1)\Phi_2(\vec{r}_2) - \Phi_1(\vec{r}_2)\Phi_2(\vec{r}_1)] \quad (2.3.19)$$

Portanto, as duas funções de onda anti-simétricas para o sistema de dois eletrons:

$$\Psi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_A \quad (2.3.20)$$

$$\Psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_S \quad (2.3.21)$$

Agora podemos calcular os valores médios da energia de interação calculada nos dois estados definidos por:

$$E_A = \langle U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle_1 = \int \Psi_1^* \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \Psi_1 d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (2.3.22)$$

$$E_B = \langle U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle_2 = \int \Psi_2^* \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \Psi_2 d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (2.3.23)$$

Substituindo a eq. 2.3.20 em 2.3.22 e a eq. 2.3.21 em 2.3.23, temos que:

$$\begin{aligned} \langle U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle_1 = & \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \Phi_1^*(\vec{r}_1) \Phi_2^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \Phi_1(\vec{r}_1) \Phi_2(\vec{r}_2) d^3 r_1 d^3 r_2 + \\ & + \int \Phi_1^*(\vec{r}_1) \Phi_2^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \Phi_1(\vec{r}_2) \Phi_2(\vec{r}_1) d^3 r_1 d^3 r_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle_2 = & \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \Phi_1^*(\vec{r}_1) \Phi_2^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \Phi_1(\vec{r}_1) \Phi_2(\vec{r}_2) d^3 r_1 d^3 r_2 - \\ & - \int \Phi_1^*(\vec{r}_1) \Phi_2^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \Phi_1(\vec{r}_2) \Phi_2(\vec{r}_1) d^3 r_1 d^3 r_2 \end{aligned}$$

De uma maneira mais simples:

$$\langle U \rangle_1 = E' + J \quad (2.3.24)$$

$$\langle U \rangle_2 = E' - J \quad (2.3.25)$$

em que,

$$E' = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \Phi_1^*(\vec{r}_1)\Phi_2^*(\vec{r}_2)\frac{1}{r_{12}}\Phi_1(\vec{r}_1)\Phi_2(\vec{r}_2)d^3r_1d^3r_2 \quad (2.3.26)$$

$$J = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \Phi_1^*(\vec{r}_1)\Phi_2^*(\vec{r}_2)\frac{1}{r_{12}}\Phi_1(\vec{r}_2)\Phi_2(\vec{r}_1)d^3r_1d^3r_2 \quad (2.3.27)$$

E' é o termo de interação direta, representa a energia coulombiana média do sistema. Seria o único termo presente se não levassemos em conta o princípio da exclusão, ou seja, a condição de anti-simetria das funções de onda. Note que E' aparece tanto em $\langle U \rangle_1$ quanto em $\langle U \rangle_2$. J é o termo de troca, um termo extra, que aparece devido ao princípio da exclusão chamado "integral de troca". Depende do estado, singlete ou tripleto. Veja que J é de natureza coulombiana mas envolve justaposição de funções de onda.

Dessa forma temos que a diferença de energia dos dois níveis depende do termo de troca:

$$E_A - E_S = 2J \quad (2.3.28)$$

$$\langle U \rangle_1 - \langle U \rangle_2 = 2J \quad (2.3.29)$$

Vamos mostrar que um hamiltoniano, escrito na forma abaixo, é capaz de simular a separação dos eletrons em dois níveis distintos de energia Ψ_1 e Ψ_2 , dependendo do estado do spin.

$$H = J_0 - J_{12}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (2.3.30)$$

em que, J_0 é uma constante que inclui outras contribuições de energia entre spins e $J_{12}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ é a energia de troca entre os spins. Vamos mostra que $\langle H \rangle_1 = E_A$ e $\langle H \rangle_2 = E_B$, para isso vamos definir um S total tal que, $S^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$. Então,

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2}(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 - \frac{1}{2}S_1^2 - \frac{1}{2}S_2^2 \quad (2.3.31)$$

ou em forma de operadores,

$$\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{1}{2} \hat{S}^2 - \frac{1}{2} \hat{S}_1^2 - \frac{1}{2} \hat{S}_2^2 \quad (2.3.32)$$

Aplicando a eq. 2.3.32 em χ_A e χ_S , temos:

$$\begin{aligned} \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \chi_A &= \frac{1}{2} \hat{S}^2 \chi_A - \frac{1}{2} \hat{S}_1^2 \chi_A - \frac{1}{2} \hat{S}_2^2 \chi_A \\ \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \chi_A &= -\frac{3}{4} \chi_A \end{aligned} \quad (2.3.33)$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \chi_B &= \frac{1}{2} \hat{S}^2 \chi_B - \frac{1}{2} \hat{S}_1^2 \chi_B - \frac{1}{2} \hat{S}_2^2 \chi_B \\ \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \chi_B &= \frac{1}{4} \chi_B \end{aligned} \quad (2.3.34)$$

Para o caso que estamos tratando, de dois eletrons, a eq. 2.3.30 pode ser escrita como:

$$H = \frac{1}{4}(E_A + 3E_S) - (E_A - E_S) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (2.3.35)$$

então,

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_1 &= \frac{1}{4}(E_A + 3E_S) - (E_A - E_S) \langle \Psi_1 | \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 | \Psi_1 \rangle \\ &= \frac{1}{4}(E_A + 3E_S) - (E_A - E_S) \frac{-3}{4} \langle \Psi_1 | \Psi_1 \rangle \end{aligned}$$

$$\langle H \rangle_1 = E_A \quad (2.3.36)$$

Da mesma forma encontramos

$$\langle H \rangle_2 = E_S \quad (2.3.37)$$

Da eq. 2.3.29, temos que

$$J_{12} = \frac{E_A - E_S}{2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \Phi_1^*(\vec{r}_1)\Phi_2^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \Phi_1(\vec{r}_2)\Phi_2(\vec{r}_1) d^3r_1 d^3r_2 \quad (2.3.38)$$

Das eqs. 2.3.30 e 2.3.38, podemos notar que se $J_{12} > 0$ então $E_A > E_S$, E_S é o estado de menor energia. Neste estado os spins dos dois elétrons vizinhos estão paralelos (Estado Ferromagnético). Se $J_{12} < 0$ então $E_A < E_S$, E_A é o estado de menor energia. Neste estado os spins dos dois elétrons vizinhos estão antiparalelos (Estado Antiferromagnético).

O hamiltoniano efetivo 2.3.30 é para o caso de interação entre dois elétrons, entretanto os átomos de um sistema magnéticos possuem muitos elétrons. Numa primeira aproximação, a "interação de troca", que considera a superposição de funções de onda recebe o nome de "interação de troca direta" ou "exchange direta" [10]. Em sistemas magnéticos a interação de troca direta é apreciável apenas para primeiros vizinhos [11]. Podemos, então, considerar os spins dos elétrons numa camada incompleta de um determinado átomo, como um spin resultante \vec{S}_i (i denota o sítio da rede aonde o spin está localizado). Com isso podemos escrever o hamiltoniano de Heisenberg para um sistema magnético como:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.3.39)$$

em que, J_{ij} é agora chamado de constante de acoplamento entre spins nos sítios i e j , e j é primeiro vizinho do sítio i . Uma boa aproximação para essa constante é:

$$J_{ij} = \begin{cases} J, & \text{para primeiros vizinhos} \\ 0, & \text{para demais vizinhos} \end{cases}$$

Podemos fazer tal aproximação pois a interação de troca cai rapidamente com a distância (eq. 2.3.38), valendo até uma distância conhecida como *comprimento de exchange* [10]. Reescrevendo,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.3.40)$$

Essa interação de troca direta é forte particularmente para os metais $3d$, devido a extensão relativa da nuvem eletrônica $3d$. Até hoje não existe uma teoria ou modelo fechado que descreva a totalidade dos fenômenos magnéticos de uma forma unificada.

3 EXCHANGE-BIAS EM NANOESTRUTURAS MAGNÉTICAS

3.1 HISTERESE MAGNÉTICA

Histerese Magnética [10] é o fenômeno de atraso entre a magnetização e o campo externo aplicado a um material ferromagnético. Inicialmente aplica-se um campo externo, H_{ext} , que é aumentado até o ponto de saturação em H_{sat} , onde $M = 1$ é a magnetização normalizada. Em seguida esse campo externo é reduzido gradativamente até $H_{ext} = 0$, em que observa-se uma magnetização remanescente ($M > 0$). Reduzindo, ainda mais, o campo H_{ext} , alcançamos a magnetização de saturação oposta em $-H_{sat}$, onde $M = -1$. Repetindo o processo na direção contrária o fenômeno se repete. O processo pode ser visualizado na figura 3.1

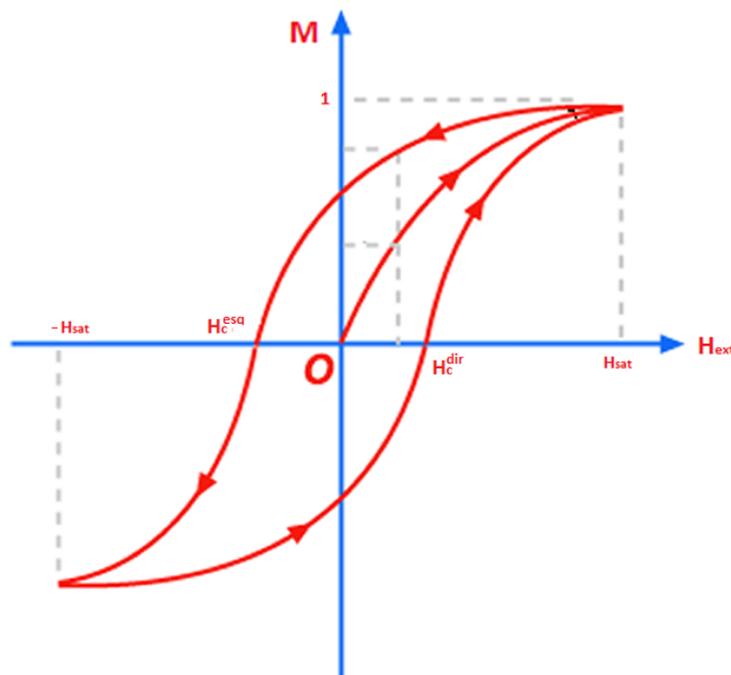


Figura 3.1: Curva de Histerese Magnética $M \times H_{ext}$.

A curva de histerese nos dá importantes informações sobre diversas propriedades do material. Por exemplo, a largura da curva, denominada coercividade e definida pela eq.3.1.1, nos indica quão difícil ou fácil é para magnetizar o material.

$$H_c = \frac{H_c^{dir} - H_c^{esq}}{2} \quad (3.1.1)$$

em que, H_c^{dir} e H_c^{esq} são os zeros, à direita e à esquerda respectivamente da curva de histerese. Continuando nessa linha, a área da curva, nos dá o trabalho, necessário para realizar o ciclo, ou seja, quando a histerese é pequena, a coercividade também é, ficando mais fácil magnetizar o material e o sistema gasta menos energia.

3.2 EXCHANGE-BIAS

Nas últimas décadas, muitos trabalhos em filmes magnéticos finos foram impulsionados por várias propriedades relacionados com as interfaces que separam os materiais magnéticos. A chave para a compreensão dessas estruturas magnéticas é o conhecimento sobre as energias básicas envolvidas: energias dipolar, de troca e anisotropia. O primeiro controla a ordenação magnética, o segundo controla a forma das estruturas magnéticas e este último controla a orientação preferencial. Ambas são descrições fenomenológicas de correlações fundamentais e energias associadas com a estrutura eletrônica e cristalina do material.

Um dos efeitos mais importantes estudados é o estudo sobre o Exchange-Bias (EB), efeito descoberto em 1956 [16]. O efeito EB ocorre devido ao acoplamento de troca entre as camadas ferromagnéticas (FM) e antiferromagnético (AFM). Sua assinatura é o desvio horizontal no ciclo histerese em relação ao ponto de campo zero. Esse desvio é atribuído à anisotropia unidirecional do sistema. Várias propriedades interessantes são obtidos a partir do ciclo de histerese como a magnetização remanescente, que é uma magnetização residual no material quando o campo de alinhamento é reduzido a zero, o campo coercivo necessário para cancelar a magnetização residual e o campo de saturação, que é o campo necessário para forçar todos os momentos magnéticos da amostra a apontar na direção do campo externo.

Na maioria dos trabalhos recentes [18, 21, 22], é previsto que o valor do Exchange-Bias é fortemente influenciado por J_{int} (constante de acoplamento entre os materiais), mas os valores teóricos obtidos podem discordar em algumas ordens de grandeza dos resultados experimentais [19, 22]. Essa discordância existe devido o parâmetro J_{int} que é desconhecido.

3.2.1 Congelamento - Anisotropia Uniaxial

Vamos considerar um sistema FM-AFM (Figura 3.2), no qual inicialmente todos os momentos magnéticos estão desalinhados ($T > T_n$). É aplicado um campo que ordena os momentos e, logo após a temperatura é reduzida até $T < T_n$, mantendo o campo ligado. Esse procedimento faz com que no material AFM seja criada uma direção preferencial de magnetização, onde os momentos ficarão fortemente alinhados. Isso é conhecido como anisotropia uniaxial, e o campo é denominado campo de cooling ou congelamento.

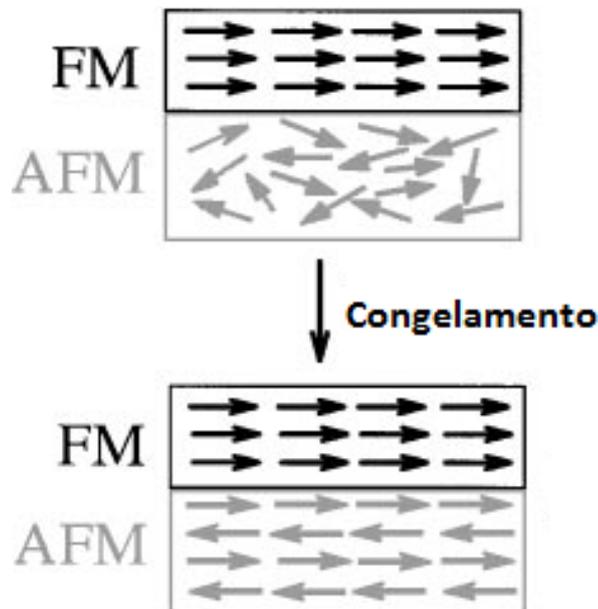


Figura 3.2: Sistema em que temos um material FM sobre um substrato AFM. Inicialmente desordenado, e fica ordenado após a aplicação do campo de cooling.

3.2.2 Histerese

A curva de histerese de um sistema FM-AFM é realizada após o processo de congelamento (ver figura 3.3). Observa-se que o centro da curva de histerese está, agora, deslocado ao longo do eixo do campo aplicado (ver figura 3.3), geralmente em sentido oposto ao campo de congelamento, tal desvio é denominado de EXCHANGE-BIAS [16].

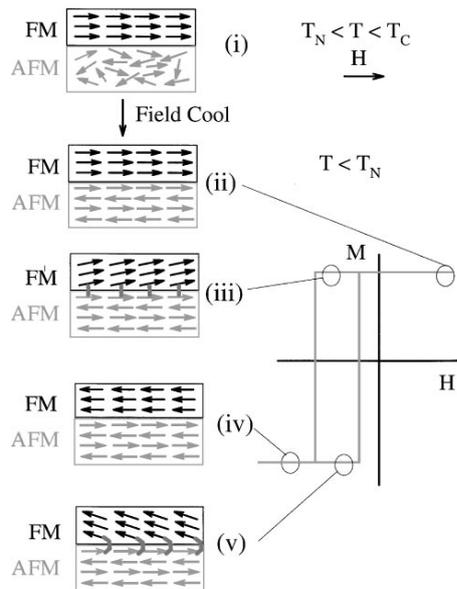


Figura 3.3: Procedimento que mostra como o congelamento dos spins AFM causam o desvio horizontal na curva de histerese. [17]

Como pode ser observado a curva de histerese tem o campo coercivo H_c aumentado após o processo de congelamento devido a anisotropia criada no AFM, ou seja, agora é mais difícil mudar a magnetização do FM para um direção que não seja a direção da anisotropia.

Geometricamente, o desvio horizontal, ou campo de Exchange-Bias (H_{eb}), da curva de histerese é definido por:

$$H_{eb} = \frac{H_c^{dir} + H_c^{esq}}{2} \quad (3.2.1)$$

em que H_c^{dir} e H_c^{esq} foram definidos na figura 3.1.

A anisotropia direcional gerada no FM e o Exchange-Bias podem ser explicados pela

interação de troca na interface FM-AFM. o desvio na curva de histerese pode ser entendido devido o material AFM exercer um campo local no material FM. Para que exista esse campo local, o material AFM tem que ser do tipo descompensado (figura 3.4), ou seja, a magnetização líquida na superfície de contato entre os materiais deve ser não nula.

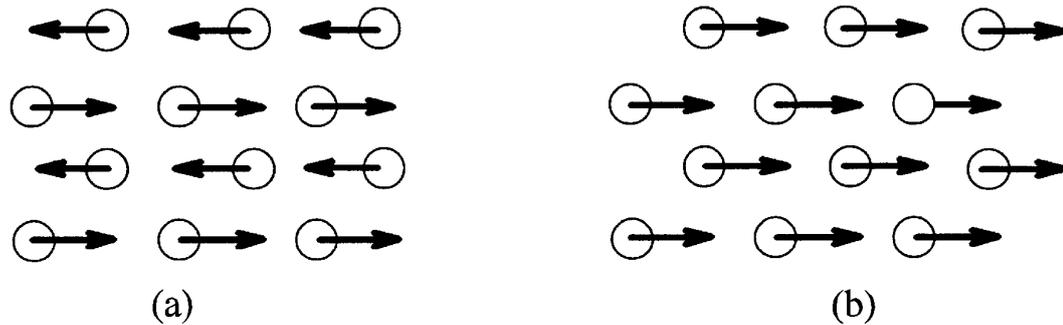


Figura 3.4: Visão superior do material AFM. Na figura (a), o temos uma superfície compensada, magnetização líquida na camada é nula. Na figura (b), a superfície é descompensada, magnetização líquida na camada é não-nula.

O campo local que o material AFM exerce no FM é responsável pela diferença de H_c^{dir} e H_c^{esq} . No ciclo de histerese, quando o campo aplicado \vec{H}_{ext} diminui ($\vec{H}_{ext} < H_{sat}$), os momentos magnéticos do FM estão alinhados antiparalelamente aos momentos do AFM, pois a interação entre eles é antiferromagnética e não favorece a inversão da magnetização. Nesse caso, o campo coercivo necessário para que a magnetização se torne zero é maior do que na situação sem acoplamento, pois o campo efetivo resultante sobre os momentos magnéticos do FM é maior. Na segunda metade do ciclo de histerese, quando o campo aplicado \vec{H}_{ext} aumenta ($\vec{H}_{ext} > H_{sat}$), no processo inverso, ocorre o contrário, o campo local gerado pelo AFM contribui energeticamente para a inversão dos momentos FM, necessitando, agora, de um campo coercivo menor. Nessa situação vemos a ocorrência de Exchange-Bias.

3.2.3 A Interface AFM-FM

O principal objeto de estudo, para que possamos compreender de uma maneira satisfatória a teoria para o Exchange-Bias (EB) é a estrutura da interface de acoplamento entre os materiais

ferromagnéticos (FM) e antiferromagnéticos (AFM). A interface AFM-FM é um ponto desconhecido, sendo fonte de diversos modelos e teorias.

Também sabemos que os materiais que apresentam o EB são muitos [17], filmes finos, cristais com revestimentos metálicos, ferromagnetos policristalinos e amorfos em contato com óxidos antiferromagneticamente ordenados e desordenados. Mas por outro lado, o acoplamento AFM-FM, até em seu caso mais perfeito, de dois cristais em contato próximo, pode ter grandes defeitos e deformações no parâmetro de rede [21]. Além disso as propriedades magnéticas nas vizinhanças da interface AFM-FM não são necessariamente as mesmas propriedades do restante do material magnético.

Contudo, de uma maneira mais geral, a configuração atômica nas vizinhanças da interface é, de certa forma, desconhecida. Podem ocorrer tanto relaxamento cristalográfico ou magnético e reconstrução em ambos os materiais FM ou AFM, o que prejudica medidas futuras [21]. Essas características ainda são agravadas devido à complexidade de toda estrutura magnética do material, dificultando cada vez mais a formulação de uma teoria sobre EB. Então, não fica sendo nenhuma surpresa que praticamente todas as teorias sobre o assunto tentam explicar o comportamento magnético e cristalográfico da interface de acoplamento entre os materiais.

3.2.4 Modelos Teóricos

Em nosso estudo sobre o EB, podemos encontrar na literatura uma grande quantidade de tentativas de explicar o EB, mais precisamente o comportamento da interface AFM-FM. A maioria dos modelos têm em comum o pressuposto de um estado fundamental que torne as estruturas FM e AFM colineares, entretanto, como citado anteriormente, a estrutura da interface é muito complexa.

Agora serão apresentados alguns modelos teóricos que tentam explicar o EB.

O Modelo Ideal de Meiklejohn e Bean

Esse modelo foi a primeira tentativa de explicar o EB, desenvolvido por Meiklejohn e Bean [22]. Eles assumiram que:

- A camada FM gira rigidamente, como um todo;
- Tanto o FM quanto o AFM estão em estado de domínio único;
- A interface FM/AFM é atômicamente lisa;
- A camada de AFM é magneticamente rígida, o que significa que os spins AFM permanecem inalterados durante a rotação dos spins FM;
- Os spins da interface AFM são totalmente descompensadas: a camada de interface tem um momento magnético líquido;
- As camadas FM e AFM são acoplados por uma interação de troca através da interface FM/AFM. O parâmetro designado para essa interação é a energia de acoplamento interfacial de troca J_{int} por unidade de área;
- A camada de AFM tem uma anisotropia uniaxial no plano.

Meiklejohn e Bean consideraram que a melhor forma de descrever esse novo sistema seria comparando com materiais bem conhecidos. Por exemplo, para partículas de Cobalto puro, que é um material FM, em um campo magnético forte (20 KOe), exibirá uma histerese simétrica como na figura 3.5-a. A curva de torque para esse material seria uma função de 2θ (ver figura 3.5-b). Por isso,

$$T = -\frac{\partial E}{\partial \theta} = Ksen(2\theta) \quad (3.2.2)$$

$$E = \int Ksen(2\theta)d\theta = Ksen^2(\theta) + K_0 \quad (3.2.3)$$

Portanto, a energia seria como mostrada na figura 3.5-c, em que, o mínimo ocorre em $\theta = 0$ e $\theta = 180^\circ$

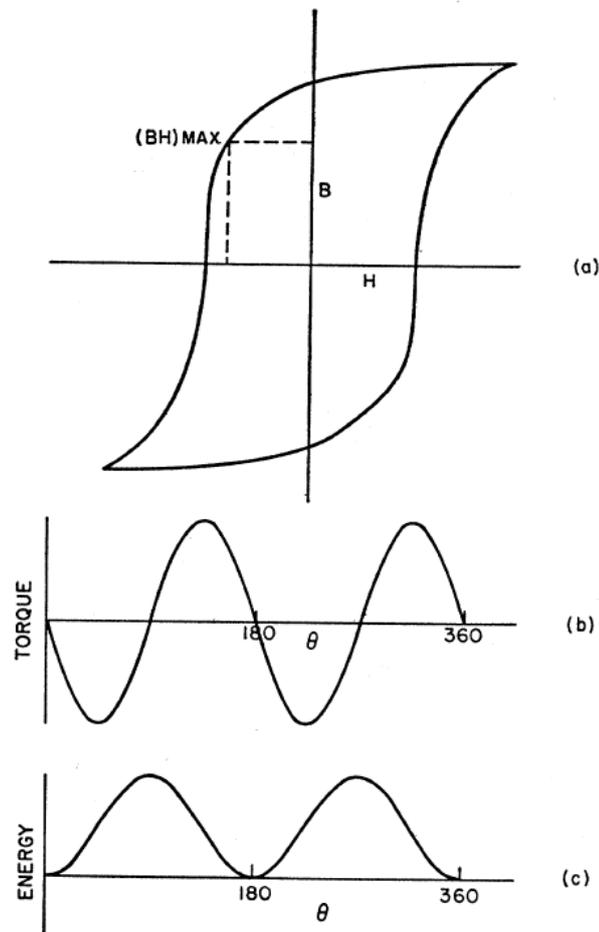


Figura 3.5: Curvas de histerese, torque e energia para partículas convencionais de cobalto [23]. Histerese simétrica e com centro em zero.

Vamos considerar, agora, partículas de cobalto em contato com óxido de cobalto (figura 3.6). A curva de histerese (figura 3.6-a) aparece deslocada, em relação ao ponto de campo zero. A curva de torque obtida para essas partículas é mostrada na figura 3.6-b.

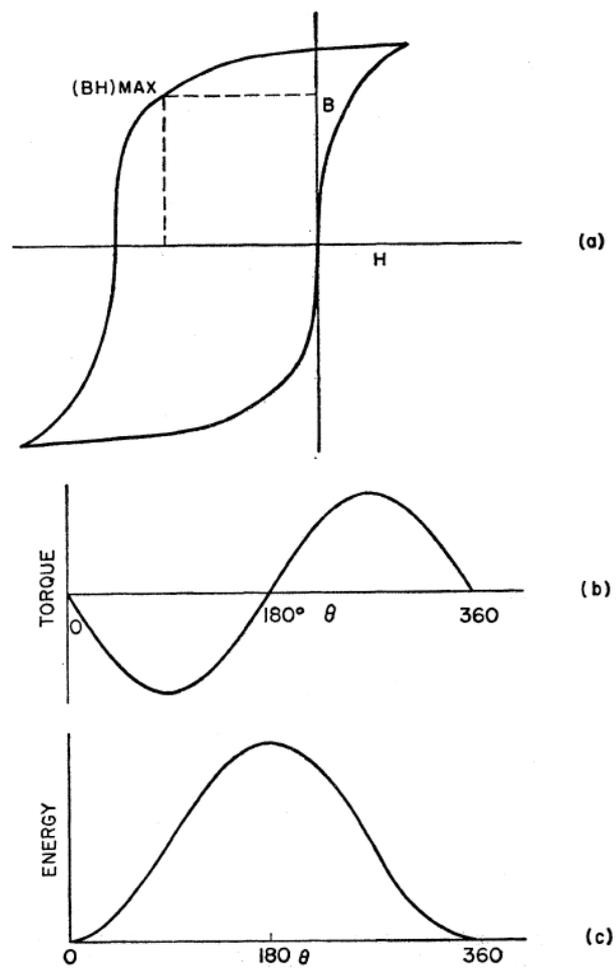


Figura 3.6: Curvas de torque e energia para partículas de cobalto acopladas a óxido de cobalto [23]. Histerese não é simétrica com o centro fora do ponto zero.

$$T = -K\sin(\theta) \quad (3.2.4)$$

$$(3.2.5)$$

por isso,

$$E = -K\cos(\theta) + K_0 \quad (3.2.6)$$

Portanto, a energia é como mostrada na figura 3.6-c, em que o mínimo só ocorre em $\theta = 0$

O processo de medida do torque pode ser encontrado na referência [23]. Após terem feito a medida do torque e da energia do sistema FM-AFM.

Na figura 3.7, é mostrado os momentos magnéticos envolvidos neste modelo. \hat{K}_{FM} e \hat{K}_{AFM} são as direções de anisotropias uniaxiais das camadas FM e AFM, respectivamente, H é o campo magnético aplicado, que faz um ângulo θ com o eixo de anisotropia do AFM, M_{FM} é a orientação da magnetização dos spins FM durante a reversão da magnetização. Nesse modelo os spins AFM são fixos e não mudam sua orientação definida durante o procedimento de congelamento. Na análise a seguir, o ângulo ($\theta = 0$) para o campo aplicado é definido como sendo paralelo à direção do campo de congelamento, que refere-se a direção ao longo do qual os ciclos de histerese são medidos, enquanto que $\theta = 0$ é usado para medições de torque ou para medir a dependência azimutal do campo de exchange-bias.

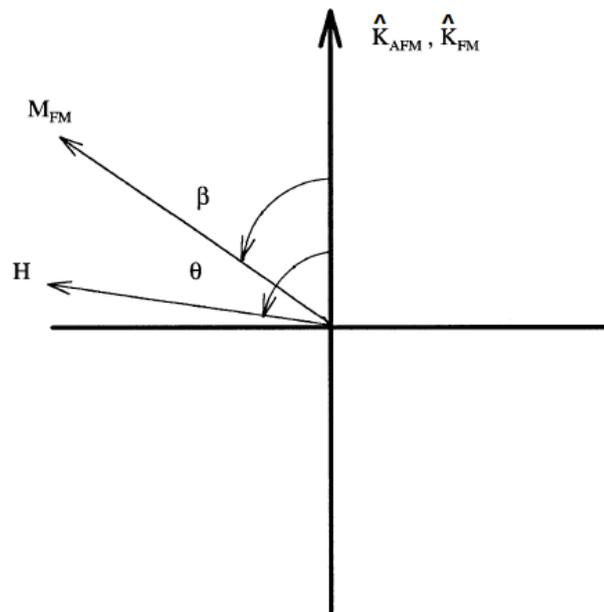


Figura 3.7: Esquema dos momentos magnéticos de cada material e os eixos de anisotropia [17].

Meiklejohn e Bean escreveram a energia por unidade de área, na interface, como [22]:

$$E = -H_{ext}M_{FM}t_{FM}\cos(\theta - \beta) + K_{FM}t_{FM}\sin^2(\beta) - J_{int}\cos(\beta) \quad (3.2.7)$$

O primeiro termo é a interação do campo com o material, apenas a camada FM. O segundo a anisotropia do FM e o último a energia na interface AFM-FM, ou seja, a equação 3.2.6 escrita em termos da magnetização (β) do FM.

A condição de estabilidade, torque zero, $\frac{\partial E}{\partial \beta} = 0$ tem duas soluções. A primeira é $\beta = \cos^{-1}[J_{int} - \mu_0 H_{ext} M_{FM} t_{FM} / (2K_{FM})]$ para $\mu_0 H_{ext} M_{FM} t_{FM} - J_{int} \leq 2K_{FM}$; a segunda solução é $\beta = 0, \pi$ (saturação positiva e negativa) para $\mu_0 H_{ext} M_{FM} t_{FM} - J_{int} \geq 2K_{FM}$. Os campos coercivos H_c^{dir} e H_c^{esq} são retirados da segunda solução.

$$H_c^{dir} = -\frac{2K_{FM}t_{FM} + J_{int}}{\mu_0 M_{FM}t_{FM}} \quad (3.2.8)$$

$$H_c^{esq} = \frac{2K_{FM}t_{FM} - J_{int}}{\mu_0 M_{FM}t_{FM}} \quad (3.2.9)$$

usando as definições de coercividade e exchange-bias, eqs. 3.1.1 e 3.2.1, temos

$$H_c = \frac{2K_{FM}}{\mu_0 M_{FM}} \quad (3.2.10)$$

$$H_{eb} = \frac{J_{int}}{\mu_0 M_{FM}t_{FM}} \quad (3.2.11)$$

A eq. 3.2.11 é a principal equação para o comportamento do EB, através dela vemos um comportamento linear com J_{int} e inverso com a espessura (t_{FM}) e magnetização. A ordem de grandeza do H_{eb} depende fortemente de um parâmetro totalmente desconhecido, J_{int} , praticamente todos os modelos que tentam explicar o EB têm essa característica. Também foi observado [17, 18] que assumindo que $J_{FM} \geq J_{int} \geq J_{AFM}$, o valor de H_{EB} é algumas ordens de grandeza maior que o valor medido experimentalmente.

A ordem de grandeza de H_{eb} pode ser calculada usando a eq. 3.2.11. Sabendo por exemplo, que J_{AFM} para o CoO é $J_{AFM} = 1.86 \text{ meV}$ [29], o valor de J_{int} fica [26]:

$$J_{int} = NJ_{AFM}/A = 4mJ/m^2 \quad (3.2.12)$$

onde $N = 4$ é o número de íons Co^{2+} na interface CoO descompensada por unidade de área $A = \sqrt{3}a^2$, e um $a = 0,427nm$ é o parâmetro de rede CoO. Com este número podemos esperar, para um material de espessura $10nm$, um valor de H_{eb} :

$$H_{eb}[Oe] = \frac{J_{int}[J/m^2]}{M_{FM}[kA/m]t_{FM}[nm]} 10^{10} \quad (3.2.13)$$

$$H_{eb} = \frac{0,004}{1640 \times 10} 10^{10} = 2740Oe \quad (3.2.14)$$

Esse valor do campo de exchange-bias é maior que os medidos experimentalmente [19, 20]. Apesar disso, já foram medidos [30] alguns sistemas bicamadas com alto valor de H_{eb} .

De acordo com a eq. 3.2.10, a coercividade do material não muda com a ocorrência ou não de exchange-bias. Esse fato é contrário tanto aos resultados experimentais quanto às nossas simulações, que mostram mudanças na coercividade e exchange-bias.

O Modelo Realístico de Meiklejohn e Bean

Em 1957 Meiklejohn e Bean [31] adicionam um novo grau de liberdade aos momentos AFM, eles continuam rígidos, mas podem se mover um pouco durante a reversão da magnetização (figura 3.8). Este parâmetro foi introduzido para explicar a histerese rotacional observada durante as medições de torque, permitindo que a camada AFM rode e não fique em contradição com o estado da camada AFM rígida.

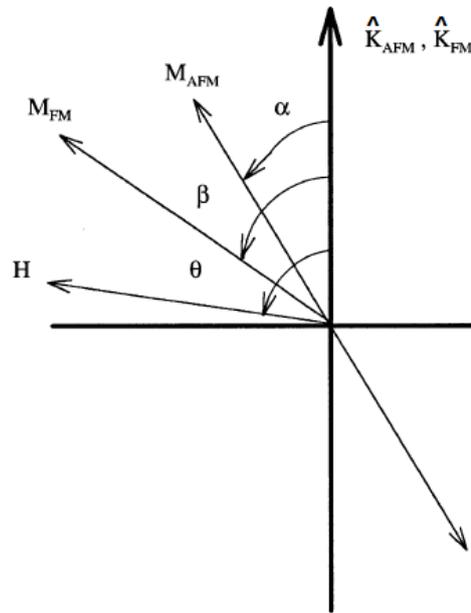


Figura 3.8: Esquema dos momentos magnéticos de cada material e os eixos de anisotropia [17].

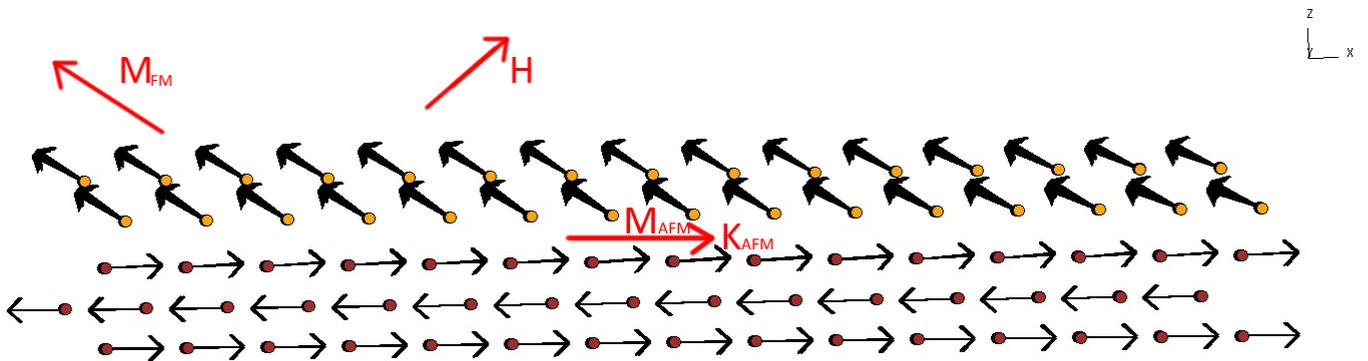


Figura 3.9: Esquema dos momentos magnéticos de cada material e os eixos de anisotropia, para o nosso sistema simulado.

Então, considerando para os momentos AFM o ângulo $\alpha \neq 0$ entre a magnetização M_{AFM} e o eixo de anisotropia, podemos escrever [31]:

$$E = -\mu_0 H M_{FM} t_{FM} \cos(\theta - \beta) + K_{FM} t_{FM} \sin^2(\beta) + K_{AFM} t_{AFM} \sin^2(\alpha) - J_{int} \cos(\beta - \alpha) \quad (3.2.15)$$

em que, o primeiro termo é a interação do FM com o campo, o segundo a anisotropia do FM, o terceiro a anisotropia do AFM e o último a interação de troca entre o FM e AFM. Ao minimizar a eq. 3.2.15 com respeito a α e β , encontramos um sistema de duas equações:

$$\begin{cases} \frac{H}{H_{eb}^{\infty}} \text{sen}(\theta - \beta) + \text{sen}(\beta - \alpha) = 0 \\ R \text{sen}(2\alpha) - \text{sen}(\beta - \alpha) = 0 \end{cases} \quad (3.2.16)$$

em que,

$$H_{eb}^{\infty} = -\frac{J_{int}}{\mu_0 M_{FM} t_{FM}} \quad (3.2.17)$$

é o valor para o campo de exchange bias, quando a anisotropia do AFM é infinitamente grande, deixando o AFM totalmente rígido e imóvel. E a razão entre a anisotropia do AFM e a energia de troca J_{int} é definida como:

$$R \equiv \frac{K_{AFM} t_{AFM}}{J_{int}} \quad (3.2.18)$$

Resultados de calculos numéricos da eq. 3.2.16 em função de R , permitiram a distinção de três regiões [31, 32, 33]:

- Região I: $R \geq 1$

Nessa região o campo coercivo é zero e o campo de exchange-bias é finito, decrescendo de um valor assintótico H_{eb}^{∞} até seu menor valor em $R = 1$. Os momentos AFM giram reversivelmente durante a inversão dos momentos FM.

- Região II: $0.5 \leq R \leq 1$

Nessa região os momentos AFM não são mais reversíveis. Eles seguem os momentos FM e mudam a direção, causando um campo coercivo às custas de um campo de exchange-bias zero.

- Região III: $R \leq 0.5$

Nessa região as características da região anterior são preservadas, exceto pelo fato que os momentos AFM seguem reversivelmente os momentos FM, sem saltos.

Desse modo, percebemos que quando permitimos que os momentos AFM tenham uma certa liberdade de rotação, encontramos propriedades que dependem dos parâmetros da camada AFM (e também FM). A razão R pode ser variada em toda a gama de zero ao infinito, alterando a espessura da camada de AFM, variando a anisotropia ou variando a energia J_{int} .

Resolvendo o sistema de equações 3.2.16, chegamos que o valor do campo de exchange-bias é:

$$H_{eb} = \begin{cases} H_{eb}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{4R^2}\right)^{1/2}, & R \geq 1 \\ 0, & R < 1 \end{cases} \quad (3.2.19)$$

Essa equação continua mantendo a dependência $\frac{1}{t_{FM}}$ para o campo de exchange-bias. O resultado mais importante é o fato do campo de exchange-bias diminuir quando razão R se aproxima do valor crítico.

Modelos de Interfaces Aleatórias

Em 1987 Malozemoff, publicou um modelo [26] onde ele estabelecia certas rugosidades na interface de acoplamento, veja a figura 3.10.

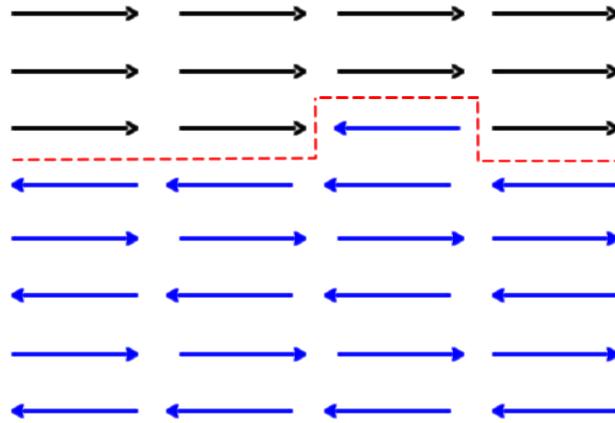


Figura 3.10: Rugosidade no acoplamento AFM/FM. A linha tracejada vermelha indica a separação entre os materiais FM (acima) e AFM (abaixo), enquanto a linha azul indica os sítios com as rugosidades.

Esse modelo foi capaz de diminuir em duas ordens de grandeza a diferença entre os resultados teóricos e os dados experimentais. Malozemoff chegou que o campo de exchange bias (H_{eb}) seria [26]:

$$H_{eb} = \frac{2\sqrt{A_A K_A}}{M_F t_F} \quad (3.2.20)$$

onde A_A é a constante de troca para o AFM, K_A a anisotropia para o AFM, M_F é a magnetização de saturação para o FM e t_f a espessura do FM. Para esse modelo ser válido, existe uma dependência nos defeitos na interface AFM/FM, o que não está de acordo com os dados encontrados experimentalmente [21]. Esse modelo foi melhorado por Schulthess e Butler, que consideraram a energia de troca, a energia de Zeeman, as anisotropias e a interação dipolar. Os resultados podem ser encontrados nas referências [27, 28].

Muitos outros modelos foram propostos que abordam, entre outras propriedades, domínios na camada AFM e/ou na FM, efeito de campo no AFM, spins FM e AFM não colineares, anisotropia aleatória no AFM e superfícies não compensadas.

Esses modelos atingiram, cada um, diferentes pontos dos resultados experimentais. Oferecendo aproximações individuais para problemas específicos, não valendo para os demais. A maioria

[17] dos modelos assumem uma interface AFM/FM plana e homogênea, e os spins AFM e FM colineares, em superfícies não-compensadas.

4 MODELO ANISTRÓPICO NA INTERFACE AFM-FM

4.1 MODELO ISOTRÓPICO E ANISOTRÓPICO DE HEISENBERG

Inicialmente vamos ver as diferenças entre os modelos isotrópico e anisotrópico de Heisenberg.

Como vimos anteriormente, a hamiltoniana de Heisenberg é definida por:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (4.1.1)$$

em que, $\langle i, j \rangle$ denota uma soma sobre os primeiros vizinhos. Essa expressão é, por definição, isotrópica e a soma de primeiros vizinhos é diferente para cada tipo de rede. Em nossas simulações utilizamos um sistema de partículas distribuídas em uma rede do tipo BCC (figura 4.1):

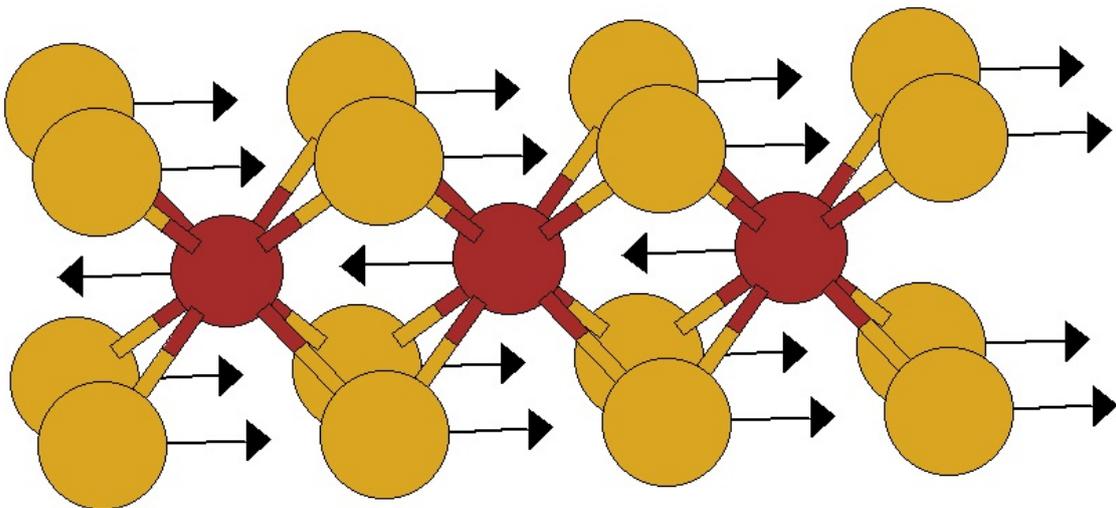


Figura 4.1: Representação de uma rede BCC, os primeiros vizinhos estão fora do plano.

Em uma rede desse tipo, a distância entre sítios de planos distintos é menor que a distância entre sítios no mesmo plano, portanto cada spin apenas interage com sítios nos planos acima ou abaixo, sem interação no mesmo plano. Desse modo nosso sistema fica descompensado, possuindo 8 vizinhos (4 no plano superior e 4 no plano inferior), pois o alinhamento AFM é entre planos, como é observado na figura 4.2.

Voltando à equação 4.1.1, vamos explicitar o produto escalar:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\lambda_x S_i^x S_j^x + \lambda_y S_i^y S_j^y + \lambda_z S_i^z S_j^z) \quad (4.1.2)$$

Os parâmetros $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$ são anisotropias. No caso de $\lambda_x = \lambda_y = \lambda_z = 1$, a hamiltoniana fica

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) \quad (4.1.3)$$

em que vemos que não existe nenhuma direção privilegiada, esse é conhecido como modelo de Heisenberg Isotrópico. No caso em que algum dos parâmetros assumir um valor diferente de 1 é um exemplo do modelo de Heisenberg Anisotrópico.

Conhecendo esses modelos, modelamos cada parte do sistema com um modelo distinto.

4.2 HAMILTONIANA

O nosso trabalho foi baseado no modelo de Heisenberg Anisotrópico, seguindo a seguinte hamiltoniana:

$$\begin{aligned}
H = & -J_{FM} \sum_{FM} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) - \\
& -J_{AFM} \sum_{AFM} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) - \\
& -J_{int} \sum_{int} (\lambda_x S_i^x S_j^x + \lambda_y S_i^y S_j^y + \lambda_z S_i^z S_j^z) - \\
& -g_{FM} \sum_{FM} \vec{S}_i \cdot \vec{H}_{ex} - \\
& -g_{AFM} \sum_{AFM} \vec{S}_i \cdot \vec{H}_{ex} + \\
& +K \sum_{AFM} (1 - \vec{S}_i^2)
\end{aligned} \tag{4.2.1}$$

em que, J_{FM} é a constante de exchange para a camada FM, J_{AFM} é a constante de exchange para a camada AFM, K é a anisotropia uniaxial para a camada AFM, H_{ex} é o campo magnético externo, g_{FM} é a razão giromagnética para a camada FM, g_{AFM} é a razão giromagnética para a camada AFM e $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$ são as constantes da anisotropia de exchange para a interface FM-AFM. Devido à interação dipolar ser muito pequena, se comparada ao termo de troca e demais termos, podemos negligenciá-la aqui.

Vamos, a seguir, apresentar o método utilizado para realizar a dinâmica do sistema.

4.3 SIMULAÇÕES EM NANOMAGNETISMO

A nossa principal ferramenta utilizada nos cálculos foi a simulação computacional. Vamos apresentar um pouco desse recurso e como são realizadas.

Simulações são muito utilizadas quando estudamos sistemas que precisamos de auxílio, quando as soluções analíticas são complicadas ou nem existem. No nosso caso estamos tratando sistemas em escala nanométrica, o que se tornaria muito caro experimentalmente e difícil de trabalhar. Também enfrentamos o problema de trabalhar com muitos corpos, mesmo em escala nanométrica, isso torna o problema sem solução analítica, fazendo com que a solução numérica seja o melhor caminho.

Em nosso estudo utilizamos um método computacional, denominado dinâmica de spins. É

usado para estudar a dinâmica dos momentos magnéticos de um determinado material. Esses momentos magnéticos são determinados pela resolução numérica de equações de movimento para os momentos magnéticos.

O programa computacional utilizado em nossa dinâmica, foi desenvolvido por nós mesmos, utilizando FORTRAN 90. Um fluxograma desse algoritimo, pode ser encontra no apêndice A.1.

4.3.1 Dinâmica de Spins

Para realizar a simulação de dinâmica de spins, devemos utilizar uma equação de movimento que governa toda a dinâmica. Para encontrar essa equação de movimento, vamos lembrar da equação de movimento na representação de Heisenberg [9].

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_i}{dt} = [\vec{S}_i, H] \quad (4.3.1)$$

em que, H é a hamiltoniana do sistema. Vamos considerar uma hamiltoniana definida como:

$$H = H_{exc} + H_z \quad (4.3.2)$$

em que,

$$H_{exc} = -J \sum_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (4.3.3)$$

$$H_z = \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B}_{ext} \quad (4.3.4)$$

H_{exc} é a interação de troca e H_z é a interação com o campo. $\vec{B}_{ext} = (B^x \hat{x} + B^y \hat{y} + B^z \hat{z})$ é o campo externo. Substituindo 4.3.2 em 4.3.1, temos:

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_i}{dt} = [\vec{S}_i, H_{exc}] + [\vec{S}_i, H_z] \quad (4.3.5)$$

Tomando o termo de Zeeman, temos:

$$[\vec{S}_i, H_z] = -[\vec{S}_i, \sum_j \vec{S}_j \cdot \vec{B}_{ext}] \quad (4.3.6)$$

$$= -[\vec{S}_i, \sum_j (S_j^x B^x + S_j^y B^y + S_j^z B^z)] \quad (4.3.7)$$

em termos da componente x :

$$[S_i^x, H_z] = -[S_i^x, \sum_j (S_j^x B^x + S_j^y B^y + S_j^z B^z)] \quad (4.3.8)$$

$$= -([S_i^x, \sum_j S_j^x B^x] + [S_i^x, \sum_j S_j^y B^y] + [S_i^x, \sum_j S_j^z B^z]) \quad (4.3.9)$$

Utilizando as relações de comutação das componentes do momento angular $[S_i^\alpha, S_j^\beta] = i\hbar S_k^\gamma \varepsilon_{\gamma\alpha\beta} \delta_{ij}$, temos:

$$[S_i^x, H_z] = -([S_i^x, S_i^y] B^y + [S_i^x, S_i^z] B^z) \quad (4.3.10)$$

$$= -(i\hbar S_i^z B^y - i\hbar S_i^y B^z) \quad (4.3.11)$$

$$= -i\hbar(S_i^z B^y - S_i^y B^z) = i\hbar(S_i^y B^z - S_i^z B^y) = i\hbar(\vec{S} \times \vec{B}_{ext})_x \quad (4.3.12)$$

Generalizando para as outras componentes e colocando em termos vetoriais:

$$[S_i^y, H_z] = i\hbar(\vec{S} \times \vec{B}_{ext})_y \quad (4.3.13)$$

$$[S_i^z, H_z] = i\hbar(\vec{S} \times \vec{B}_{ext})_z \quad (4.3.14)$$

Logo,

$$[\vec{S}_i, H_z] = i\hbar(\vec{S} \times \vec{B}_{ext}) \quad (4.3.15)$$

De maneira análoga, encontramos para o termo de troca:

$$[\vec{S}_i, H_{exc}] = i\hbar(\vec{S} \times \vec{H}_{exc}) \quad (4.3.16)$$

em que, $\vec{H}_{exc} = -J\sum_j \vec{S}_j$ é o campo de troca. Então, a equação de movimento para um momento \vec{S}_i pode ser escrita como:

$$i\hbar \frac{d\vec{S}_i}{dt} = i\hbar(\vec{S} \times \vec{B}_{ext}) + i\hbar(\vec{S} \times \vec{H}_{exc}) \quad (4.3.17)$$

$$\frac{d\vec{S}_i}{dt} = \vec{S} \times (\vec{H}_{exc} + \vec{B}_{ext}) \quad (4.3.18)$$

Vamos mostrar agora que essa soma pode ser chamada de um campo efetivo (\vec{H}_{eff}), que será o campo resultante no sítio devido à todas as contribuições ao seu redor. Para isso vamos considerar, novamente, a seguinte hamiltoniana:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B}_{ext} \quad (4.3.19)$$

queremos aqui, escrever a hamiltoniana acima como uma interação de um momento magnético \vec{S}_i com um determinado campo \vec{H}_{eff} , como uma interação do tipo Zeeman. Podemos, então, arranjar os termos, e teremos:

$$H = -\sum_i \vec{S}_i \cdot J \sum_j \vec{S}_j - \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B}_{ext} \quad (4.3.20)$$

$$H = -\sum_i \vec{S}_i \cdot (J \sum_j \vec{S}_j + \vec{B}_{ext}) \quad (4.3.21)$$

O termo $J \sum_j \vec{S}_j$ é conhecido como campo de troca (\vec{H}_{exc}), pois é devido a interação do momento magnético do sítio i com os seus primeiros vizinhos nos sítios j . Então, podemos definir o campo efetivo como:

$$\vec{H}_{eff} = J \sum_j \vec{S}_j + \vec{B}_{ext} \quad (4.3.22)$$

ou ainda,

$$\vec{H}_{eff} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{S}_i} \quad (4.3.23)$$

onde H é a hamiltoniana total do sistema. Usando essa definição a hamiltoniana total do sistema pode ser reescrita como:

$$H = -\sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{H}_{eff} \quad (4.3.24)$$

e finalmente a equação de movimento pode ser definida como:

$$\frac{d\vec{S}_i}{dt} = \vec{S}_i \times \vec{H}_{eff} \quad (4.3.25)$$

A equação 4.3.25, não é suficiente para explicar o alinhamento do momento magnético com o campo local, explica apenas a precessão. A metodologia utilizada para alinhar o momento magnético e o campo local é apresentada no apêndice B. Essa equação é denominada equação

LLG e, é dada por:

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = \gamma\mu_0(\vec{m} \times \vec{H}_{eff}) - \frac{\alpha|\gamma|}{m\gamma} \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \quad (4.3.26)$$

4.4 MODELO ANISTRÓPICO NA INTERFACE AFM-FM

Observando a hamiltoniana 4.2.1, pode-se notar que o nosso modelo considera uma anisotropia de troca na interface entre os materiais ferromagnético e antiferromagnético. O sistema foi dividido em três subregiões: A região FM, em que consideramos a interação de troca do tipo isotrópico e Zeeman apenas no FM; a região AFM, em que consideramos a interação de troca do tipo isotrópico e Zeeman apenas no AFM; e a região que chamaremos de *int*, em que consideramos apenas a interação de troca entre os materiais, do tipo anisotrópico. O esquema das regiões é representado na figura 4.2:

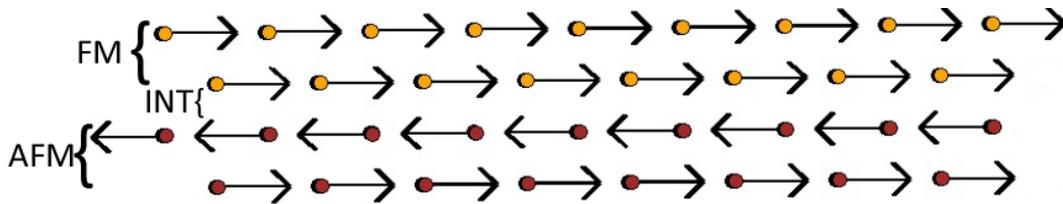


Figura 4.2: Representação do sistema. A figura mostra a camada FM colocada sobre um substrato AFM, e uma região (*int*) de interação entre elas.

Como já é conhecido [25], a anisotropia em materiais magnéticos é responsável pelo comportamento de plano-fácil ou eixo-fácil (figura 4.3). Quando os momentos têm preferência por ficarem magnetizados em um certo plano e magnetizar fora desse plano seria muito difícil, chamamos de configuração de plano fácil (figura 4.3-b). Quando a preferência for por magnetizar paralelo a um determinado eixo, chamamos de configuração de eixo fácil (figura 4.3-a). Ao observarmos a eq. 4.1.2, percebemos que se $\lambda_y = \lambda_z$ e $\lambda_x > \lambda_y$, o sistema se comporta como eixo-fácil, nesse caso a energia é minimizada na direção x. Se $\lambda_x < \lambda_y$, o sistema se comporta como plano-fácil, nesse caso a energia é minimizada fora do eixo x, ou seja, no plano yz.

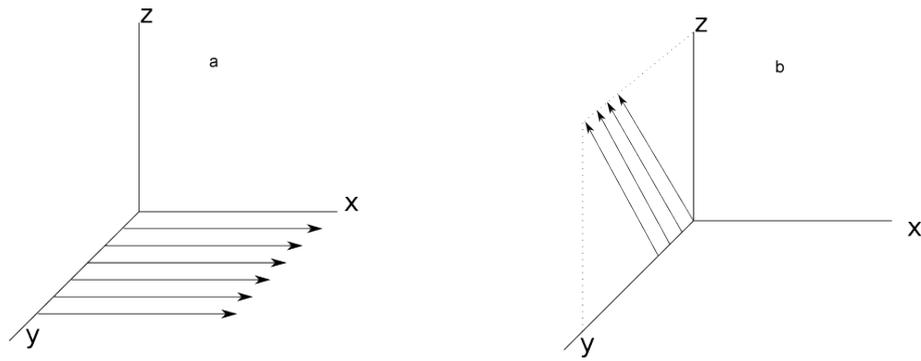


Figura 4.3: Configuração de eixo-fácil (a) e plano-fácil (b).

A ideia desse modelo é fazer um estudo sistemático de como o comportamento do campo de exchange-bias (H_{eb}) e do campo coercivo (H_c) são influenciados quando alteramos o modo que as camadas FM e AFM interagem.

4.5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Utilizando a hamiltoniana 4.2.1 na situação isotrópica, fizemos simulações para diversos ângulos entre o campo externo e o eixo de anisotropia do AFM, para que pudéssemos entender o comportamento do sistema. Pela figura 4.4 percebemos um comportamento cossenoidal, em que o mínimo ocorre em 0 e 360° e o máximo em 180° , reproduzindo o resultado da figura 3.6 o que comprova o modelo de Meiklejohn e Bean (equação 3.2.7).

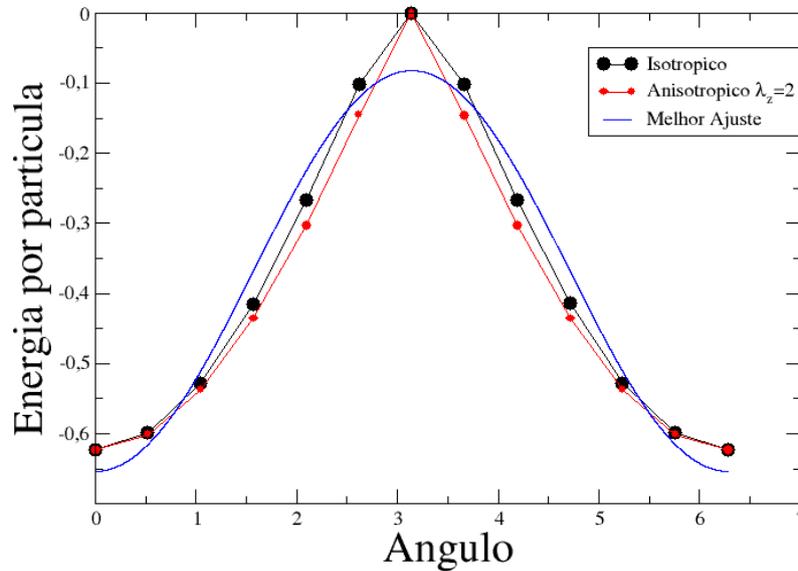


Figura 4.4: Energia em função do ângulo θ entre o campo externo e o eixo-z, $J_{int} = -0.5$.

O ajuste obtido, para o sistema isotrópico, é $E = -0.29\cos(\theta) - 0.37$, que se aproxima do valor de energia por partícula J_{int} , quando $\theta = 0$. Nessa simulação, as constantes utilizadas foram $J_{int} = -0.5$, $J_{FM} = 1.0$, $J_{AFM} = -0.1$, $K_{AFM} = 10.0$, $g_{AFM} = 1$, $g_{FM} = 1$.

Dividimos o trabalho em duas partes, inicialmente para um sistema isotrópico e, em seguida, uma sistema anisotrópico.

4.5.1 Modelo Isotrópico

Primeiramente, vamos considerar o modelo isotrópico, isto é, $\lambda_x = \lambda_y = \lambda_z = 1$. Considerando a energia por unidade de área na interface, do modelo de Meiklejohn e Bean (equação 3.2.7), temos:

$$E = -H_{ext}M_{FM}t_{FM}\cos(\beta) - J_{int}\cos(\beta) \quad (4.5.1)$$

Nessa equação K_{FM} pode ser negligenciado pois seu valor é muito menor que a energia de

troca J_{int} . Minimizando a energia com respeito a β , que é a situação em que o torque entre o campo aplicado e a magnetização do FM é nulo, e fazendo o ângulo $\theta = 0$, temos:

$$0 = -H_{ext}M_{FM}t_{FM} - J_{int} \quad (4.5.2)$$

Como o nosso sistema é discreto, podemos calcular o valor da magnetização de saturação do FM, da seguinte forma:

$$M_{FM} = \frac{N_{FM}|\vec{S}|}{(n_x - 1)(n_y - 1)(n_z - 1)a^3} \quad (4.5.3)$$

em que, N_{FM} é o número de sítios do FM, $|\vec{S}|$ é o módulo do momento magnético e $(n_x - 1)(n_y - 1)(n_z - 1)a^3$ é o volume do FM. Fazendo $a = 1$ e $t_{FM} = n_z - 1$, substituindo na eq. 4.5.2:

$$0 = \frac{-H_{eb}n_x n_y n_z (n_z - 1)}{(n_x - 1)(n_y - 1)(n_z - 1)} - \frac{4J_{int}n_x n_y}{(n_x - 1)(n_y - 1)} \quad (4.5.4)$$

isolando H_{eb} ,

$$H_{eb} = \frac{4J_{int}}{n_z} \quad (4.5.5)$$

A equação 4.5.5 é o resultado analítico para um sistema do nosso tipo, e que usaremos para comparar com os dados obtidos das simulações.

Realizamos simulações, para observar o comportamento de H_{eb} e H_c como função de J_{int} (ver figuras 4.5 e 4.6). O sistema simulado foi de uma rede BCC, com dimensões 15x15, e com quantidade de camadas variável. Em todos os resultados seguintes o campo externo sempre está em unidades de $J_F/(g\mu_B)$ e a magnetização está normalizada em relação ao número de sítios e com $|\vec{S}| = 1$. Nessas simulações, cada ponto foi retirado de um ciclo de histerese completo e calculado pelas definições 3.2.1 e 3.1.1. Na figura 4.5, o sistema consistia de seis camadas AFM e duas camadas FM:

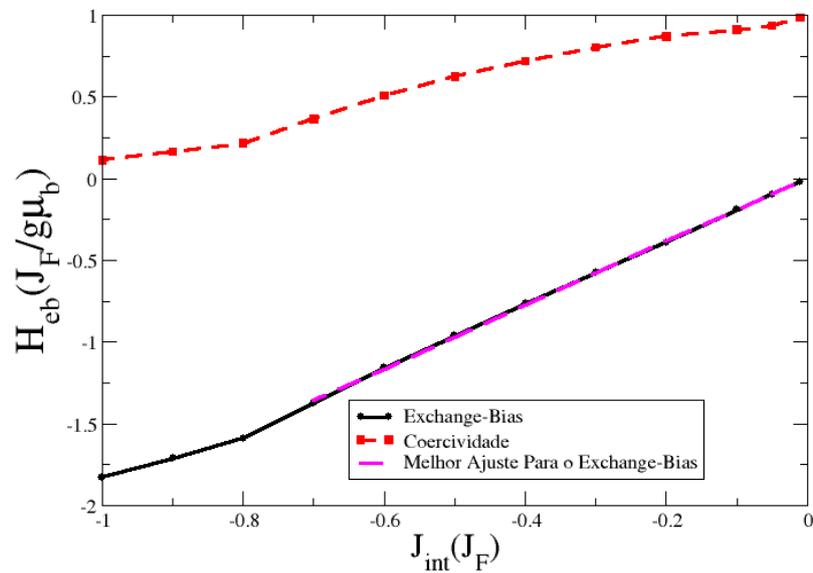


Figura 4.5: Efeito do EB como função de J_{int} para o modelo isotrópico com 2 camadas FM

Baseado no modelo de Meiklejohn e Bean e na solução 4.5.5, vemos que o comportamento de H_{eb} é linear em função de J_{int} . Portanto, fizemos regressão linear para o H_{eb} , usando valores de J_{int} até 0.7 e encontramos um coeficiente angular de 1.95, quando que pela previsão teórica (equação 4.5.5, $4/n_z$) deveríamos encontrar 2.00.

Na figura 4.6, o sistema consistia de seis camadas AFM e seis camadas FM

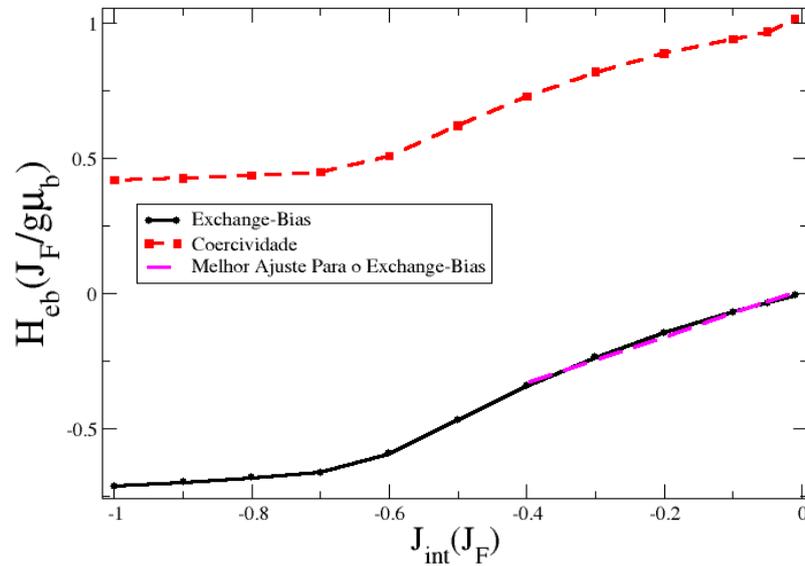


Figura 4.6: Efeito do EB como função de J_{int} para o modelo isotrópico com 6 camadas FM

Novamente fizemos uma regressão linear para o H_{eb} , usando valores de J_{int} até 0.4, e encontramos um coeficiente angular de 0.85 e esperávamos 0.67, de acordo com a previsão teórica. Em ambos os gráficos, a regressão foi feita para valores pequenos de J_{int} porque uma vez que a interação entre as camadas é muito forte, o comportamento deixa de ser linear. As duas simulações retratam o comportamento linear e estão coerentes com os valores previstos.

O comportamento do H_{eb} também pode ser visualizado pelas curvas de histerese abaixo. Nota-se claramente que o valor do campo de Exchange-Bias aumenta proporcionalmente a J_{int} .

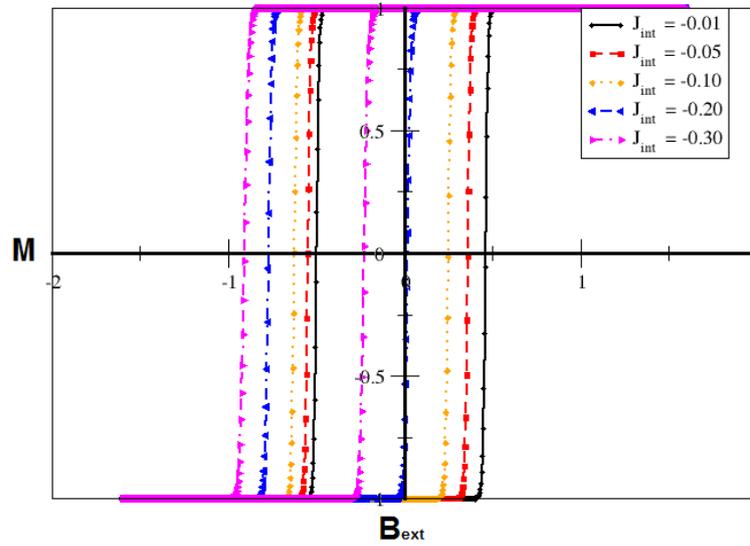


Figura 4.7: Histereses da Magnetização \vec{M} em função do campo aplicado \vec{B}_{ext} para diversos valores de J_{int} para o modelo isotrópico com 2 camadas FM

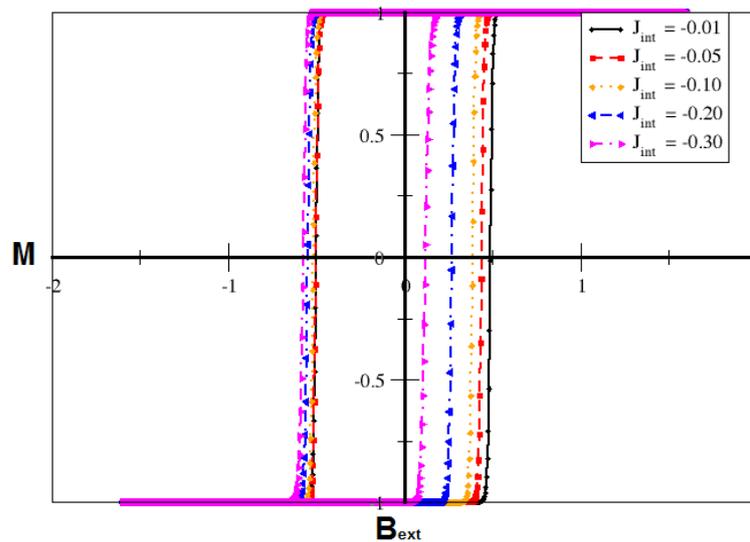


Figura 4.8: Histereses da Magnetização \vec{M} em função do campo aplicado \vec{B}_{ext} para diversos valores de J_{int} para o modelo isotrópico com 6 camadas FM

Esses dados estão de acordo com a previsão teórica, eq. 3.2.17, mostrando um comportamento linear de H_{eb} em função de J_{int} e comparando as figuras 4.5 e 4.6, percebemos também que o valor de H_{eb} diminui quando o número de camadas aumenta, como era esperado. O modelo de Meiklejohn e Bean não prevê a coercividade no material, mas em nossas simulações mostramos que a coercividade está presente. Mais a frente veremos uma situação de equilíbrio, quando a coercividade tende a desaparecer e o resultado se reduz ao previsto por Meiklejohn e Bean.

Na próxima seção iremos utilizar o modelo de Heisenberg anisotrópico na interface FM-AFM.

4.5.2 Modelo Anisotrópico

Nessa seção iremos mostrar os resultados de nossas simulações para os campos de Exchange-Bias e Coercivo quando variamos os parâmetros de anisotropia λ_x , λ_y e λ_z . Nas figuras 4.9 e 4.10, nós mostramos um sistema com seis camadas AFM, seis camadas FM e dimensões 15x15 partículas.

Quando $\lambda_z = 0$ (figura

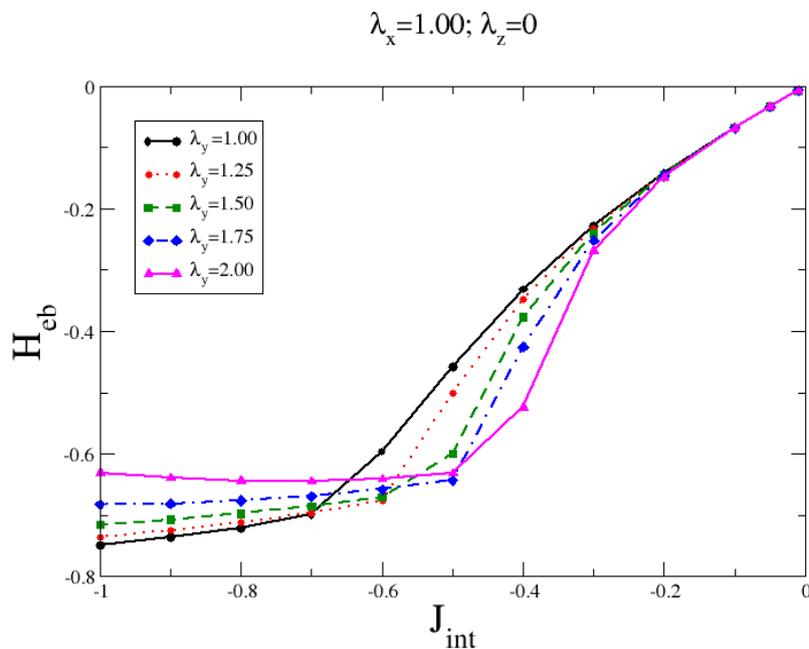


Figura 4.9: Campo de Exchange-Bias, como função do parâmetro J_{int} , para diversos valores de λ_y , quando $\lambda_x = 1$ e $\lambda_z = 0$.

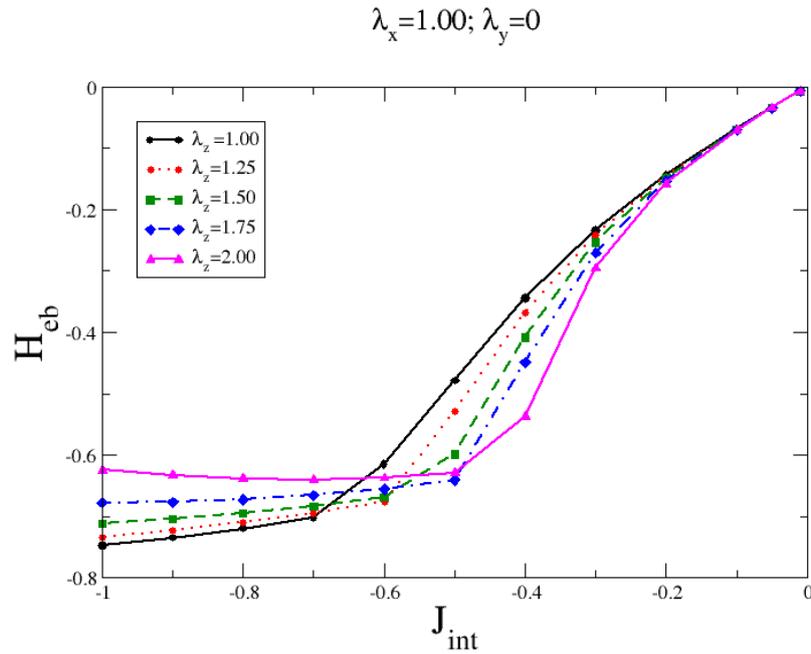


Figura 4.10: Campo de Exchange-Bias, como função do parâmetro J_{int} , para diversos valores de λ_z , quando $\lambda_x = 1$ e $\lambda_y = 0$.

Analisando as figuras 4.9 e 4.10, observamos que os resultados quantitativos são muito próximos e independem da escolha da direção de anisotropia. Existe um aumento no campo de exchange-bias quando aumentamos o valor da anisotropia λ_y ou λ_z para valores pequenos de J_{int} . Para valores de $J_{int} \leq -0.7$, o comportamento é diferente, o valor de H_{eb} é menor quando aumentamos o parâmetro de anisotropia.

Nas figuras 4.11 e 4.12, mostramos os nossos resultados para o campo coercivo, para o mesmo sistema. O valor de H_c diminui quando aumentamos o valor da constante de anisotropia. Esse comportamento pode ser explicado da seguinte forma. Quando aumentamos o valor da anisotropia na direção y, o comportamento da interface é, agora, do tipo eixo-fácil nesse direção, ou seja, a magnetização nessa direção aumenta e a magnetização na direção x diminui (veremos isso à frente). Desta forma, o sistema tende a se comportar cada vez mais como um material magnetizadamente "mole"(facilmente reversível) nessa direção. Também não existe diferença, assim como no H_{eb} , se aplicarmos a anisotropia em λ_y ou λ_z .

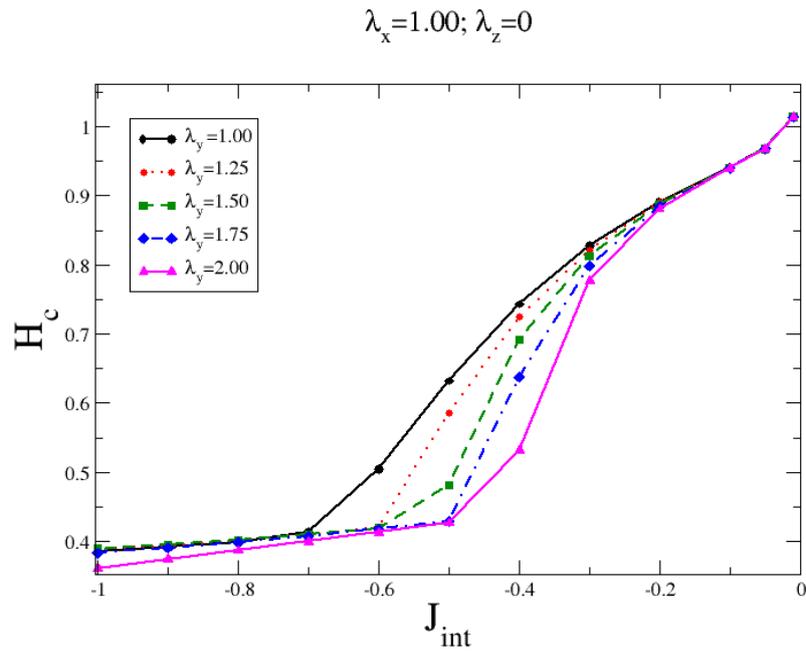


Figura 4.11: Campo de coercivo, como função do parâmetro J_{int} , para diversos valores de λ_y , quando $\lambda_x = 1$ e $\lambda_z = 0$.

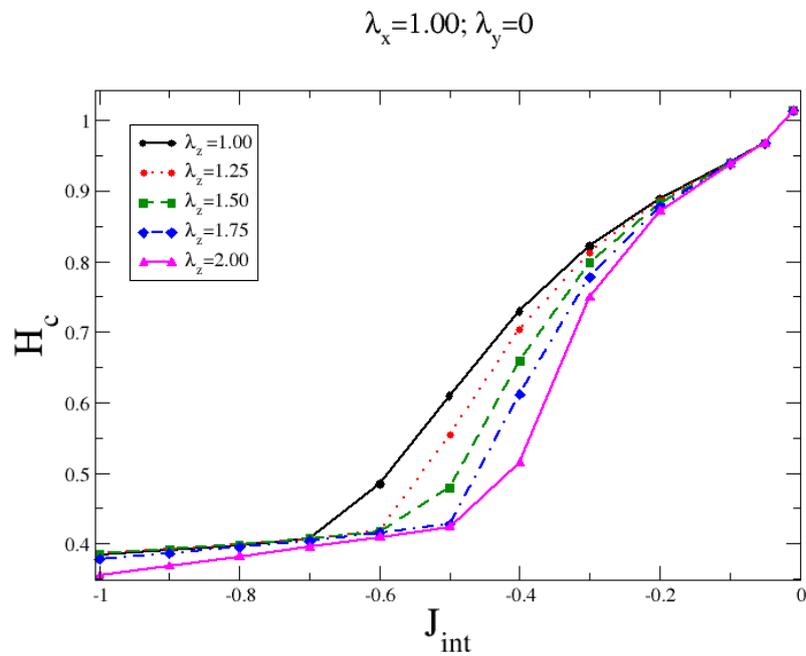


Figura 4.12: Campo de coercivo, como função do parâmetro J_{int} , para diversos valores de λ_z , quando $\lambda_x = 1$ e $\lambda_y = 0$.

zAs curvas de histerese, figuras 4.13 e 4.13, nos ajudam a visualizar o que ocorre quando é adicionado um parâmetro de anisotropia na interação. Escolhemos o valor de $J_{int} = -0.5$, das simulações anteriores.

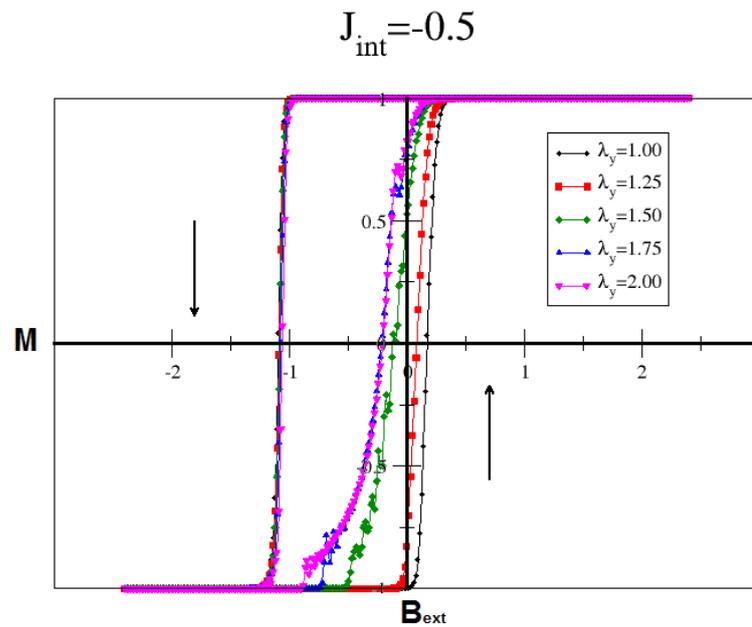


Figura 4.13: Ciclos do histereses para diversos λ_y quando são mantidos constantes

$$J_{int} = -0.5, \lambda_x = 1 \text{ e } \lambda_z = 0$$

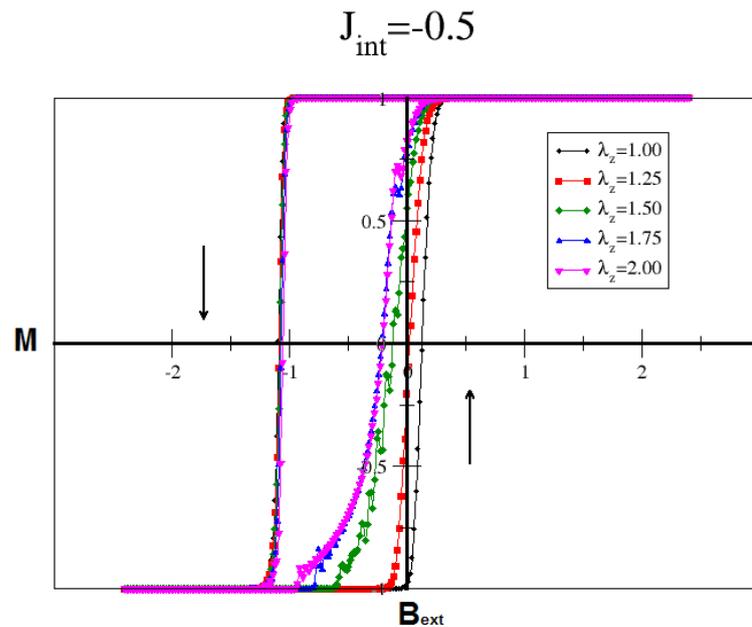


Figura 4.14: Ciclos do histereses para diversos λ_z quando são mantidos constantes

$$J_{int} = -0.5, \lambda_x = 1 \text{ e } \lambda_y = 0$$

Observamos que o ciclo de histerese torna-se assimétrico quando aumentamos o valor da anisotropia. Na figura 4.15 podemos analisar o comportamento das magnetizações durante o ciclo de histerese e entender a fenomenologia. A curva preta é a magnetização na direção x (M_x), a curva vermelha tracejada é a magnetização na direção y (M_y) e a curva azul é a magnetização na direção z (M_z). Na figura 4.15a é mostrado a magnetização para um sistema isotrópico. Observa-se oscilações das magnetizações M_y e M_z para campos próximos aos campos coercivos. Na figura 4.15b, para uma anisotropia na direção y ($\lambda_y = 1.5$), essas oscilações aumentam consideravelmente, pois a dinâmica do sistema é fortemente afetada com essa anisotropia. E para uma anisotropia maior ($\lambda_y = 2.0$), observamos um comportamento distinto de M_y , que atinge quase o valor máximo de saturação quando $M_x = 0$. Observamos que os momentos magnéticos estão girando no plano xy , como era de se esperar, pois irá se comportar como plano-fácil.

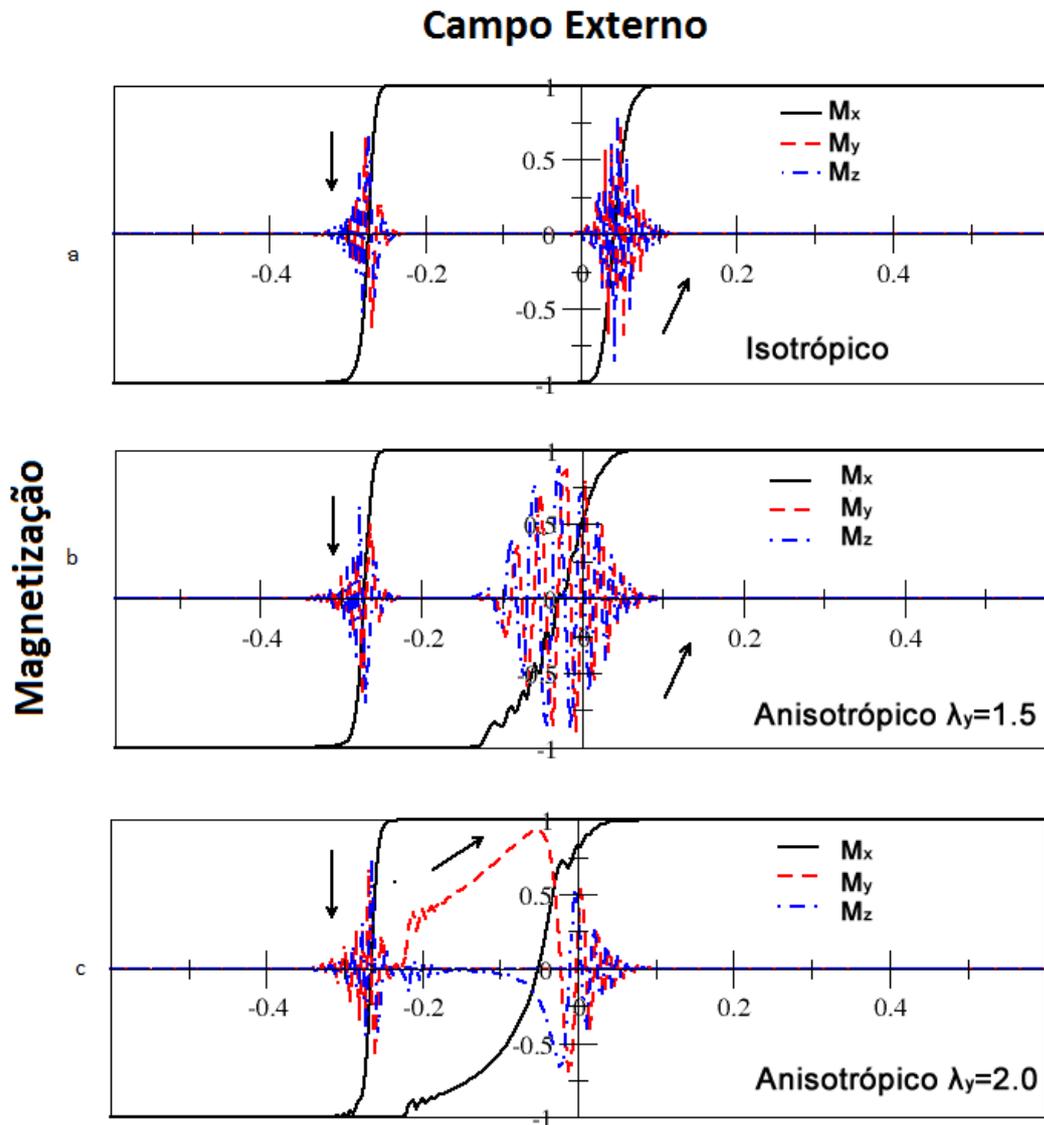


Figura 4.15: Esquema da magnetização nas direções x,y,z . Aqui, definimos isotrópico como sendo $\lambda_x = \lambda_y = 1, \lambda_z = 0$ e anisotrópico para $\lambda_x = 1, \lambda_y = 2, \lambda_z = 0$.

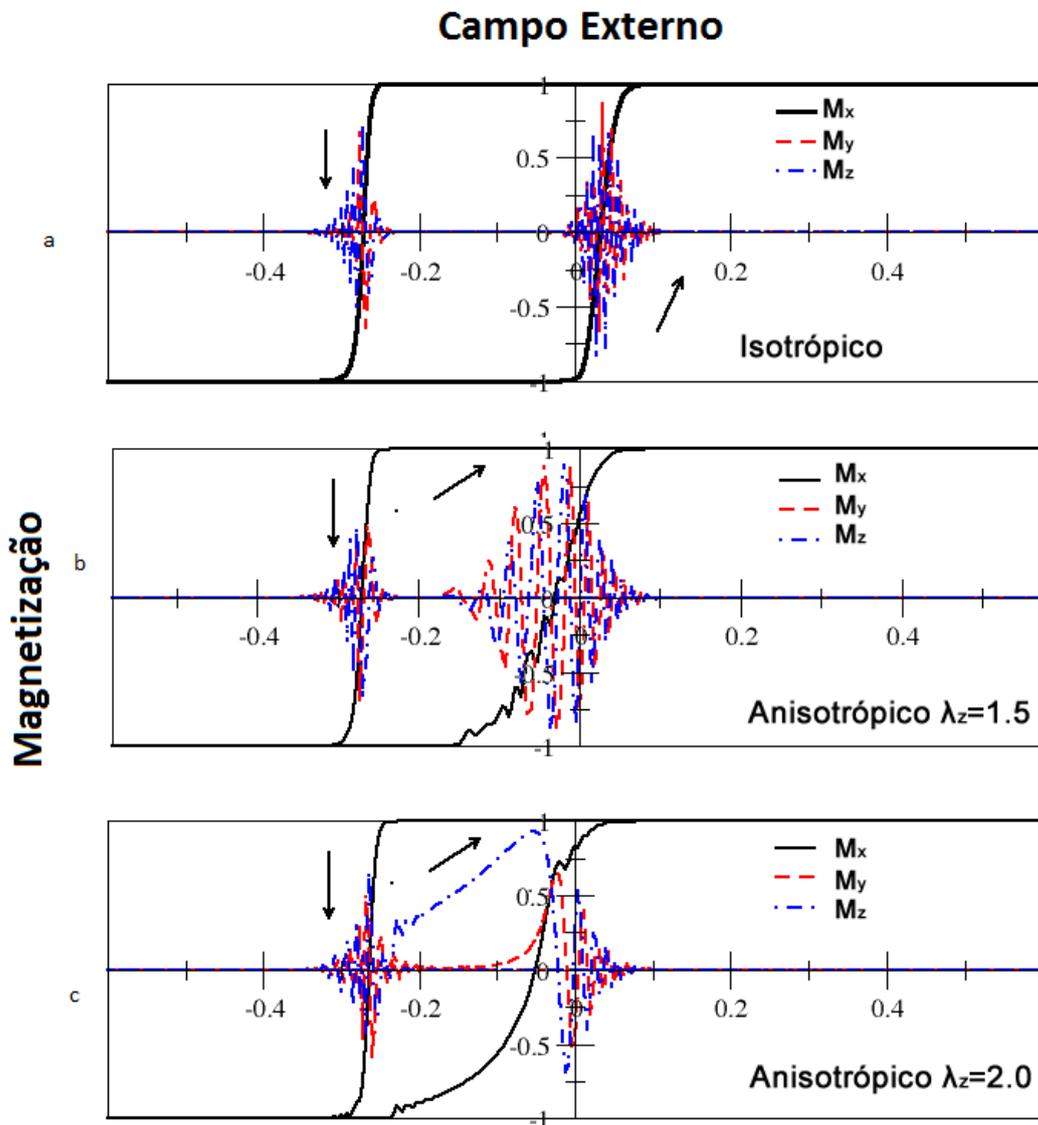


Figura 4.16: Esquema da magnetização nas direções x,y,z . Aqui, definimos isotrópico como sendo $\lambda_x = \lambda_z = 1, \lambda_y = 0$ e anisotrópico para $\lambda_x = 1, \lambda_y = 0, \lambda_z = 2$.

Observamos que, na segunda metade do ciclo de histerese, a magnetização M_y e M_z torna-se bem maior no ponto onde o campo externo H_{ext} é aproximadamente H_c^{dir} . Isso evidencia um alinhamento perpendicular à direção x . Como consequência desse alinhamento perpendicular,

a curva da magnetização M_x torna-se assimétrica [36]. Esse comportamento é denominado de magnetização reversa assimétrica e geralmente é associada com uma anisotropia uniaxial no FM e pode ser estudada medindo-se o campo de exchange bias em função do ângulo entre o campo de aplicação e o eixo de anisotropia do AFM. Em nossa simulação essa assimetria se origina da anisotropia apenas na interface. Esse alinhamento perpendicular é proporcional ao valor da constante de anisotropia.

A visualização da orientação perpendicular é observada na figura 4.17, quando a anisotropia é na direção y e na figura 4.18, quando a anisotropia é na direção z.

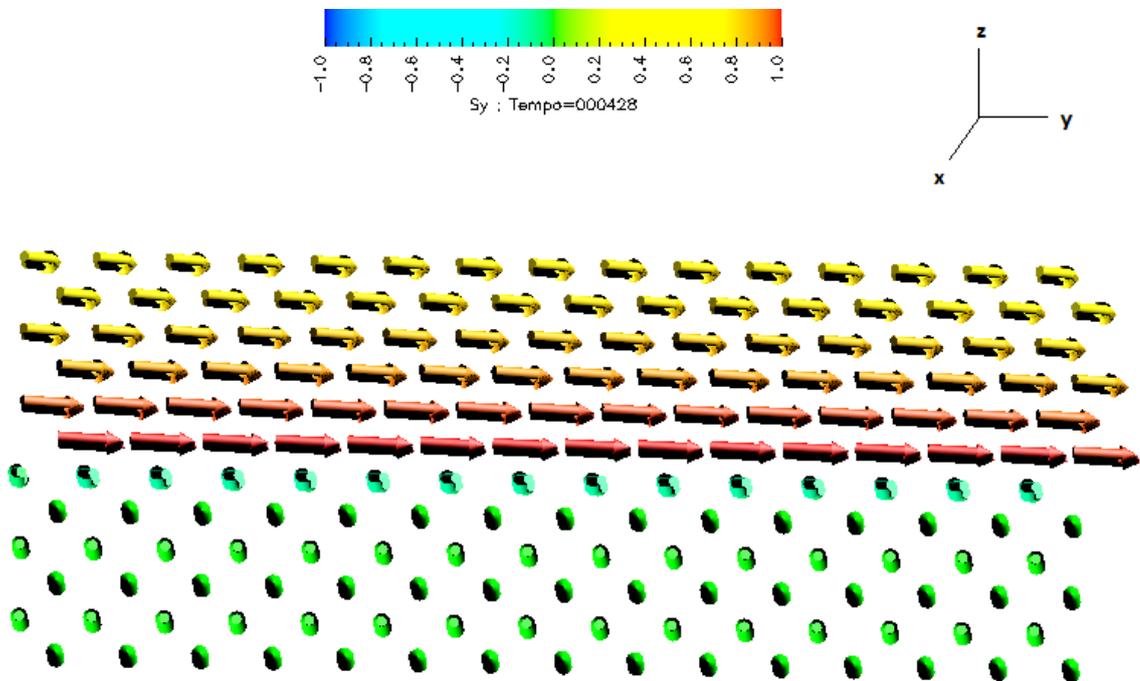


Figura 4.17: Acoplamento perpendicular entre as camadas da interface, a camada FM tende a girar escolhendo esse caminho. A coloração vermelha indica os spins orientados totalmente na direção y

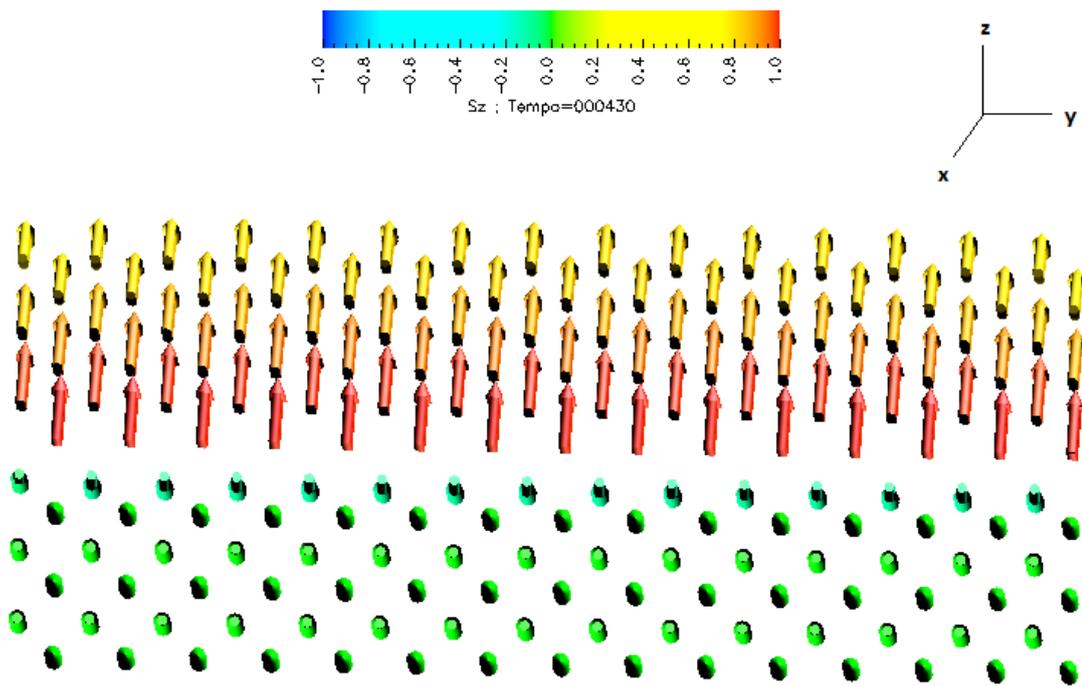


Figura 4.18: Acoplamento perpendicular entre as camadas da interface, a camada FM tende a girar escolhendo esse caminho. A coloração vermelha indica os spins orientados totalmente na direção z

O campo coercivo da esquerda permanece constante para diferentes valores da constante de anisotropia. Já o campo coercivo da direita depende dessa constante de anisotropia (ver figuras 4.13 e 4.14). Essa mudança está correlacionada com a magnetização assimétrica observada nas curvas de histerese que surgem devido a rotação dos momentos FM serem diferentes na ida (magnetização descendente) e na volta (magnetização ascendente) do ciclo de histerese. Apesar da magnetização do FM girar como um todo, como se fosse um domínio único, na ida e na volta, as direções escolhidas para essa rotação são diferentes como mostram as figuras 4.17 e 4.18. Ou seja, a anisotropia define uma direção de rotação para a magnetização do FM e isto só acontece na magnetização ascendente.

Os vídeos dessas simulações podem ser encontradas na referência [40]: isotrópico , anisotrópico na direção z e anisotrópico na direção y. Observamos que a adição de uma anisotropia na

interação FM-AFM muda o comportamento da rotação da magnetização do FM.

4.6 DEPENDÊNCIA ANGULAR DO EXCHANGE-BIAS

A magnetização reversa assimétrica foi primeiramente observada em um sistema Fe/FeF_2 [37]. Sabe-se que a rotação coerente da magnetização é o principal mecanismo para o ramo descendente do ciclo de histerese e, para o ramo ascendente, esse mecanismo pode estar relacionado com, por exemplo, paredes de domínio. Assim a magnetização torna-se assimétrica no ramo ascendente. Beckmann e colaboradores [38] dentro do contexto do modelo DSM (domain state model) propuseram que o ângulo entre o campo externo e o eixo de anisotropia AFM afeta fortemente o processo de magnetização reversa. Camarero e colaboradores [39] sugeriram que esse processo dependem da competição entre a anisotropia unidirecional na interface FM-AFM e a anisotropia uniaxial no FM. Iremos estudar a dependência angular do campo de exchange bias para analisar o comportamento assimétrico da magnetização observado nas figuras 5.15 e 5.16. Como foi definido anteriormente a anisotropia uniaxial no FM é desprezada em nosso sistema.

Novamente, baseado no modelo de Meiklejohn e Bean, queremos entender o comportamento do Exchange-Bias quando variamos a direção do campo em relação a direção definida pela anisotropia uniaxial do AFM. Considerando a equação da energia por unidade de área do modelo, eq. 4.5.1, e derivando em relação ao ângulo β , temos:

$$\frac{\partial E}{\partial \beta} = \frac{H}{\frac{-4J_{int}}{n_z}} (\text{sen}\theta \cos\beta - \text{sen}\beta \cos\theta) - \text{sen}\beta \quad (4.6.1)$$

fazendo $\frac{\partial E}{\partial \beta} = 0$ e isolando β ,

$$\text{tg}\beta = \frac{\text{sen}\theta}{\cos\theta + H_{eb}^\infty/H} \quad (4.6.2)$$

$$\beta = \text{tg}^{-1} \left[\frac{\text{sen}\theta}{\cos\theta + H_{eb}^\infty/H_{eb}} \right] \quad (4.6.3)$$

em que, $H_{eb}^\infty = \frac{4J_{int}}{n_z}$. Como a condição de exchange-bias é $(\theta - \beta) = \frac{\pi}{2}$, ponto em que a

magnetização e o campo aplicado estão perpendiculares, então:

$$\beta(\theta, H) = \text{tg}^{-1} \left[\frac{\text{sen}\theta}{\text{cos}\theta + H_{eb}^{\infty}/H_{eb}} \right] \quad (4.6.4)$$

$$\text{tg}\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) = \frac{\text{sen}\theta}{\text{cos}\theta + H_{eb}^{\infty}/H_{eb}} \quad (4.6.5)$$

Isolando H_{eb} , temos:

$$H_{eb} = -H_{eb}^{\infty} \text{cos}\theta \quad (4.6.6)$$

Utilizando as relações de R da seção 3.2.4, e calculando para o nosso sistema obtemos $R = 60$, nesse caso α se aproxima de zero, ou seja, a rotação do AFM torna-se negligenciável, que é o pressuposto inicial do modelo de Meiklejohn e Bean. Tal condição ($R \rightarrow \infty$) é satisfeita para grandes valores de anisotropia e espessura. Então o campo de exchange-bias pode ser escrita como [35]:

$$H_{eb}^{\alpha=0}(\theta) = \frac{-J_{int}}{\mu_0 M_{FM} t_{FM}} \text{cos}(\theta) \quad (4.6.7)$$

que está de acordo com o encontrado na eq. 4.6.6.

Primeiramente, realizamos uma simulação para medir o campo de exchange bias variando-se lentamente o campo aplicado ($\frac{\Delta H_{ext}}{\Delta t}$ muito pequeno, nessa simulação utilizamos $\frac{\Delta H_{ext}}{\Delta t} = 1$). Nessa condição, conseguimos reproduzir a previsão teórica (ver figura 4.19), quando encontramos $H_{eb} = -0.8460 \text{cos}(\phi)$, e usando a previsão (eq. 4.6.6) o valor seria $H_{eb}^{\infty} = 1$.

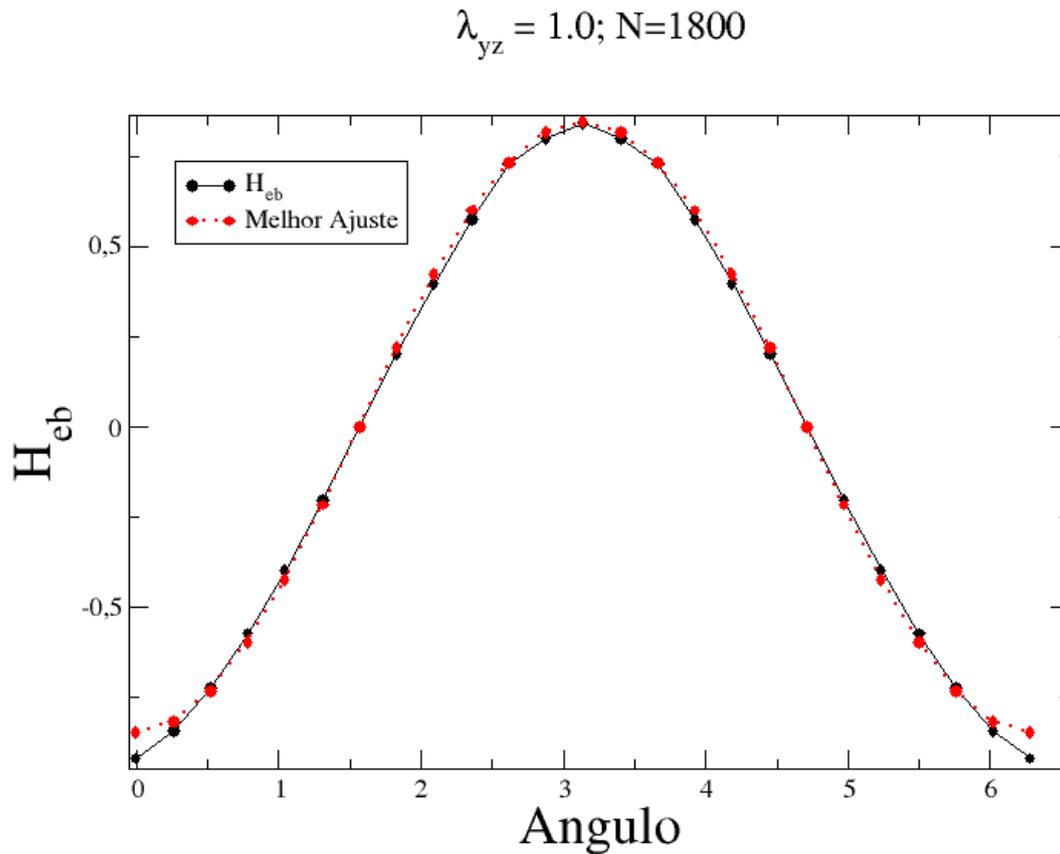


Figura 4.19: Variação do campo de exchange-bias como função do ângulo entre o eixo o campo aplicado e o eixo de anisotropia, no plano da amostra. $\lambda_x = 1, \lambda_y = 1$ e $\lambda_z = 1$, para 2 camadas FM. A função ajustada foi $H_{eb} = -0.8460\cos(\phi)$

Quando o ciclo de histerese é obtido para taxas maiores ($\frac{\Delta H_{ext}}{\Delta t} = 10$) o comportamento do campo de exchange bias em função do ângulo é fortemente alterado. Nas figura 4.20 e 4.21 mostramos os nossos resultados para o campo de exchange bias e o campo coercivo em função do ângulo para um sistema isotrópico de 6 e 12 camadas FM, respectivamente.

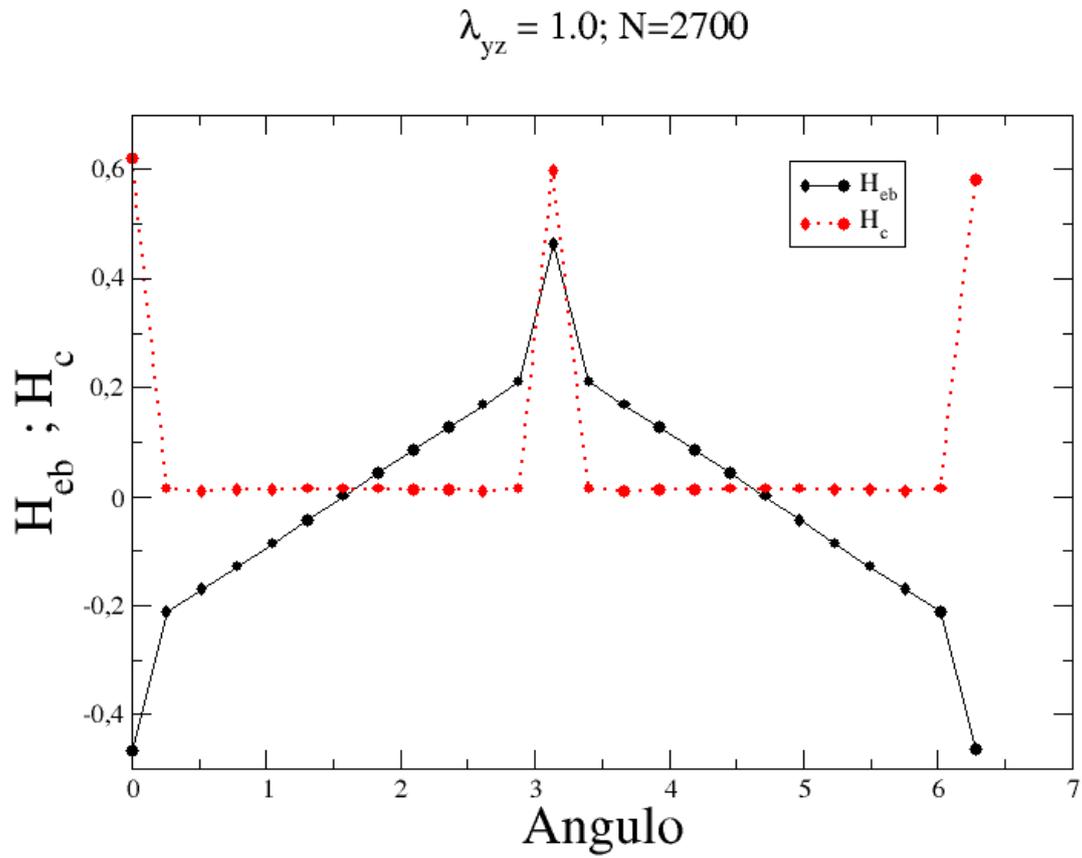


Figura 4.20: Variação do campo de exchange-bias e do campo coercivo como função do ângulo entre o eixo o campo aplicado e o eixo de anisotropia, no plano da amostra.

$\lambda_x = 1, \lambda_y = 1$ e $\lambda_z = 1$, isotrópico, para 6 camadas FM.

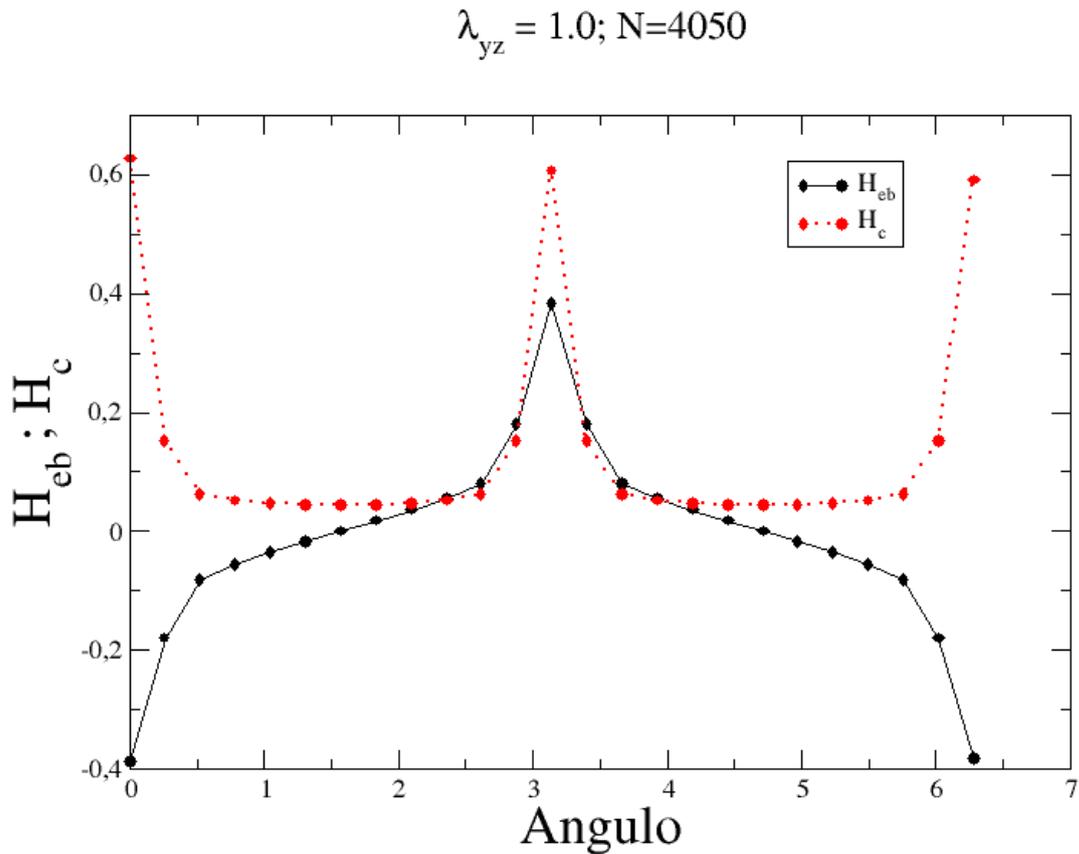


Figura 4.21: Variação do campo de exchange-bias e do campo coercivo como função do ângulo entre o eixo o campo aplicado e o eixo de anisotropia, no plano da amostra.

$\lambda_x = 1, \lambda_y = 1$ e $\lambda_z = 1$, isotrópico, para 12 camadas FM.

Como era esperado o valor do campo de exchange-bias e o campo coercivo são iguais para $\phi = 0$ e $\phi = \pi$. O comportamento de H_{eb} é bastante alterado quando variamos a taxa com que o campo externo é aplicado. Isso se deve ao torque que está sendo exercido sobre o FM, ou seja, agora temos $\frac{\partial E}{\partial \beta} \neq 0$.

Abaixo, nas figuras 4.22 e 4.23, mostramos os resultados para uma anisotropia na interface, $\lambda_y = 2$.

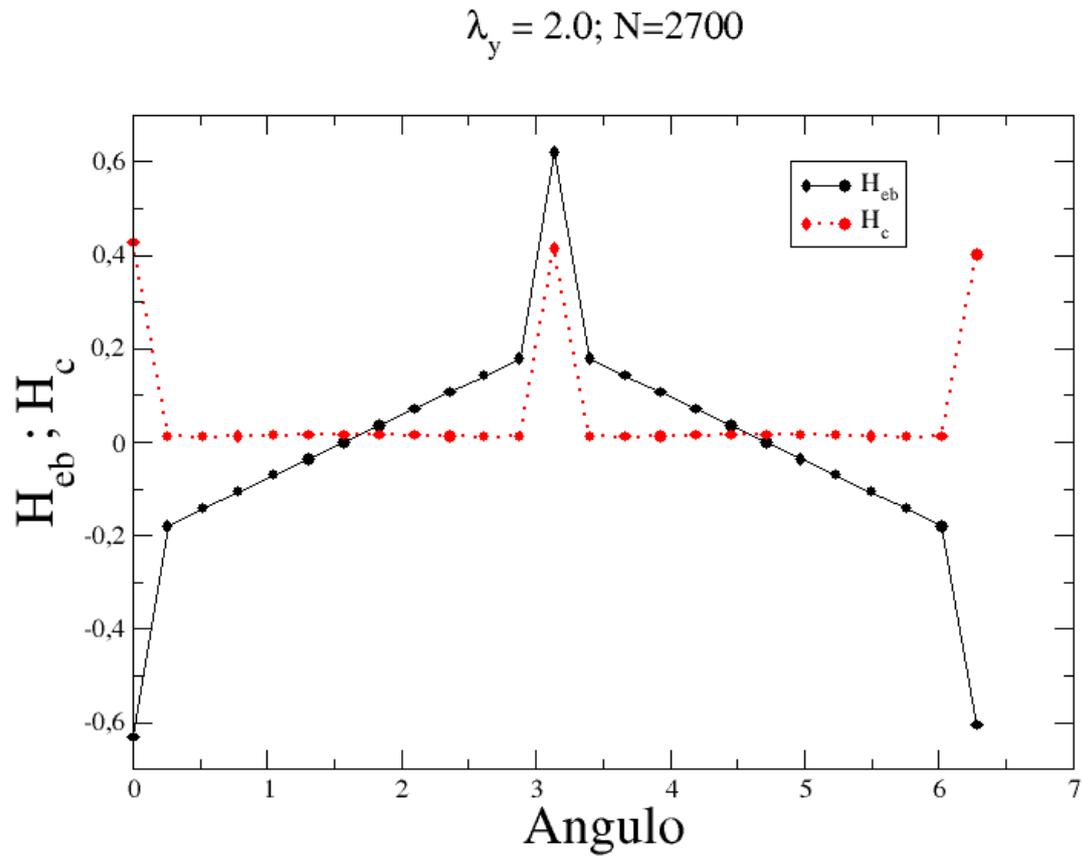


Figura 4.22: Variação do campo de exchange-bias e do campo coercivo como função do ângulo entre o eixo o campo aplicado e o eixo de anisotropia, no plano da amostra.

$\lambda_x = 1, \lambda_y = 2$ e $\lambda_z = 0$, para 6 camadas FM.

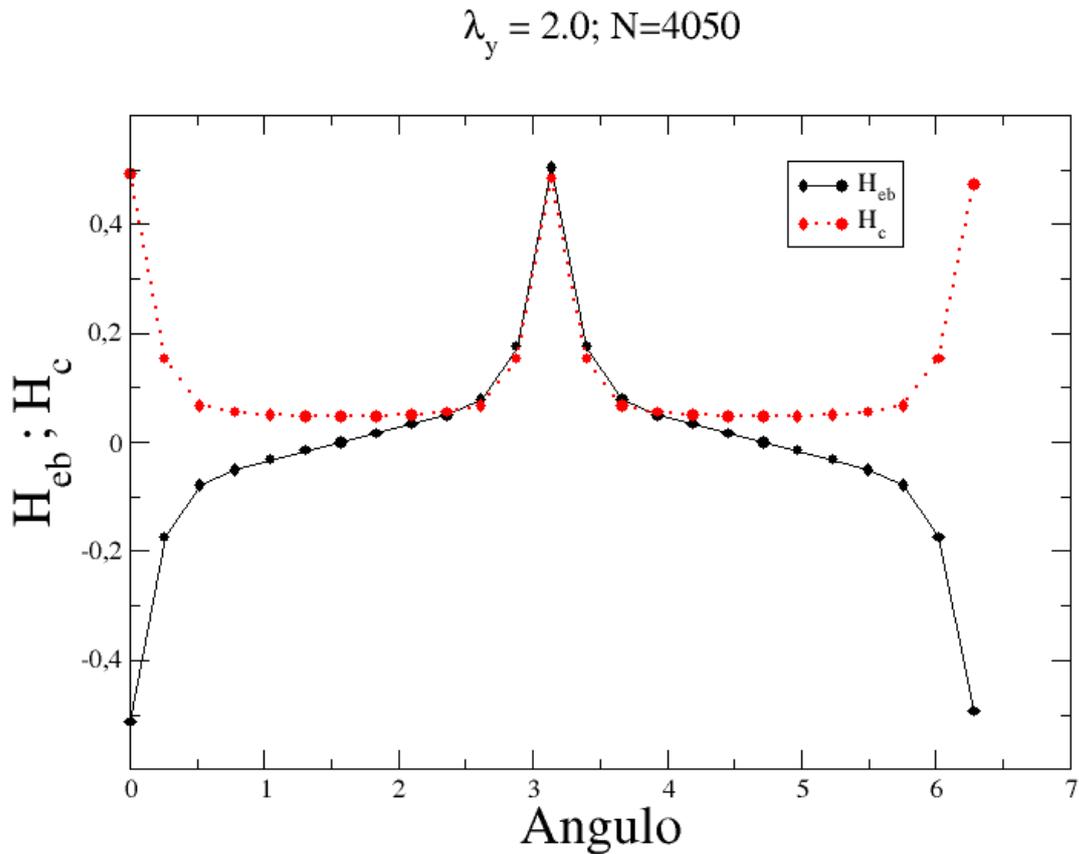


Figura 4.23: Variação do campo de exchange-bias e do campo coercivo como função do ângulo entre o eixo o campo aplicado e o eixo de anisotropia, no plano da amostra.

$$\lambda_x = 1, \lambda_y = 2 \text{ e } \lambda_z = 0, \text{ para } 12 \text{ camadas FM.}$$

O comportamento não se altera quando simulação é realizada para sistemas anisotrópicos ou isotrópicos, a única diferença é no valor do módulo de H_c e H_{eb} , quando $\phi = 0$ ou $\phi = \pi$

Analisando esses resultados, podemos concluir que não é possível verificar uma mudança no comportamento do exchange bias, em função do ângulo, que justifique a assimetria no ciclo de histerese. Conseguimos, no entanto, mostrar que a essa assimetria está relacionada com a direção de rotação do FM, que é determinada pela anisotropia na interface.

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Para o modelo isotrópico conseguimos mostrar, através de nossas simulações, que para pequenos valores de J_{int} pequenos, o comportamento de H_{eb} é linear como propõe o modelo de Meiklejohn e Bean.

Nosso modelo anisotrópico nos mostrou que a curva de histerese não é simétrica, quando colocamos um material FM sobre um substrato AFM. Inclusive nos modelos isotrópico essa característica aparece, mas não é tão forte quando colocamos uma anisotropia em y ou z .

Para o campo coercivo, percebemos existir uma forte dependência da anisotropia, o material tende a ser magneticamente mole quando aumentamos o valor da anisotropia de troca entre as camadas. Já era conhecido que ao aumentarmos o valor de J_{int} (sistemas isotrópicos), o material ficaria magneticamente mais duro, mas o que encontramos aqui é que o material fica magneticamente mole com o aumento de J_{int} , passando sempre pelo mesmo valor de H_c^{dir} e variando apenas em H_c^{esq} .

Também encontramos uma dependência angular do campo de exchange-bias quando medimos o ângulo entre o campo externo aplicado e o eixo de anisotropia uniaxial. E o mesmo se reduz ao valor esperado de $\cos\phi$ quando nos aproximamos da situação de equilíbrio. Não encontramos nenhum relato dessa dependência angular do EB na literatura.

As nossas perspectivas para trabalhos futuros é tentar entender melhor esse acoplamento perpendicular entre as camadas e as suas origens.

APÊNDICE A – PROGRAMA UTILIZADO

O programa utilizado para a realização dos cálculos de dinâmica de spins foi elaborado e criado por nós mesmos, desenvolvido em linguagem FORTRAN 90. O roteiro de cálculos e ações realizadas pelo programa é visualizado na figura abaixo:



Figura A.1: Esquema do algoritmo utilizado para a dinâmica de spins

APÊNDICE B – EQUAÇÕES DE MOVIMENTO

B.1 A EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHTS-GILBERT (LLG)

Landau e Lifshits [13] adicionaram um termo de amortecimento à equação 4.3.25. Mais tarde, Gilbert fez correções no termo de amortecimento [14]. Vamos entender um pouco desse termo de amortecimento.

Durante a precessão, a componente do momento na direção do campo permanece constante. O módulo do torque é nulo quando \vec{m} e \vec{H}_{eff} estão paralelos e, é máximo quando eles são perpendiculares.

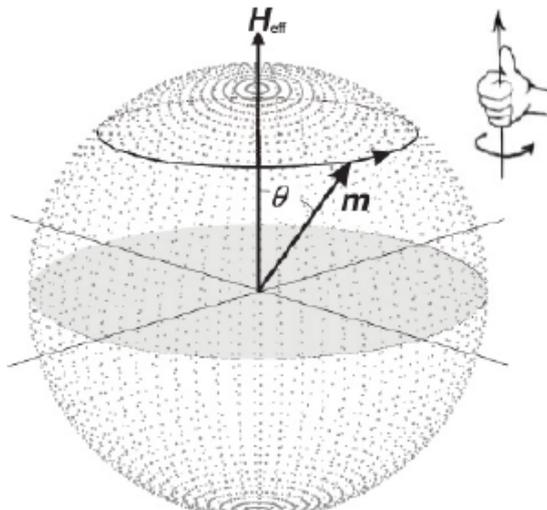


Figura B.1: Movimento de precessão do momento magnético de um elétron em relação a um campo magnético constante. [34]

Resultados experimentais indicam que, eventualmente, o momento magnético alinha-se com a direção do campo magnético. Tal situação é conhecida a muito tempo, a bússola é um

dispositivo que se comporta desse modo. O torque de precessão $\vec{T} = \mu_0 \vec{m} \times \vec{H}_{eff}$ não é capaz de realizar este alinhamento, porque ele é perpendicular a \vec{H}_{eff} . Como mostra a figura B.2, um torque adicional, perpendicular a \vec{m} e a \vec{T} , é fundamental para alinhar o momento magnético ao campo.

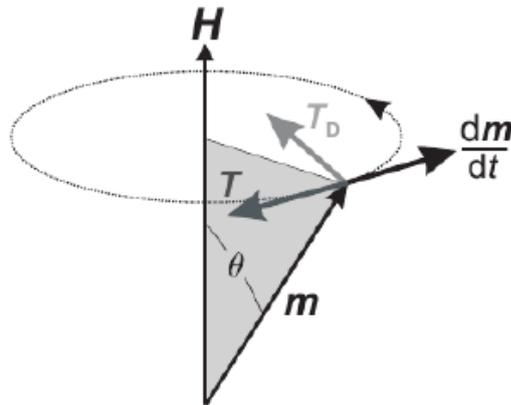


Figura B.2: O torque de precessão e o torque de amortecimento agindo sobre o momento magnético de um elétron num campo magnético constante. [34]

Da figura B.2, o torque de amortecimento, T_D , é escrito como:

$$\vec{T}_D^{LL} = -\frac{\alpha\mu_0}{m}\vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}_{eff}) \quad (\text{B.1.1})$$

A equação B.1.1 representa o torque de amortecimento, de acordo com Landau e Lifshits [13]. O torque com a correção de Gilbert [14], é:

$$\vec{T}_D^{LLG} = -\frac{\alpha}{m\gamma}\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \quad (\text{B.1.2})$$

em que, α é uma constante fenomenológica positiva, que depende do material, e γ é a razão giromagnética do material.

Adicionando esse torque de amortecimento à equação de movimento 4.3.25, temos:

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = \gamma\mu_0(\vec{m} \times \vec{H}_{eff}) - \frac{\alpha|\gamma|\mu_0}{m}\vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}_{eff}) \quad (\text{B.1.3})$$

A equação B.1.3 é conhecida com equação de Landau-Lifshts (L.L). Como essa equação explicava apenas o movimento de momentos magnéticos com pequenos valores de amortecimento ($\alpha \ll 1$), a correção de Gilbert conseguiu solucionar esse problema, explicando o movimento de momentos com amortecimento alto.

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = \gamma\mu_0(\vec{m} \times \vec{H}_{eff}) - \frac{\alpha|\gamma|}{m\gamma} \left(\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt} \right) \quad (\text{B.1.4})$$

A equação B.1.4 ficou conhecida como equação de Landau-Lifshts-Gilbert (L.L.G.).

APÊNDICE C – MÉTODOS NUMÉRICOS

Vamos mostrar aqui os métodos que utilizamos para integrar a equação B.1.4. Utilizamos dois métodos, Runge-Kutta [7] e Preditor-Corretor [8]. O método principal é o preditor-corretor, mas como ele depende de 4 passos anteriores, devemos calcular esses passos iniciais com Runge-Kutta, que não depende de nenhum passo anterior além da condição inicial.

C.1 O MÉTODO RUNGE-KUTTA

Vamos considerar uma equação diferencial genérica de primeira ordem:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t) \quad (\text{C.1.1})$$

O método de Runge-Kutta é utilizar um método de solução numérica para equações como a eq. C.1.1, que para calcular x_{j+1} usam apenas o valor conhecido de x_j .

$$x_{j+1} = x_j + \Delta t f(x_j, t_j) \quad (\text{C.1.2})$$

Podemos escolher, por simetria, para argumento da função f o extremo à direita do intervalo $[t_j, t_{j+1}]$, isto é:

$$x_{j+1} = x_j + \Delta t f(x_{j+1}, t_{j+1}) \quad (\text{C.1.3})$$

Para melhorar as soluções devemos utilizar uma forma intermediária entre as das equações , C.1.2 e C.1.3, ficando:

$$x_{j+1} = x_j + \Delta t f\left(\frac{x_{j+1} + x_j}{2}, \frac{t_{j+1} + t_j}{2}\right) \quad (\text{C.1.4})$$

Como não conhecemos o valor de x_{j+1} para inserir na função f temos que usar a eq. C.1.2 para aproximar x_{j+1} para usar corretamente na função f , então:

$$x_{j+1} = x_j + \Delta t f(x_j + 0,5\Delta t f(x_j, t_j), t_j + 0,5\Delta t) \quad (\text{C.1.5})$$

A equação acima é uma Runge-Kutta de 2ª Ordem [7]. O método Runge-Kutta em ordens superiores usa médias ponderadas da função f calculada nos extremos e em pontos intermediários do intervalo $[t_j, t_{j+1}]$. O mais utilizado é o método com precisão de quarta ordem. Considerando novamente a eq.C.1.1 e definindo $h = \frac{\Delta t}{2}$ o esquema é [7]:

$$F_1 = f(x_j, t_j) \quad (\text{C.1.6})$$

$$F_2 = f(x_j + hF_1, t_{j+h}) \quad (\text{C.1.7})$$

$$F_3 = f(x_j + hF_2, t_{j+h}) \quad (\text{C.1.8})$$

$$F_4 = f(x_j + hF_3, t_j + \Delta t) \quad (\text{C.1.9})$$

$$x_{j+1} = x_j + \frac{\Delta t}{6}(F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4) \quad (\text{C.1.10})$$

Em princípio podem ser construídos esquemas em qualquer ordem. Quanto mais alta a ordem, maior o número de vezes que se necessita calcular a f por passo de integração. Por isso, na maioria dos problemas, não é vantajoso ir além da 4ª ordem.

C.2 O MÉTODO PREDITOR-CORRETOR

O método descrito anteriormente é chamado de passo único ou simples, pois somente a informação do passo anterior é utilizada para o cálculo do próximo passo. O método de Adams-Moulton [8] utiliza o fato de que iterações utilizando um outro método, i.e. Runge-Kutta, já foram realizadas, para guardar as informações dos valores pré calculados de f , com isto é construído um polinômio que aproxima a derivada da função e consegue-se extrapolar para o próximo intervalo.

O número de iterações anteriores a ser utilizadas determinará o grau do polinômio. Temos Adams-Moulton de quarta ordem [8]:

$f_n, f_{n-1}, f_{n-2}, f_{n-3}$, podem ser calculados por Runge-Kutta.

Preditor

$$f_{n+1} = \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}) \quad (\text{C.2.1})$$

Utilizando o valor de f_{n+1} calculado no passo preditor, temos:

Corretor

$$f_{n+1} = \frac{h}{24}(9f_{n+1} - 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) \quad (\text{C.2.2})$$

Os erros locais desse método, para o preditor e o corretor respectivamente, são [8] $\frac{251}{720}h^5$ e $\frac{19}{720}h^5$.

Sendo que: $f_n, f_{n-1}, f_{n-2}, f_{n-3}$ são os valores da função calculadas utilizando alguma das técnicas de passo único, nos primeiros passos, e daí por diante os valores das quatro iterações anteriores são armazenadas. Este método tem algumas vantagens em relação aos anteriores pois usando o fato que já temos alguns passos calculados, para conseguir uma precisão equivalente ao método Runge-Kutta de quarta ordem precisaremos apenas calcular duas vezes a função, ao invés de quatro vezes como no Runge-Kutta, ficando claramente mais rápido.

Veja abaixo a diferença na energia de um oscilador harmônico clássico, usando Runge-Kutta

e Preditor-Corretor.

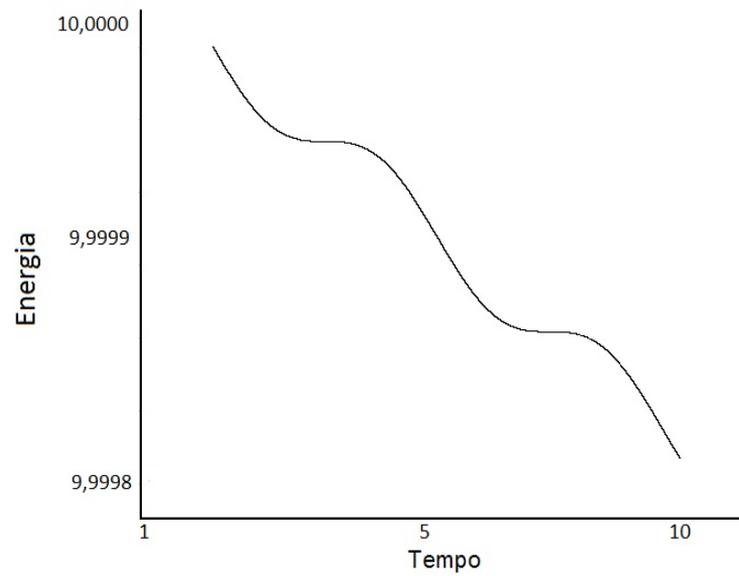


Figura C.1: Energia x Tempo calculado por Runge-Kutta, para um passo $h = 10^{-4}$

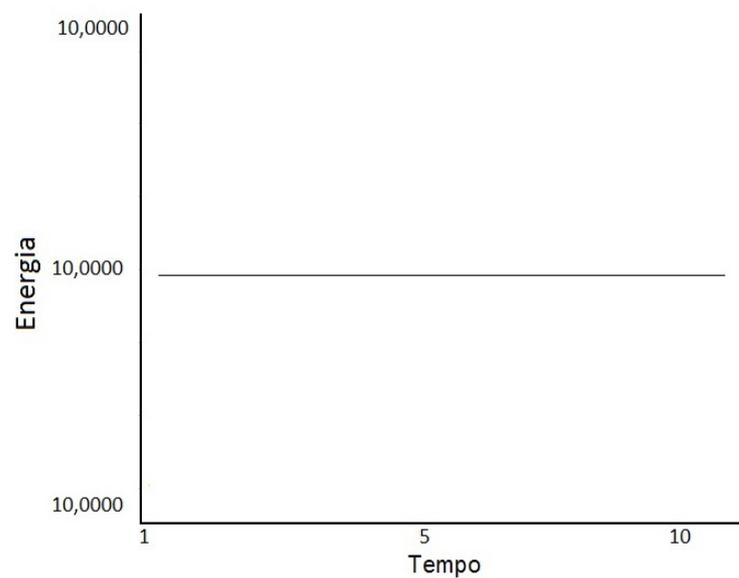


Figura C.2: Energia x Tempo calculado por Preditor-Corretor para um passo $h = 10^{-4}$

Veja que o Preditor-Corretor é bem mais preciso que o Runge-Kutta, como já falado anteriormente.

REFERÊNCIAS

- [1] Review D Applications: C. Tang, J. Appl. Phys. 55 (1984) 2226;
- [2] Eisberg e Resnick, Física Quântica, Elsevier, 1979.
- [3] John David Jackson, Classical Electrodynamics, 1998, IE-WILEY, 3rd Edition.
- [4] <http://efisica.if.usp.br/eletricidade/>
- [5] Frederick Reif, Fundamentals of Statistical and Thermal Physics, McGraw-Hill Science/Engineering/Math; 1st edition (June 1, 1965)
- [6] <http://elixir.dqb.fc.ul.pt/fartaria>.
- [7] Cláudio Scherer, Métodos Computacionais da Física, Livraria da Física, 2005.
- [8] [http://www.professorglobal.cbpf.br/mediawiki/index.php/Adams-Moulton method/](http://www.professorglobal.cbpf.br/mediawiki/index.php/Adams-Moulton_method/).
- [9] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics (Revised Edition), Addison Wesley; 1st edition.
- [10] White, R.W., Quantum Theory of Magnetism, 3ed, Springer (2007).
- [11] P. Fazekas and P. W. Anderson, Philos. Mag. 30, 423 (1974).
- [12] L. Landau, E. Lifshits, ISSN 2071-0194. Ukr. J. Phys. 2008. V. 53, Special Issue.
- [13] L. Landau, E. Lifshits, E. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. Phys. Zeitsch, v. 8, p. 153-169, 1935.
- [14] T. L. Gilbert, IEEE Transactions on magnetics, Vol., 40, No. 6, November 2004
- [15] Santos, E.B., Métodos Numéricos, Dinâmica Molecular e Solução Numérica da Equação de Schrödinger, Universidade Federal de Juiz de Fora, 2009. Monografia.
- [16] Meiklejohn, Bean, Phys. Rev. 102 (1956) 1413.
- [17] J. Nogues, Ivan K. Schuller, J. Magn. Magn. Mater. 192 (1999) 203-232.
- [18] K. O'Grady, et al., J. Magn. Magn. Mater. (2009), doi:10.1016/j.jmmm.2009.12.011.
- [19] R. Jungblut, R. Coehoorn, M.T. Johnson. J. van de Stegge, A. Reinders, J. Appl. Phys. 75 (1994) 6659.
- [20] Review: J.S. Kouvel, J. Phys. Chem. Sol. 24(1963) 795.
- [21] M. Kiwi, J. Magn. Magn. Mat. 234 (2001) 584-595.

- [22] W.P. Meiklejohn, *J. Appl. Phys.* 33(1962) 1328.
- [23] W.P. Meiklejohn and C.P. Bean, *Phys. Rev.* 105,3 (1957).
- [24] D. Lederman, R. Ramirez and M. Kiwi, *Phys. Rev. B* 70, 184422 (2004).
- [25] Chappert, C.; Bruno, P., *Journal of Applied Physics*, 5736(1988)
- [26] A. P. Malozemoff, *Phys. Rev. B* 35, 3679 (1987).
- [27] T.C. Schulthess, W.H. Butler, *Phys. Rev. Letters* 81 (1998) 4516.
- [28] T.C. Schulthess, W.H. Butler, *J. Appl. Phys.* 85 (1999) 5510.
- [29] M. D. Reichtin and B. L. Averbach. Long-range magnetic order in coo. *Phys. Rev. B.*, 6:4294, 1972.
- [30] F. Radu, M. Etzkorn, R. Siebrecht, T. Schmitte, K. Westerholt, and H. Zabel. Interfacial domain formation during magnetization reversal in exchange-biased coo/co bilayers. *Phys. Rev. B.*, 67:134409, 2003.
- [31] W. H. Meiklejohn and C. P. Bean. New magnetig anisotropy. *Phys. Rev.*, 105:904, 1957.
- [32] R. Coehoorn. Exchange anisotropy, stoner-wolhfarth model. Lecture Notes, Eindhoven University of Technology, page Eindhoven University of Technology, 2000-2001.
- [33] H. Fujiwara, C. Hou, M. Sun, and H. S. Cho. Effect of exchange coupling of polycrystalline antiferromagnetic layers on the magnetization behavior of soft magnetic layers. *IEEE Transactions on Magnetics*, 35(5):3082, 1999.
- [34] STOHR, J.; SIEGMANN, H. *Magnetism from fundamentals to nanoscale dynamics*. [S.l.]: Springer, 2006.
- [35] Ch. Binek, A. Hochstracht, and W. Kleemann. *J. Magn. Magn. Mater.* 234:353, 2001.
- [36] Jing Chen, Guojun Jin e Yu-qiang M, *J. Phys.: Condens. Matter* 19 (2007) 23622;
- [37] Fitzsimmons M R, Yashar P, Leighton C, Schuller I K, Nogués J, Majkrzak C F and Dura J A 2000 *Phys. Rev. Lett.* 84 3986;
- [38] Beckmann B, Nowak U and Usadel K D 2003 *Phys. Rev. Lett.* 91 187201;
- [39] Camarero J, Sort J, Hoffmann A, García-Martín J M, Dieny B, Miranda R and Nogués J 2005 *Phys. Rev. Lett.* 95 057204;
- [40] Para os vídeos, entre em contato: evandro.bastos@gmail.com