

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
DISSERTAÇÃO DO CURSO DE MESTRADO EM FÍSICA

Josiel Carlos de Souza Gomes

ESTUDO DA DINÂMICA DA PAREDE DE
DOMÍNIO TRANSVERSAL EM NANOFIOS
MAGNÉTICOS MEDIANTE APLICAÇÃO
DE CORRENTE DE SPIN POLARIZADA

Juiz de Fora
Fevereiro de 2015

JOSIEL CARLOS DE SOUZA GOMES

**ESTUDO DA DINÂMICA DA PAREDE DE
DOMÍNIO TRANSVERSAL EM NANOFIOS
MAGNÉTICOS MEDIANTE APLICAÇÃO
DE CORRENTE DE SPIN POLARIZADA**

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

Orientador: Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel

Co-orientador: Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura

Juiz de Fora
Fevereiro de 2015

JOSIEL CARLOS DE SOUZA GOMES

**ESTUDO DA DINÂMICA DA PAREDE DE
DOMÍNIO TRANSVERSAL EM NANOFIOS
MAGNÉTICOS MEDIANTE APLICAÇÃO DE
CORRENTE DE SPIN POLARIZADA**

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.

Dissertação defendida e aprovada em ____/____/____, pela comissão
julgadora:

Prof. Dr. Sidiney de Andrade Leonel

Prof. Dr. Pablo Zimmermann Coura

Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa

Juiz de Fora
Fevereiro de 2015

Agradecimentos.

Aos meus que me apoiaram o tempo todo e acreditaram que esta conquista era possível.

Ao meu orientador Sidiney por ter me dado a oportunidade de continuar trabalhando com ele, me ajudado sempre que precisei e pela paciência que teve em aceitar minhas dificuldades.

À todos os professores, em especial ao Pablo Zimmermann Coura e Rodrigo Alves Dias pela dedicação que tiveram em me ajudar sempre que foi necessário.

Aos amigos, companheiros de trabalho que sempre estiveram por perto, em especial ao Everton, Jackson, Maxwell e João Paulo que também contribuíram diretamente com este trabalho.

À minha namorada Nayara pela paciência e incentivo durante todo o curso.

Aos demais amigos que souberam compreender minha ausência e também me insentivaram bastante para que eu concluísse o Mestrado.

Aos órgãos de fomento FAPEMIG, CNPq e CAPES pelo auxílio financeiro.

Resumo

A nanotecnologia é uma área de estudo promissora e que nos mostra resultados bastante surpreendentes. Amostras magnéticas (Cobalto e liga de Permalloy ($Ni_{81}Fe_{19}$), por exemplo) em escala nanométrica, têm como aplicabilidade importante a gravação magnética devido à crescente demanda por meios de gravação cada vez mais rápidos e de alta capacidade de armazenamento. Para determinados tamanhos de nanofios, observa-se a presença de domínios magnéticos e paredes de domínios do tipo vórtice ou transversal que podem ser transportadas para diferentes regiões sem deformação. Pode-se usar tais paredes como bit de informação mas, para isso, precisa-se conhecer com detalhes o comportamento dessas paredes em diversas situações. Neste presente trabalho utilizamos simulações numéricas para estudar o comportamento da magnetização em nanofios retangulares (nanofitas) de Permalloy-79, que apresentam parede de domínio transversal entre domínios “head-to-head”. Utilizamos nestas simulações um modelo no qual os momentos magnéticos interagem através da interação de troca e a interação dipolar. Embora a maioria dos trabalhos encontrados utilizem campo magnético para mover a parede, optamos por aplicar corrente de spin-polarizado na direção do nanofio devido ao fato de ser mais prático de ser produzido. A dinâmica do sistema é regida pelas equações de Landau-Lifshitz-Gilbert e a atuação da corrente é introduzida nessas equações. Fizemos uma abordagem teórica na qual pode-se mostrar como esta equação de Landau-Lifshitz-Gilbert para aplicação de corrente foi obtida. A integração da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert é feita utilizando o método de Runge-Kutta e de Predição-Correção. Baseado nessas teorias, escrevemos um programa na linguagem Fortran-90 para realizar as simulações. Em nossos resultados observamos o comportamento da velocidade da parede de domínio em função do tempo e da densidade de corrente. Comparamos estes resultados com a bibliografia.

Palavras-chave: Nanofios magnéticos, corrente de spin-polarizado, parede de domínio transversal, equação de Landau-Lifshitz-Gilbert.

Abstract

Nanotechnology is a promising field of study and show us pretty amazing results. Magnetic samples (Cobalt and alloy Permalloy ($81NiFe_{19}$), for example) at the nanometer scale, have as important applicability the magnetic recording due to the growing demand for recording media ever faster and high storage capacity. For certain sizes of nanowires, it is observed the presence of magnetic domains and vortex domain walls or transverse domain wall which can be transported to different regions without deformation. It can use such walls as bit of information, but for that it is necessary to know in detail the behavior of these walls in various situations. In this work we used numerical simulations to study the behavior of the magnetization in rectangular nanowires (nanostrip) of Permalloy-79, which have transverse domain wall between domains "head-to-head." We used in these simulations a model in which the magnetic moments interact through the exchange interaction and the dipolar interaction. Although most studies found use magnetic field to move the wall, we decided to apply spin-polarized current toward the nanowire due the fact that it is more practical to be produced. The dynamics of the system is governed by the equations of Landau-Lifshitz-Gilbert and the current performance is introduced in these equations. We made a theoretical approach in which you can show how this equation of Landau-Lifshitz-Gilbert for applying current was obtained. The integration of the equation of Landau-Lifshitz-Gilbert is done using the Runge-Kutta and Prediction-Correction methods. Based on these theories, we wrote a program in Fortran-90 language to perform the simulations. In our results we observed the behavior of the domain wall velocity as a function of time and current density. We compare these results with the literature.

Keywords: Magnetic nanowires, spin-polarized current, transversal domain wall, Landau-Lifshitz-Gilbert equation.

Lista de Figuras

1.1	Micrografias de força magnética de um nanofio individual de $(Co/Pt)_{10}$ com uma largura de $W = 400nm$, após um campo magnético de $B = 2T$ que foi aplicado (a) longitudinalmente, (b) transversalmente. Ambas as imagens mostram um estado remanescente de multi-domínio comparável com domínios magnetizados para cima e para baixo. Figura retirada de [5].	12
1.2	Temos em a) uma representação gráfica de uma nanofita com regiões de domínio “head-to-head” separadas por uma parede de domínio do tipo transversal, e na figura b), regiões de domínio “tail-to-tail”.	13

1.3	<p>A RM é um nanofio ferromagnético, com dados codificados como um padrão de domínios magnéticos ao longo de uma porção do fio. Pulsos de corrente de spin-polarizados movimentam todo o padrão de PDs coerentemente ao longo do comprimento do fio. O nanofio é aproximadamente duas vezes tão longo quanto o padrão da PD armazenado, de modo que a PD pode ser deslocado em direção qualquer. (A) Uma pista verticalmente configurada oferece a maior densidade de armazenamento, armazenando o padrão em um nanofio normalmente em forma de U perpendicular ao plano do substrato. Os dois desenhos mostram os padrões magnéticos na pista antes e depois das PDs desceram um ramo da U, antes dos elementos de leitura e escritas, e em seguida o outro ramo. (B) Uma configuração usa um nanofio horizontalmente paralela ao plano do substrato. Dados (C) Leitura do padrão armazenado é feito através da medição da magnetorresistência túnel de um elemento de junção túnel magnética ligado à pista. (D) A gravação de dados é realizado, por exemplo, os campos de franja de um PD Movido em um segundo nanofio ferromagnético orientadas perpendicularmente ao nanofio de armazenamento. (E) Matriz de pistas são construídas em um chip para permitir o armazenamento de alta densidade. Figura retirada de [9].</p>	14
2.1	Representação gráfica de um elétron numa órbita circular de Bohr.	19
2.2	Representação gráfica de domínios magnéticos num ferromagneto.	24
2.3	Representação gráfica de uma parede de domínio num ferromagneto.	24
2.4	Representação gráfica de um dipolo magnético.	27
3.1	(esquerda) Precessão giromagnética não amortecida. (direita) Precessão giromagnética amortecida. [22]	31
4.1	Comprimento L , largura w e espessura t ao longo dos eixos x , y e z respectivamente do nanofio, com $L \gg w > t$ [7].	39
4.2	Temos em a) uma representação gráfica de uma nanofita com uma parede de domínio em seu centro do tipo transversal, e na figura b), uma parede do tipo vórtice.	40

4.3	Diagrama de fase para as estruturas de parede de domínio tipo vórtice e transversal. [7]	41
4.4	Temos em a) uma representação gráfica de uma nanofita com regiões de domínio “head-to-head” separadas por uma parede de domínio do tipo transversal, e na figura b), regiões de domínio “tail-to-tail”.	41
5.1	Representação gráfica de uma célula de FCC.	45
5.2	Representação gráfica que representa o mecanismo usado para redefinir as células. Em (a) temos um sistema real constituído por muitos momentos atômicos. Em (b) temos uma representação da discretização do sistema (a), onde cada vetor representa as médias espaciais dos momentos magnéticos nas células.	46
6.1	Representação gráfica do configuração inicial dos spins dada ao nanofio.	58
6.2	Representação gráfica da configuração dos spins no estado fundamental.	59
6.3	Representação gráfica de um exemplo do pulso de corrente aplicada (neste exemplo, $I = 100\mu A$) em função do tempo (duração do pulso $t = 1ns$) sobre os nanofios magnéticos.	59
6.4	Representação gráfica de uma sequência temporal do movimento de uma parede de domínio transversal em um nanofio com $\alpha = 0$ sob a aplicação de um pulso de corrente de spin-polarizado, cuja densidade de corrente é $j_e = 50 \times 10^{10} A/m^2$, com 1 ns de duração num nanofio de dimensões $(5 \times 15 \times 1255)nm^3$	60
6.5	Gráfico da velocidade da parede de domínio transversal em um nanofio de dimensões $(5 \times 20 \times 1255)nm^3$ com densidade de corrente $j_e = 50 \times 10^{10} A/m^2$	61
6.6	Velocidade da PDT em um nanofio de dimensões $(5 \times 15 \times 1255)nm$ com um campo de amplitude $\mu_0 H_{ap} = 6mT$	61
6.7	Gráfico que apresenta o comportamento da velocidade da parede de domínio em função do tempo num nanofio de dimensões $(5 \times 20 \times 1255)nm^3$ sob uma densidade de corrente de spin-polarizado $j_e = 15 \times 10^{10} A/m^2$	62

6.8	Gráfico que apresenta o comportamento da velocidade da parede de domínio em função do tempo num nanofio de dimensões $(5 \times 20 \times 1255)nm^3$ sob uma densidade de corrente de spin-polarizado $j_e = 55 \times 10^{10}A/m^2$	63
6.9	Representação gráfica de uma sequência temporal do movimento de uma parede de domínio transversal em um nanofio com $\alpha = 0$ sob a aplicação de um pulso de corrente de spin-polarizado, cuja densidade de corrente é $j_e = 85 \times 10^{10}A/m^2$, com 1 ns de duração num nanofio de dimensões $(5 \times 25 \times 1255)nm^3$	64
6.10	Gráfico da velocidade máxima alcançada pela parede de domínio em função da densidade de corrente para nanofios de espessura a) $t = 5nm$, b) $t = 10nm$	65
6.11	Gráfico da velocidade média alcançada pela parede de domínio em função da densidade de corrente para nanofios de espessura a) $t = 5nm$, b) $t = 10nm$	66
6.12	Gráfico da velocidade média alcançada pela parede de domínio em função da densidade de corrente para nanofios de largura $W = 25nm$	67
6.13	Velocidade máxima alcançada pela PDT em função da amplitude de campo magnético $\mu_0 H_{ap}$ para os nanofios de espessura $t = 5$ nm estudados [7]. Equivalente aos gráficos da Figura 6.10.	69
6.14	Velocidade média da PDT em um nanofio de, a) $t = 5nm$ b) $t = 10nm$ para diferentes larguras em função da amplitude de campo magnético $\mu_0 H_{ap}$ [7]. Equivalente aos gráficos da Figura 6.11.	69
6.15	Velocidade da PDT em função da amplitude de campo magnético aplicado em um nanofio de largura $w = 20nm$ para as espessuras $t = 5, 10$ e $15nm$ [7]. Equivalente ao gráfico da Figura 6.12.	70

Sumário

Resumo	2
Abstract	3
1 Introdução	10
2 Revisão e Conceitos Gerais	16
2.1 Revisão Histórica Sobre Eletromagnetismo	16
2.2 Momento Magnético	19
2.3 Tipos de Materiais Magnéticos	22
2.4 Modelo de Heisenberg	24
2.4.1 Limite Clássico	25
2.5 Interação Dipolar	26
3 Dinâmica de Spin	29
4 Nanofitas Magnéticas	39
5 Modelagem Computacional	44
5.1 Simulação Micromagnética	44
5.1.1 Hamiltoniana micromagnética	47
5.1.2 Dinâmica de Spin	49

5.2	Integração Numérica	54
6	Resultados e Discussões	58
6.1	Conclusões	68
6.2	Perspectivas Futuras	70
A	Modelo de Heisenberg	71
B	Energia Dipolar	79
C	Cálculo Complementar da Dinâmica de Spin	85

Capítulo 1

Introdução

Entende-se por nanotecnologia o estudo de manipulação da matéria numa escala de medida entre 1 a 100 nanômetros, ao menos numa dimensão. Este termo surgiu em uma conferência do físico Richard Feynman, que apresentou uma ideia de que poderíamos mover os átomos e liga-los da maneira que quiséssemos. É uma área de estudo promissora e que nos mostra resultados bastante surpreendentes, cujo estudo tem permitido não apenas a fabricação de amostras magnéticas nesta escala como também a evolução de técnicas experimentais para medir suas propriedades. [1, 2]

Os fenômenos magnéticos foram, talvez, os primeiros a despertar a curiosidade da humanidade sobre o interior da matéria. Desde a descoberta de magnetos permanentes no século XIV, os fenômenos ligados ao magnetismo vêm sendo amplamente investigados. Em materiais ferromagnéticos, os momentos magnéticos dos átomos se alinham paralelamente devido ao intenso campo de troca e divide-se espontaneamente em várias regiões denominadas domínios magnéticos para minimizar a energia magnetostática. Materiais ferromagnéticos em escala nanométrica apresentam propriedades interessantes,

tanto do ponto de vista fundamental quanto do ponto de vista de aplicação tecnológica. Existe hoje uma crescente demanda por meios de gravação cada vez mais rápidos e de alta capacidade de armazenamento, fazendo com que tais amostras tenham como importante aplicabilidade a gravação magnética. Estas amostras magnéticas na forma de cilindro, disco ou prisma são fabricados com materiais magnéticos tais como Cobalto e liga de Permalloy (Ni 81Fe19) [3, 4].

No fim dos anos 80 foi descoberta a magnetoresistência gigante (GMR, giant magnetoresistance), que é um fenômeno associado a microestruturas magnéticas compostas de multicamadas. Em uma válvula de spin, quando as camadas de fora (camadas ferromagnéticas) estão com alinhamento magnético contrário um ao outro, o dispositivo tem resistência elétrica alta. Entretanto, quando o alinhamento é paralelo, gerado pelo campo magnético externo, a resistência é menor, da ordem de 50 % da configuração anterior. Tal aplicação permite que esse dispositivo seja miniaturizado, mantendo uma ótima sensibilidade. Cabeças GMR são encontrados em praticamente todos os discos rígidos produzidos hoje. O sinal de leitura a partir de uma cabeça de gravação GMR é de uma a duas ordens de magnitude maior do que a geração anterior, que foram baseados no fenômeno da magnetoresistência anisotrópica (AMR) [6, 7, 8].

Com o objetivo de atingir densidades de armazenamento cada vez maiores, pesquisadores apostam em nanofios magnéticos (vide Figura 1.1) como nova tecnologia pois, entre outras aplicações, podem armazenar e processar informações através do movimento das paredes de domínio (região de transição entre domínios magnéticos).

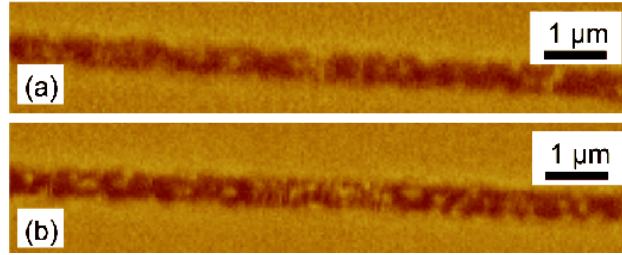


Figura 1.1: Micrografias de força magnética de um nanofio individual de $(Co/Pt)_{10}$ com uma largura de $W = 400nm$, após um campo magnético de $B = 2T$ que foi aplicado (a) longitudinalmente, (b) transversalmente. Ambas as imagens mostram um estado remanescente de multi-domínio comparável com domínios magnetizados para cima e para baixo. Figura retirada de [5].

Paredes de domínio (PD) magnéticas são formadas nas fronteiras entre domínios magnéticos magnetizados em direções opostas ao longo de um nanofio. Devido às dimensões de um nanofio magnético, o efeito de borda e a energia magnetostática tornam-se importantes. Cada domínio tem uma cabeça (pólo positivo ou norte) e uma cauda (negativo ou pólo sul). Desta maneira, estes domínios podem ser caracterizados como “head-to-head” ou “tail-to-tail” (vide Figura 1.2). As paredes de domínio podem ser do tipo vórtice ou transversal e transportadas para diferentes regiões sem perder a sua forma magnética, tendo assim um grande potencial para aplicação. Porém devemos cuidar para que a mobilidade da parede seja grande e passível de ser controlada. Considerando sua geometria essencialmente bidimensional, pequenos volumes de material são magnetizados, e uma sequência dessas regiões magneticamente ordenadas correspondem aos dígitos binários. Quanto maior o número de paredes em cada nanofio menor o custo da memória. Com base neste protótipo, é possível conceber um dispositivo de memória não volátil com um tempo de escrita extremamente curto, que é apenas limitado pela frequência da onda de rotação dos spins da parede de domínio [7, 9].

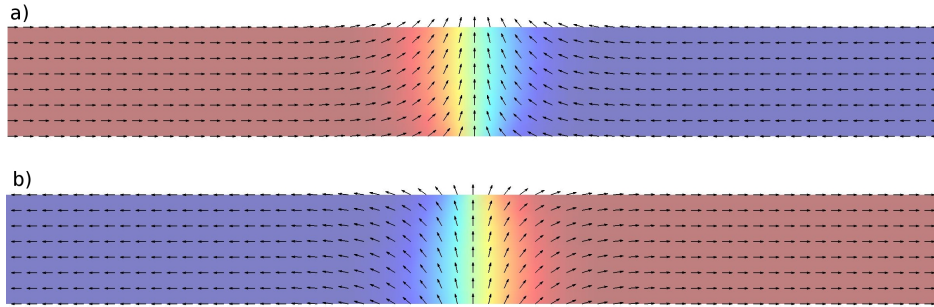


Figura 1.2: Temos em a) uma representação gráfica de uma nanofita com regiões de domínio “head-to-head” separadas por uma parede de domínio do tipo transversal, e na figura b), regiões de domínio “tail-to-tail”.

Um modelo foi proposto por S. S. Parkin et al. [9], no qual uma memória de “pista”, “magnetic domain-wall racetrack memory” (RM), compreende uma matriz de nanofios magnéticos dispostos horizontalmente ou verticalmente em um chip de silício (vide Figura 1.3). Nanodispositivos de leitura e escrita spintrônica individuais são usados para modificar ou ler uma fita de aproximadamente 10 a 100 paredes de domínio, que armazenam uma série de bits de dados em cada nanofio. O espaçamento entre PDs consecutivos (isto é, o comprimento de bit) é controlada por sítios de aprisionamento fabricados ao longo da pista [9].

Podemos movimentar as paredes de domínio mediante à aplicação de campo magnético ou corrente de spin-polarizado. Neste trabalho estudamos o movimento da parede devido à aplicação de corrente de spin-polarizado aplicado na direção do nanofio. Embora a maioria dos trabalhos encontrados utilizem campo magnético para mover a parede, optamos pela corrente de spin-polarizado devido ao fato de ser mais prático de ser produzido.

Usando simulação computacional, Berger introduziu pela primeira vez um termo de corrente de spin-polarizado que é produzida quando atravessamos uma corrente elétrica através de um material magnético e devido à força de Stern-Gerlach, uma porcentagem dos spins dos elétrons ficam polarizados

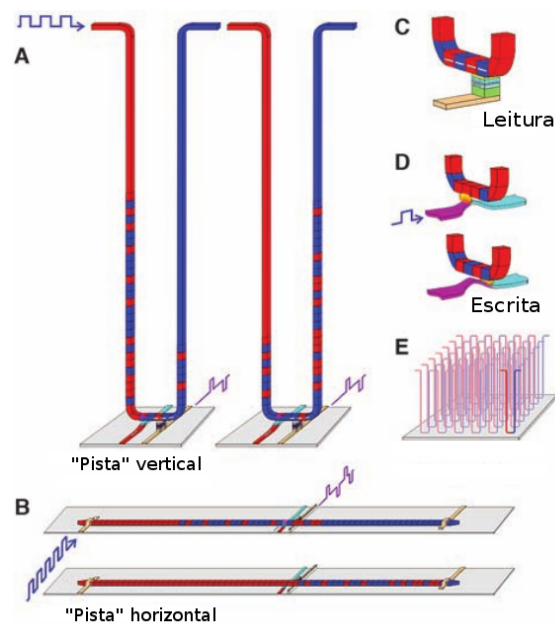


Figura 1.3: A RM é um nanofio ferromagnético, com dados codificados como um padrão de domínios magnéticos ao longo de uma porção do fio. Pulsos de corrente de spin-polarizados movimentam todo o padrão de PDs coerentemente ao longo do comprimento do fio. O nanofio é aproximadamente duas vezes tão longo quanto o padrão da PD armazenado, de modo que a PD pode ser deslocado em direção qualquer. (A) Uma pista verticalmente configurada oferece a maior densidade de armazenamento, armazenando o padrão em um nanofio normalmente em forma de U perpendicular ao plano do substrato. Os dois desenhos mostram os padrões magnéticos na pista antes e depois das PDs descerem um ramo da U, antes dos elementos de leitura e escritas, e em seguida o outro ramo. (B) Uma configuração usa um nanofio horizontalmente paralela ao plano do substrato. Dados (C) Leitura do padrão armazenado é feito através da medição da magnetorresistência túnel de um elemento de junção túnel magnética ligado à pista. (D) A gravação de dados é realizado, por exemplo, os campos de franja de um PD Movido em um segundo nanofio ferromagnético orientadas perpendicularmente ao nanofio de armazenamento. (E) Matriz de pistas são construídas em um chip para permitir o armazenamento de alta densidade. Figura retirada de [9].

numa determinada direção. Quando a corrente de spin polarizado é passado através de uma PD, a corrente transfere momento angular de spin para a parede, aplicando assim um torque nos momentos da PD, o que pode resultar no movimento da parede. A direção do movimento do PD é independente da carga magnética da PD, se é “head-to-head” ou “tail-to-tail”, de modo a que uma sequência inteira de PD pode ser deslocado ao longo da fita. O material escolhido para nossas simulações foi o Permalloy devido à sua alta permeabilidade magnética e propriedades de coersividade, magnetostricção e magnetoresistência anisotrópica muito baixa [10, 9].

Esta dissertação possui 6 capítulos. O Capítulo 2 começa com uma breve revisão histórica e que se junta à uma revisão de conceitos físicos vistos desde cursos básicos até cursos focados em magnetismo que são importantes para o entendimento deste trabalho. No Capítulo 3 é feito um estudo detalhado de como se obtém as equações dinâmicas de Landau-Lifshits-Gilbert para uma corrente de spin-polarizada. No Capítulo 4 apresentamos mais conceitos relacionados às nanofitas magnéticas, essenciais para nosso estudo. No Capítulo 5 exploramos os métodos e técnicas computacionais utilizados na simulação dos nanofios e na dinâmica das paredes de domínio. Finalmente no Capítulo 6 apresentamos os resultados sobre o movimento das paredes de domínio devido à aplicação de uma corrente de spin-polarizado, conclusões e perspectivas futuras.

Capítulo 2

Revisão e Conceitos Gerais

Os fundamentos do modelo teórico usado para descrever um nanofio magnético são apresentados nesse capítulo. Inicialmente, faz-se uma rápida revisão histórica sobre magnetismo e conceitos fundamentais que são importantes para o entendimento deste trabalho. Em seguida, descrevemos os diferentes tipos de materiais magnéticos e uma abordagem geral sobre ferromagnetismo. Por fim, apresentamos o modelo usado em nosso trabalho.

2.1 Revisão Histórica Sobre Eletromagnetismo

Os antigos gregos conheciam as propriedades elétricas do âmbar e as propriedades magnéticas de rochas ígneas (Magnes), 800 anos antes de Cristo. A magnetita (Fe_3O_4) era relativamente fácil de encontrar nas proximidades de Magnésia, cidade grega no mar Egeu norte. Alguns historiadores concordam que a bússola já era usada pelos chineses séculos antes dos gregos saberem sobre as propriedades magnéticas da magnetita. O primeiro registro escrito envolvendo ímãs data de 1269 e trata-se de uma carta que o engenheiro Pedro de Maricourt escreve a seu amigo de Paris contando sobre o comportamento

de pequenas esferas de magnetita. Na segunda metade do século XVIII, viu-se as primeiras medições quantitativas dos fenômenos elétricos e magnéticos: em 1750, John Michell usou uma balança de torção para estabelecer que as forças exercidas entre os polos magnéticos variam inversamente com o quadrado da distância e, alguns anos mais tarde, Charles Coulomb utilizando de uma balança de torção projetada por ele, estabeleceu em 1785 a lei que leva seu nome (lei dos polos inversos de atração e repulsão, entre cargas elétricas e polos magnéticos) [11, 6].

Em 1819, experimentos realizados por Hans Christian Orsted mostraram que uma corrente elétrica atravessando um determinado material provoca efeitos magnéticos ao redor dele. Os resultados dos experimentos de Orsted inspirou André Marie Ampère em suas pesquisas, nas quais ele explicou o efeito de uma corrente elétrica sobre um ímã e o efeito oposto, de um ímã sobre uma corrente elétrica. A Lei de Ampère, embora leve o nome do físico, foi proposta por James Clerk Maxwell em 1861. Ela relaciona a integral do campo magnético através de uma curva fechada e uma corrente que passa através desta curva. Em 1831, Michel Faraday propôs um estudo que relaciona o campo elétrico induzido num determinado circuito devido a um campo magnético e o fluxo magnético através deste circuito, no qual argumentou que uma corrente elétrica atravessando um fio produzia efeitos magnéticos. Em 1835, Carl Friedrich Gauss propôs um estudo que relaciona o fluxo de um campo elétrico através de uma superfície a carga elétrica contida num volume limitado por ela (Lei de Gauss). Gauss propôs também que o fluxo magnético através de uma superfície gaussiana é nulo, concluindo assim a não existência de monopolos magnéticos (conclusão que tem sido questionada e bastante estudada nos dias atuais) [6, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18].

Inspirado nos trabalhos de propagação de calor de Fourier, na ótica on-

dulatória de Fresnel e nas descobertas de Ampère, Gauss e Faraday, Maxwell finalmente acaba moldando em sua obra-prima, “A Treatise on Electricity and Magnetism (1873)”, suas famosas quatro leis que sintetizam os conhecimentos da eletricidade e do magnetismo, realizando a segunda grande unificação da fenômenos físicos na história da ciência: fenômenos elétricos e magnéticos têm a mesma origem e a luz é apenas a propagação de uma perturbação electromagnética no vazio [11].

Apesar da gama de informações sobre os materiais magnéticos, a natureza dos momentos de dipolo magnéticos ainda era um mistério. No primeiro ano do século XX, Max Planck propôs explicar porque as teorias clássicas fornecem resultados em completo desacordo com os dados empíricos do experimento de radiação de corpo negro, dando início aos estudos que culminaram na formulação da mecânica quântica na segunda metade da década de 1920. Com o surgimento da mecânica quântica, pode-se verificar que fenômenos magnéticos têm, em última instância, explicação quântica. O tratamento mecânico-quântico elementar dos átomos por meio da equação de Schrödinger, nos informa os níveis de energia que podem ser ocupados pelos elétrons. Os estados são caracterizados por quatro números quânticos: número quântico principal n ($n = 1, 2, 3, \dots$) que determina o tamanho da órbita e define sua energia, número quântico momento angular orbital l ($l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$) que descreve o momento angular do movimento orbital, número quântico magnético m_l ($m_l = l, l - 1, \dots, 0, \dots, -l + 1, -l$) que descreve a componente do momento angular orbital l ao longo de uma determinada direção e o número quântico de spin m_s ($m_s = \pm 1/2$) que descreve a componente do spin do elétron s ao longo de uma direção particular. De acordo com o princípio de exclusão de Pauli, é impossível dois elétrons ocuparem o mesmo espaço [6, 19].

2.2 Momento Magnético

Vamos considerar um elétron movendo-se com velocidade v numa órbita de Bohr circular de raio r .

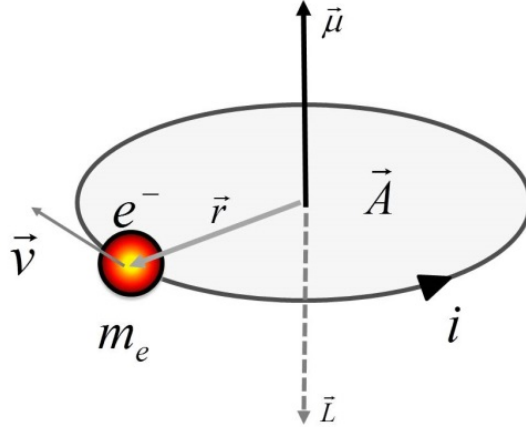


Figura 2.1: Representação gráfica de um elétron numa órbita circular de Bohr.

A carga deste elétron em órbita gera uma corrente I dada por

$$I = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r} \quad (2.1)$$

onde T é o período da órbita. Como estamos considerando uma órbita circular, sua área é $A = \pi r^2$ e o módulo do momento de dipolo magnético orbital será

$$\mu_L = IA = \frac{ev}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{evr}{2} \quad (2.2)$$

Da mecânica clássica, temos que o momento angular orbital é dado por $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, cujo módulo (levando em consideração que o raio da órbita \vec{r} e o momento linear \vec{p} são perpendiculares) é $L = rp = mrv$, temos

$$\mu_L = \frac{evr}{2} = \frac{evrm_e}{2m_e} = \frac{e(vrm_e)}{2m_e} = \frac{e}{2m_e} |\vec{L}| \quad (2.3)$$

onde m_e é a massa do elétron.

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m}\vec{L} = -\frac{e\hbar}{2m\hbar}\vec{L} = -\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{L} \quad (2.4)$$

onde $\mu_B = e\hbar/2m$ é o Magneton de Bohr [6]. Considerando que o momento angular quântico é $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$

$$\mu_L = -\frac{\mu_B}{\hbar}L = -\frac{\mu_B}{\hbar} \cdot \hbar\sqrt{l(l+1)} \quad (2.5)$$

A projeção do momento angular orbital de um elétron ao longo da direção do campo aplicado é

$$\mu_l = -m_l\mu_B \quad (2.6)$$

Do mesmo modo, a componente do momento magnético de spin na direção do campo aplicado é:

$$\mu_s = -\frac{em_s\hbar}{m} = \pm\mu_B \quad (2.7)$$

Ao descrever a origem atômica do magnetismo, deve-se considerar movimentos orbitais e de spin dos elétrons e da interação entre eles. O momento angular orbital total de um dado átomo é definido como

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i \quad (2.8)$$

onde a soma estende-se por todos os elétrons da camada de valência. Os mesmos argumentos aplicam-se ao momento angular de spin total, definida como

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i \quad (2.9)$$

As resultantes \vec{S} e \vec{L} assim formadas são bastante fracamente acopladas por meio da interação spin-órbita para formar o momento angular total de resultante $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, de modo que podemos representar a equação (2.4) na seguinte forma geral [19]:

$$\vec{\mu} = g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{J} = \gamma \vec{J} \quad (2.10)$$

onde γ é a razão giromagnética e g é denominado fator de Landé definido pela regra de Hund como [6]

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (2.11)$$

Podemos definir a magnetização como a soma dos momentos magnéticos μ dos i sítios num determinado volume ΔV

$$\vec{M} = \frac{1}{\Delta V} \sum_i \vec{\mu}_i \quad (2.12)$$

Baseado nas equações de Maxwell, podemos definir um campo macroscópico \vec{H} , chamado campo magnético

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M} \quad (2.13)$$

onde μ_0 é a permeabilidade magnética no vácuo e \vec{B} é a indução magnética [13].

Em cristais ferromagnéticos, a relação entre \vec{M} e \vec{H} não é linear. Uma definição mais geral da susceptibilidade que descreve o comportamento é a lei de Lamont

$$\chi_{ij}^d = \frac{\partial M_i}{\partial H_j} \quad (2.14)$$

onde χ_{ij}^d é um tensor obtido da derivada parcial das componentes de \vec{M} em relação às componentes de \vec{H} . Em suma, a susceptibilidade magnética mede a capacidade do material de se magnetizar.

2.3 Tipos de Materiais Magnéticos

Materiais magnéticos são classificados de acordo com sua susceptibilidade magnética:

- Diamagnetos: São materiais que possuem susceptibilidade magnética pequena e negativa ($\chi \approx -10^{-5}$). Sendo assim, sua resposta magnética é contrária ao campo aplicado. Exemplo: prata, ouro, bismuto.
- Paramagnetos: São materiais que possuem susceptibilidade magnética pequena e positiva ($\chi \approx 10^{-5}$ a 10^{-3}). Exemplo: alumínio, manganês.
- Ferromagnetos: São materiais que possuem susceptibilidade magnética grande e positiva ($\chi \approx 50$ a 10^4). Exemplo: ferro, cobalto, níquel.

Para o caso onde temos temperatura constante e campo magnético \vec{H} pequeno, a susceptibilidade dos diamagnetos e paramagnetos são constantes e assim são denominados materiais lineares. Existem outros tipos de materiais magnéticos que não se encaixam nesta classificação e foram descobertos muitos anos depois da classificação padrão (materiais ferrimagnéticos, antiferromagnéticos e helimagnéticos) [20].

O material que estamos utilizando para o estudo das nanofitas é Permalloy, que é um material ferromagnético. Materiais que apresentam uma susceptibilidade magnética significativa mesmo na ausência de campo aplicado são conhecidos como ferromagnetos. O ordenamento espontâneo observado nos ferromagnetos pode ser entendido supondo a existência de um campo magnético interno muito forte. Foi notado que este campo interno não po-

deria ter origem na interação clássica dipolo-dipolo, porque esta não seria forte o suficiente para manter o ordenamento espontâneo dos ferromagnetos. Em 1928, Heisenberg mostrou que esse campo magnético interno é explicado pela mecânica quântica e surge da interação entre momentos magnéticos de átomos vizinhos. Mais especificamente, a interação de exchange ou de troca é uma consequência direta do princípio de exclusão de Pauli e da repulsão coulombiana entre elétrons. Abaixo da temperatura de Curie, a magnetização de um material ferromagnético divide-se espontaneamente em vários domínios. Este fato foi explicado por Pierre Weiss, que considerou que o material divide sua magnetização em pequenas regiões, nos quais a magnetização é igual à magnetização de saturação M_s (momentos magnéticos orientados numa mesma direção), a fim de minimizar a energia magnetostática. Ou seja, dentro de cada domínio os momentos magnéticos se alinham praticamente na mesma direção devido ao intenso campo de troca, mas de um domínio para outro a direção do momento magnético resultante têm orientação diferente, o que em escala macroscópica desmagnetiza o material (vide Figura 2.2). Sendo assim, o campo desmagnetizante depende da forma da amostra e da estrutura de domínios magnéticos. Esse campo interno desmagnetizante origina-se da interação clássica dipolo-dipolo. É importante ressaltar que os domínios aparecem porque a interação dipolar, que é de longo alcance, prevalece para longas distâncias, sobre a interação de troca, que é de curto alcance. Em geral, a magnetização de um material ferromagnético só é observada se for aplicado um campo magnético externo [20, 7, 4].

Entre um domínio e outro existe uma região de transição chamada parede de domínio. Nas paredes, a magnetização afasta-se da orientação da magnetização de um domínio e, gradualmente, aproxima-se da orientação do domínio adjacente conforme a Figura 2.3:

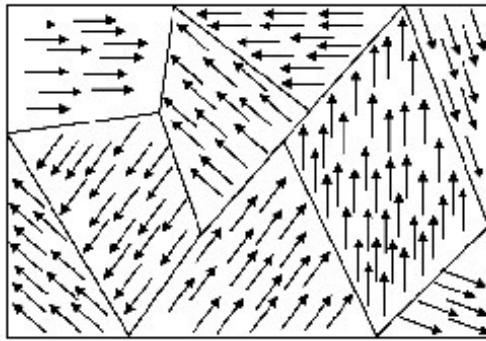


Figura 2.2: Representação gráfica de domínios magnéticos num ferromagneto.

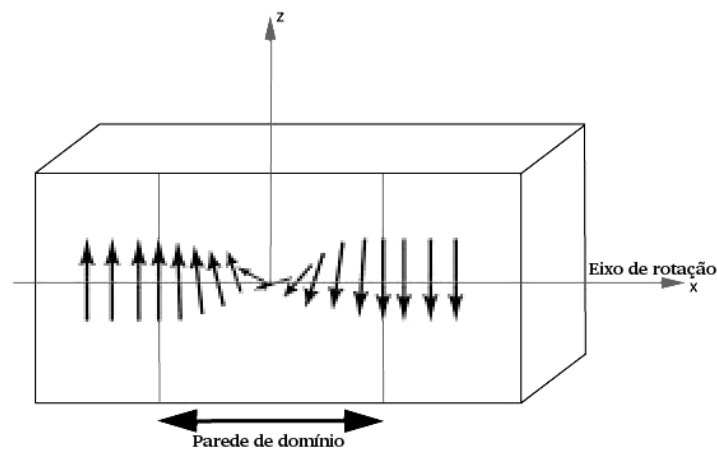


Figura 2.3: Representação gráfica de uma parede de domínio num ferromagneto.

2.4 Modelo de Heisenberg

O modelo de Heisenberg é um modelo estatístico que estabelece que a interação entre os momentos magnéticos localizados de uma rede através da interação de troca direta ou indireta. No magnetismo de banda (magnetismo itinerante) os mesmos elétrons são responsáveis tanto pela condução quanto pelo magnetismo. Neste caso a interação de troca (ordenamento espontâneo) produz um deslocamento da banda de energia dependente do spin para temperaturas inferiores à temperatura de transição de fase, de modo que uma orientação particular do spin se torna mais favorável. Em 1928,

Heisenberg mostrou que o ordenamento espontâneo observado nos materiais ferromagnéticos pode ser entendido supondo a existência de um campo magnético interno muito forte que surge da interação entre momentos magnéticos de átomos vizinhos. Heisenberg foi a primeira pessoa a incluir os spins de elétrons em função de onda e, em seguida, aplicar a mesma aproximação Heitler-London para obter a função de onda total de um sistema de dois elétrons [4]. No Apêndice A encontramos o operador Hamiltoniano de Heisenberg dado por:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.15)$$

onde \vec{S}_α ($\alpha = i, j$) representa os operadores de spins localizados nos sítios do cristal e a soma é realizada sobre os primeiros vizinhos, já que a integral de troca envolve a superposição de funções de onda que decaem muito rapidamente para partículas distantes e são apreciáveis somente até os limites dos primeiros vizinhos.

2.4.1 Limite Clássico

O tratamento puramente quântico de sistemas magnéticos torna-se muito complexo. Para um sistema com muitos spins, o número de estados discretos que o momento angular pode assumir torna-se grande, então é de se esperar que, considerando um limite clássico, os operadores de spin apresentem um contínuo de estados. Desse modo o Princípio da Incerteza de Heisenberg é automaticamente desprezado podemos considerar os momentos como vetores tridimensionais. Dessa forma, pode-se especificar uma condição inicial para o sistema [4].

Podemos então reescrever a equação de Heisenberg (agora escrevendo uma

função Hamiltoniana e não mais um operador Hamiltoniano) tal que

$$\mathcal{H}_{exc} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j \quad (2.16)$$

onde $\hat{\mu}_\alpha$ são componentes unitárias adimensionais dos momentos que agora podem assumir qualquer direção e $J_{i,j}$ foi novamente modificado. Mais à frente faremos uma nova alteração na hamiltoniana (sem perder as propriedades do Hamiltoniano inicial) para podermos introduzir o conceito de micromagnetismo.

Conforme dito anteriormente, somente a interação entre primeiros vizinhos é apreciável, de modo que podemos fazer a seguinte aproximação:

$$J_{ij} = J_{ji} = \begin{cases} J & \text{se } i, j \text{ são primeiros vizinhos} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Utilizando esta aproximação, podemos expressar a interação de troca como:

$$\mathcal{H}_{exc} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j \quad (2.17)$$

onde o termo $\langle i, j \rangle$ existe para indicar que o somatório está sendo realizado apenas com os primeiros vizinhos. Como $J_{ij} = J_{ji}$, para não contarmos duas vezes a mesma interação, introduzimos o fator $1/2$.

2.5 Interação Dipolar

A interação dipolar é uma interação de origem clássica estudada em curso de Eletromagnetismo. No Apêndice B encontramos a expressão para a inte-

ração dipolar:

$$\mathcal{H}_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi|\vec{r}_{12}|^3} [\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2 - 3(\vec{\mu}_1 \cdot \hat{r}_{12})(\vec{\mu}_2 \cdot \hat{r}_{12})] \quad (2.18)$$

onde $\vec{\mu}_1$ e $\vec{\mu}_2$ representam o momento magnético da partícula 1, 2 respectivamente e \vec{r}_{12} é a distância essas partículas conforme está representado na figura a seguir:

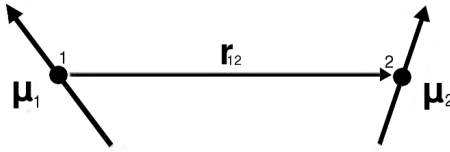


Figura 2.4: Representação gráfica de um dipolo magnético.

Vamos agora analisar o que acontece num sistema com várias partículas. Num sistema com N momentos magnéticos, a energia de interação entre um determinado momento i e os demais momentos j é representada por:

$$\mathcal{H}_i^{dip} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0}{4\pi|\vec{r}_{ij}|^3} [\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})] \quad (2.19)$$

Dessa maneira, podemos então expressar a energia de interação dos N momentos magnéticos com os demais pela expressão:

$$\mathcal{H}_{dip} = \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{2} \frac{\mu_0}{4\pi|\vec{r}_{ij}|^3} [\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})] \quad (2.20)$$

de modo que multiplicamos por 1/2 devido ao fato de que a energia de interação entre a partícula i com j seja a mesma da partícula j com i .

As distâncias relativas entre os sítios podem ser descritas pelo parâmetro de rede a_0 , de modo que podemos reescrever a equação (2.21) da seguinte

forma:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{dip} &= \frac{\mu_0}{8\pi} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{|\vec{r}_{ij}|^3} [\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})] \cdot \frac{a_0^3}{a_0^3} \\
&= \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{a_0^3}{|\vec{r}_{ij}|^3} [\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})] \\
&= \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{[\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})]}{(|\vec{r}_{ij}|/a_0)^3} \quad (2.21)
\end{aligned}$$

Esta expressão possui dois termos. O primeiro termo possui um produto escalar de dois momentos magnéticos que estão se interagindo. Observe que, devido este produto, obteremos uma menor energia quando estes dois momentos estiverem anti-paralelos. Ou seja, o primeiro termo tende a alinhar os momentos magnéticos anti-paralelamente. O segundo termo possui produto escalar de momentos magnéticos com o vetor que representa a distância entre eles, de modo que este segundo termo tende a alinhar estes momentos na direção deste vetor.

Devido a interação dipolar, a forma de um material também pode gerar um tipo de anisotropia (anisotropia de forma).

A Hamiltoniana que descreve as interações entre momentos magnéticos num material magnético mole é composto pelos termos de troca (eq. 2.19) e dipolar (eq. 2.23) de modo que:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j + \frac{\mu_0}{8\pi a_0^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{[\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j - 3(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})]}{(|\vec{r}_{ij}|/a_0)^3} \quad (2.22)$$

Capítulo 3

Dinâmica de Spin

O objetivo desse trabalho é estudar nanofios magnéticos através de simulação computacional. Uma vez especificada uma configuração inicial para o sistema, a dinâmica em tempo real é obtida através da integração de equações diferenciais usando-se um método numérico. Neste capítulo fazemos os cálculos para encontrar a equação diferencial que governa a dinâmica de spin em nosso estudo.

Da mecânica clássica, temos que a equação para o movimento rotacional para um corpo rígido é

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{T} \quad (3.1)$$

onde \vec{L} é o momento angular e \vec{T} é o torque atuando nele.

Esta equação também é válida na mecânica quântica, de modo que podemos reinterpretar \vec{L} e \vec{T} como operadores no espaço de Hilbert e substituir o momento angular \vec{L} pelo operador de spin \vec{S} , de modo que

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{T} \quad (3.2)$$

O momento magnético de um elétron está relacionado ao momento de spin pela expressão

$$\vec{M} = -\gamma\vec{S} \quad (3.3)$$

onde γ é a razão giromagnética para um spin [21]¹.

A razão giromagnética é dada por

$$\gamma = \frac{g|e|}{2m_e c} \quad (3.4)$$

onde g é o fator de Landé, e é a carga do elétron, m_e é a massa do elétron e c é a velocidade da luz [22].

O torque exercido num momento magnético \vec{M} por um campo magnético \vec{H} é representado por [21]

$$\vec{T} = \vec{M} \times \vec{H} \quad (3.5)$$

de modo que temos a evolução temporal do operador de spin dado por:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{S}}{dt} &= \frac{d(-\vec{M}/\gamma)}{dt} = -\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{M}}{dt} = \vec{M} \times \vec{H} \\ \frac{d\vec{M}}{dt} &= -\gamma\vec{M} \times \vec{H} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Este modelo dinâmico foi proposto por Landau e Lifshitz em 1935, que é constituído basicamente de uma equação de precessão contínua, na qual a presença dos efeitos quânticos e anisotropia são levados em conta por meio do campo efetivo \vec{H}_{eff} . No entanto, processos dissipativos ocorrem em processos de magnetização dinâmica. A abordagem seguida por Landau-Lifshitz consiste da introdução da dissipação de maneira fenomenológica. Estes autores introduziram um termo de torque adicional que “empurra” a magnetização na

¹Existe uma explicação sobre a validade desta expressão em [23] pag. 450.

direção do campo efetivo (Figura 3.1). Então, a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert se torna [22]:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} - \frac{\lambda}{M_s^2} \vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{H}_{eff}) = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} - \frac{\alpha \gamma M_s}{M_s^2} \vec{M} \times \left(-\frac{1}{\gamma} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \right)$$

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \quad (3.7)$$

onde $\lambda = \alpha \gamma M_s$ é uma constante fenomenológica característica do material e α é o parâmetro de amortecimento também característico do material.

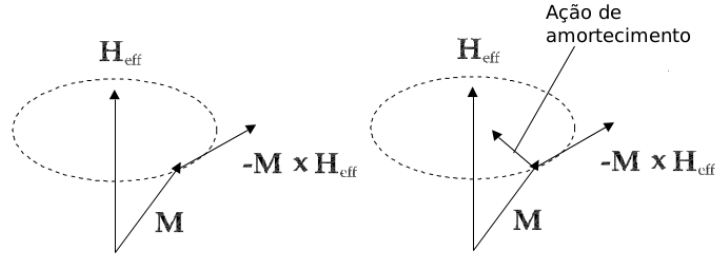


Figura 3.1: (esquerda) Precessão giromagnética não amortecida. (direita) Precessão giromagnética amortecida. [22]

Luc Berger previu em 1978 que uma corrente de spin polarizada deveria aplicar um torque numa parede de domínio magnético. Na prática, aplica-se uma corrente elétrica onde uma determinada porcentagem dos spins dos elétrons de condução estão alinhados numa determinada direção (no nosso caso, direção-x). Ao aplicar a corrente, elétrons de condução que atravessam a parede de domínio experimentam um torque que obriga seu spin seguir a direção de magnetização local. Ao fazê-lo, seu spin muda, uma vez que atravessa uma parede que separa dois domínios opostos. Neste processo adiabático, a consequente alteração do momento de spin do elétron é transferido para o spin (localizado) no interior da parede [10]. Zener[29] propôs um modelo para os metais de transição ferromagnéticos, assumindo que os elétrons “d” são localizados e os “s” são itinerantes [30]. Embora seja impossível se-

parar inequivocamente elétrons de transporte de elétrons de magnetização num ferromagneto real, estes têm sido convencionalmente modelados numa Hamiltoniana “s-d”, tal que [24]

$$\mathcal{H}_{sd} = -J_{ex}\vec{s} \cdot \vec{S} \quad (3.8)$$

onde \vec{s} e \vec{S} são os spins (adimensionais) de elétrons itinerantes e elétrons localizados, respectivamente, e J_{ex} é a constante de acoplamento entre eles.

Vamos utilizar este modelo “s-d” para calcular o torque que o spin do elétron de condução exerce no spin localizado. Trataremos o spin itinerante \vec{s} como um operador quântico local cuja equação de movimento é governada por uma equação de transporte.

Conforme vimos anteriormente, o momento magnético licalizado na rede pode ser representado por $\vec{M} = -\gamma\vec{S}$, de modo que:

$$\frac{\vec{M}}{|\vec{M}|} = \frac{-\gamma\vec{S}}{|-\gamma\vec{S}|} = \frac{-\gamma\vec{S}}{\gamma S} = \frac{-\vec{S}}{S} \longrightarrow \vec{S} = -\frac{S\vec{M}}{M_s} \quad (3.9)$$

onde $|\vec{M}| = M_s$ [24]. Substituindo (3.9) em (3.8), temos:

$$\mathcal{H}_{sd} = -J_{ex}\vec{s} \cdot \vec{S} = -J_{ex}\vec{s} \cdot \left(-\frac{S\vec{M}}{M_s}\right) = \frac{SJ_{ex}}{M_s}\vec{s} \cdot \vec{M}(\vec{r}, t) \quad (3.10)$$

O operador de spin do elétron de condução satisfaz à equação de spin generalizada

$$\frac{\partial\vec{s}}{\partial t} + \nabla \cdot \hat{J} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{s}, \mathcal{H}_{sd}] - \Gamma_{re}(\vec{s}) \quad (3.11)$$

onde \hat{J} é o operador de corrente de spin e $\Gamma_{re}(\vec{s})$ representa a relaxação devido ao espalhamento com impurezas, elétrons, etc. Fazendo a média sobre todos os estados ocupados e definindo $\vec{m}(\vec{r}, t) = \langle \vec{s} \rangle$ como a densidade de spin

do elétron e $\vec{J}(\vec{r}, t) = \langle \hat{J} \rangle$ como densidade de corrente de spin, temos [24]:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \vec{s}}{\partial t} \right\rangle + \langle \nabla \cdot \hat{J} \rangle &= \left\langle \frac{1}{i\hbar} [\vec{s}, \mathcal{H}_{sd}] \right\rangle - \langle \Gamma_{re}(\vec{s}) \rangle \\ \frac{\partial \vec{m}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} &= - \left\langle \frac{d\vec{s}}{dt} \right\rangle - \langle \Gamma_{re}(\vec{s}) \rangle \end{aligned} \quad (3.12)$$

Agora vamos fazer algumas considerações:

1. A expressão $\frac{d\vec{s}}{dt}$ é um termo de torque.
2. Conforme vimos anteriormente, torque exercido num momento magnético \vec{M}' por um campo magnético \vec{H} (ambos possuem dimensão) é dado por $\vec{T} = \vec{M}' \times \vec{H}$.
3. Sendo \vec{B} o campo efetivo em determinado sítio, podemos utilizar os conceitos estudados no final do capítulo anterior. Sendo assim, a expressão do torque para este campo efetivo, fica $\vec{T} = \vec{M}' \times \vec{B}$.
4. Comparando (B.22) com (B.24) (do Apêndice B) podemos observar que se fizermos a derivada do Hamiltoniano em relação a μ_n , encontramos o campo magnético efetivo local que atua no sítio n dado por $\vec{B} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mu_n}$.
5. Trazendo para este nosso problema temos que o campo é dado por $\vec{B} = -\frac{\partial \mathcal{H}_{sd}}{\partial \vec{M}}$.
6. Lembre-se que neste problema, \vec{M} e \vec{s} são termos adimensionais, porém \vec{M}' possui dimensão.
7. Levando em conta os itens 1, 2, 5, 6 e a equação (3.10), temos que $\frac{d\vec{s}}{dt} = -\frac{1}{\hbar} \vec{M} \times \frac{\partial \mathcal{H}_{sd}}{\partial \vec{M}} = -\frac{1}{\hbar} \vec{M} \times \frac{SJ_{ex}}{M_s} \vec{s} = \frac{SJ_{ex}}{M_s \hbar} \vec{s} \times \vec{M} = \frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{s} \times \vec{M}$, onde $\tau_{ex} = \frac{\hbar}{SJ_{ex}}$.

Assim, podemos escrever a equação de spin generalizada da seguinte maneira:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{m} \times \vec{M}(\vec{r}, t) - \langle \Gamma(\vec{s}) \rangle \quad (3.13)$$

Em Zhang et al., os autores separam a densidade de magnetização induzida devido ao spin em dois termos, tal que

$$\vec{m}(\vec{r}, t) = \vec{m}_o(\vec{r}, t) + \delta \vec{m}(\vec{r}, t) = n_o \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} + \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \quad (3.14)$$

onde n_o é a densidade de spin local cuja direção é paralela à magnetização. O primeiro termo representa a densidade de spin adiabática quando o spin do elétron de condução relaxa ao seu valor de equilíbrio e o segundo termo representa o desvio da magnetização neste processo adiabático [24].

Similarmente, representam a densidade de corrente de spin de modo que

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \vec{J}_o(\vec{r}, t) + \delta J(\vec{r}, t) = -\left(\frac{\mu_B P}{e}\right) \vec{j}_e \otimes \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} + \delta \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (3.15)$$

onde μ_B é o magneton de Bohr, e é a carga do elétron, \vec{j}_e é a densidade de corrente e P é a polarização da corrente de spin. O primeiro termo representa a corrente de spin cuja polarização é paralela à magnetização local $\vec{M}(\vec{r}, t)$ e o segundo termo, a densidade de corrente não adiabática [24].

Os mesmos autores usam uma aproximação de tempo de relaxação simples, tal que

$$\langle \Gamma(\vec{s}) \rangle = \frac{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}} \quad (3.16)$$

onde τ_{sf} é o tempo de relaxação de flip do spin [24].

Temos também que a densidade de corrente não adiabática $\delta \vec{J}$ se relaciona com a densidade de spin de não equilíbrio $\delta \vec{m}$ pela expressão

$$\delta \vec{J} = -D_o \nabla \delta \vec{m} \quad (3.17)$$

onde D_o é uma constante de difusão.

A partir daqui, colocaremos os detalhes das contas no Apêndice 3. Temos então que a equação (3.13) será:

$$-D_o \nabla^2 \delta \vec{m} + \frac{1}{\tau_{ex} M_s} \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + \frac{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}} = -\frac{n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\mu_B P}{e} (\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s}$$

A densidade de spin é criada pelos dois termos de fonte no lado direito da equação. Assumimos que a magnetização varia vagarosamente no espaço (a largura da parede é muito menor que a escala de comprimento do transporte), de modo que podemos desprezar o primeiro termo [24]

$$\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + \frac{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}} = -\frac{n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\mu_B P}{e} (\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} \quad (3.18)$$

Para facilitar nossas contas, vamos definir um vetor $\vec{\varphi}$ qualquer, tal que:

$$\vec{\varphi} \equiv \frac{1}{\tau_{ex} M_s} \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + \frac{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}} \quad (3.19)$$

$$(\tau_{ex} M_s) \vec{\varphi} = (\tau_{ex} M_s) \frac{1}{\tau_{ex} M_s} \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + (\tau_{ex} M_s) \frac{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}}$$

$$\tau_{ex} M_s \vec{\varphi} = \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + \xi M_s \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \quad (3.20)$$

onde definimos $\xi \equiv \tau_{ex} / \tau_{sf}$.

$$\xi \tau_{ex} \vec{\varphi} = \frac{\xi}{M_s} \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + \xi^2 \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \quad (3.21)$$

Vamos reservar esta equação. Agora fazendo o produto vetorial de \vec{M} com a Equação (3.20), obteremos:

$$M_s \tau_{ex} \vec{M} \times \vec{\varphi} = \vec{M} \times \delta \vec{m} \times \vec{M} + \xi M_s \vec{M} \times \delta \vec{m} \quad (3.22)$$

$$M_s \tau_{ex} \vec{M} \times \vec{\varphi} = M_s^2 \delta \vec{m} + \xi M_s \vec{M} \times \delta \vec{m}$$

$$\frac{\tau_{ex}}{M_s} \vec{M} \times \vec{\varphi} = \delta \vec{m} + \frac{\xi}{M_s} \vec{M} \times \delta \vec{m} \quad (3.23)$$

Somando as equações (3.21) e (3.23), obtemos:

$$\xi \tau_{ex} \vec{\varphi} + \frac{\tau_{ex}}{M_s} \vec{M} \times \vec{\varphi} = \frac{\xi}{M_s} \delta \vec{m} \times \vec{M} + \xi^2 \delta \vec{m} + \delta \vec{m} + \frac{\xi}{M_s} \vec{M} \times \delta \vec{m}$$

$$\delta \vec{m} = \frac{\tau_{ex}}{(\xi^2 + 1)} \left(\frac{1}{M_s} \vec{M} \times \vec{\varphi} + \xi \vec{\varphi} \right) \quad (3.24)$$

Substituindo nesta equação o valor de $\vec{\varphi}$ apresentado em (3.19), temos:

$$\delta \vec{m} = \frac{\tau_{ex}}{(\xi^2 + 1)} \left[-\frac{n_o}{M_s^2} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\mu_B P}{e M_s^2} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M} - \frac{\xi n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\xi \mu_B P}{e} (\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}}{M_s} \right] \quad (3.25)$$

Das considerações feitas anteriormente, vimos que o torque pode ser representado pela expressão:

$$\vec{T} = \frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{m} \times \vec{M} = -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{M} \times \delta \vec{m} \quad (3.26)$$

Agora substituindo a equação (3.25) na (3.26), obtemos:

$$\vec{T} = -\frac{1}{\tau_{ex}M_s}\vec{M} \times \left\{ \frac{\tau_{ex}}{(\xi^2 + 1)} \left[-\frac{n_o}{M_s^2}\vec{M} \times \frac{\partial\vec{M}}{\partial t} + \frac{\mu_B P}{eM_s^2}\vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla)\vec{M} + \right. \right. \\ \left. \left. -\frac{\xi n_o}{M_s}\frac{\partial\vec{M}}{\partial t} + \frac{\xi\mu_B P}{e}(\vec{j}_e \cdot \nabla)\frac{\vec{M}}{M_s} \right] \right\}$$

$$\vec{T} = -\frac{n_o}{M_s(\xi^2 + 1)}\frac{\partial\vec{M}}{\partial t} + \frac{\xi n_o}{M_s^2(\xi^2 + 1)}\vec{M} \times \frac{\partial\vec{M}}{\partial t} + \\ + \frac{\mu_B P}{|e|M_s^3(\xi^2 + 1)}\vec{M} \times \left[\vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla)\vec{M} \right] + \\ + \frac{\xi\mu_B P}{|e|M_s^2(\xi^2 + 1)}\vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla)\vec{M} \quad (3.27)$$

Esta equação de torque (3.27) possui quatro termos: os dois primeiros possuem variação da magnetização no tempo e os dois últimos possuem variação da magnetização no espaço. Observe que apenas os dois últimos termos dependem da corrente, de modo que representam os efeitos da corrente polarizada no material [24].

Conforme vimos anteriormente, a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert padrão (3.7) consiste de um termo precessional devido a um campo efetivo e um termo de amortecimento fenomenológico. Em adição à esses dois termos, o torque \vec{T} encontrado na equação (3.27) pode ser acrescentado à equação de LLG [24]:

$$\frac{\partial\vec{M}}{\partial t} = -\gamma\vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s}\vec{M} \times \frac{\partial\vec{M}}{\partial t} + \vec{T} \quad (3.28)$$

Nosso foco principal neste capítulo é o estudo do torque do spin devido ao vetor de magnetização espacial não uniforme (os dois últimos termos da equação (3.27)). Uma vez que os dois primeiros termos da expressão do torque que possuem variação da magnetização em função do tempo podem

ser completamente absorvidos pela redefinição da razão giromagnética e da constante de amortecimento, vamos então concentrar na função de torque de spin gerado pela magnetização não uniforme [24]:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\mu_B P}{|e| M_s^3 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times \left[\vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M} \right] + \frac{\xi \mu_B P}{|e| M_s^2 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M}$$

Assumindo a direção-x como a direção da corrente aplicada, temos [24]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = & -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{\mu_B P j_e}{|e| M_s (\xi^2 + 1)} \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \\ & + \frac{\xi \mu_B P j_e}{|e| M_s^2 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Para simplificar a expressão (3.29), vamos definir:

$$\eta \equiv \frac{\mu_B P}{|e| M_s (\xi^2 + 1)}, \quad \beta \equiv \xi \text{ e } v_j \equiv \eta j_e \quad (3.30)$$

Temos enfim que, a equação de LLG no qual existe uma corrente polarizada aplicada num material ferromagnético mole:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - v_j \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \frac{\beta v_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \quad (3.31)$$

Fazendo uma pesquisa pela bibliografia encontramos autores que redefinem $\eta \equiv \frac{g \mu_B P}{2|e| M_s}$ [10], onde g é o fator de Landé; ou simplesmente $\eta \equiv \frac{\mu_B P}{|e| M_s}$ [25]. Também encontramos valores de η para o Permalloy de modo que $\eta = P \times 7 \times 10^{-11} m^3/C$ e a polarização P não é bem conhecida mas varia entre 0,4 e 0,7 [10].

Capítulo 4

Nanofitas Magnéticas

Neste capítulo, fazemos uma abordagem geral mostrando características relevantes de nanofitas magnéticas que deverão ser consideradas.

Um nanofio retangular ou nanofita magnética é um sistema quase unidimensional preparado experimentalmente por deposição de materiais magnéticos em superfícies cristalinas [26]. A estrutura dessa nanofita possui forma de um paralelepípedo longo de comprimento L , largura w e espessura t , tais que $L \gg w > t$ [7].

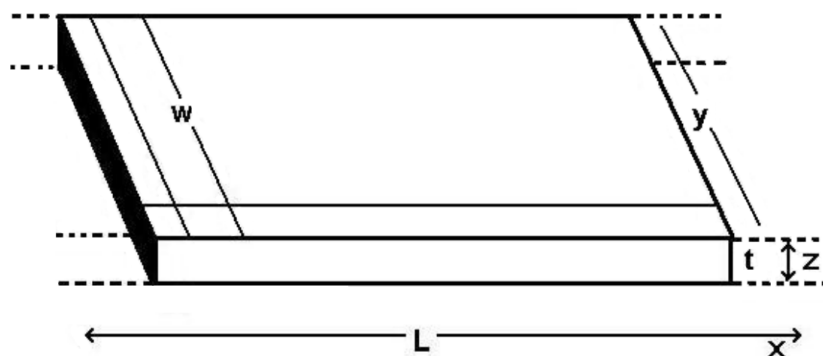


Figura 4.1: Comprimento L , largura w e espessura t ao longo dos eixos x , y e z respectivamente do nanofio, com $L \gg w > t$ [7].

Devido a anisotropia de forma de uma nanofita magneticamente macia, os spins tendem a se alinhar de maneira uniforme e paralela ao comprimento do nanofio. Conforme aumentarmos as dimensões do sistema, o equilíbrio entre a energia de troca e a energia magnetostática minimiza a energia livre e as bordas colaboram para o surgimento de paredes de domínios do tipo vórtice ou transversal (Figura 4.2) que podem ser transportadas para diferentes regiões sem deformação [7].

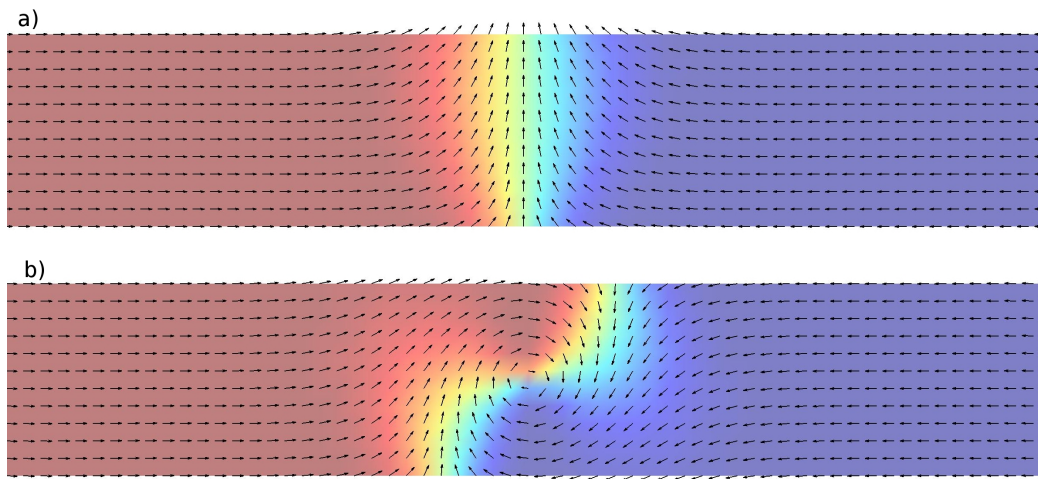


Figura 4.2: Temos em a) uma representação gráfica de uma nanofita com uma parede de domínio em seu centro do tipo transversal, e na figura b), uma parede do tipo vórtice.

O diagrama da Figura 4.3 mostra a relação das dimensões da fita com o tipo de parede que é propícia de existir em cada tamanho:

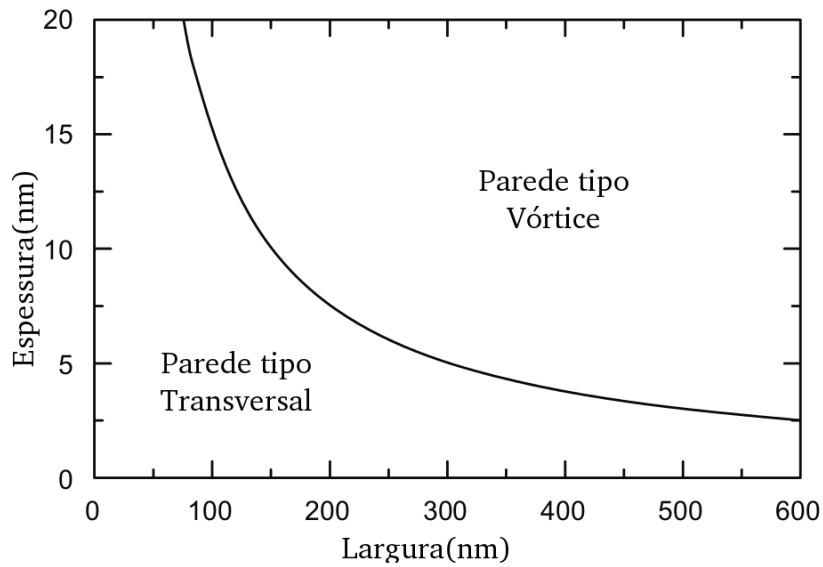


Figura 4.3: Diagrama de fase para as estruturas de parede de domínio tipo vórtice e transversal. [7]

Vale citar que em ambos tipos de parede os momentos magnéticos estão orientados no plano do nanofio devido à simetria e dimensões do material.

Neste presente trabalho, nosso objeto de estudo são nanofitas com regiões de domínio “head-to-head” ou “tail-to-tail” (Figura 4.4), que são separadas por paredes de domínio do tipo transversal, onde essas regiões dependem do sentido em que os momentos magnéticos estão apontando.

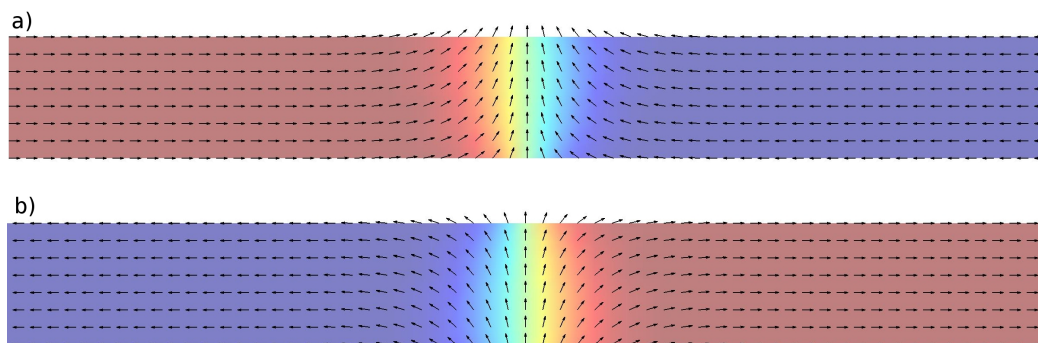


Figura 4.4: Temos em a) uma representação gráfica de uma nanofita com regiões de domínio “head-to-head” separadas por uma parede de domínio do tipo transversal, e na figura b), regiões de domínio “tail-to-tail”.

A parede de domínio “tail-to-tail” tem este nome devido aos domínios magnéticos apontarem para as extremidades do nanofio, saindo da parede de domínio. Na parede “head-to-head” o sentido da magnetização dos domínios estão apontando para a parede. Ambas as configurações apresentam a mesma configuração energética. Para a parede de domínio transversal, o parâmetro de largura da parede devido à largura do nanofio é aproximadamente [7]

$$\Delta = \frac{w}{\pi} \quad (4.1)$$

Uma das propostas de aplicação tecnológica é o uso de nanofitas magnéticas em dispositivos de armazenamento de dados e dispositivos lógicos. Por isso o estudo da dinâmica da parede de domínio torna-se tão importante. A manipulação da parede de domínio no nanofio em nosso estudo é feita através da aplicação de correntes de spin-polarizado. Precisamos que a mobilidade desta parede seja grande e passível de ser controlada.

As vantagens de dispositivos similares com base no deslocamento de corrente induzida de uma parede de domínio são simplicidade e o fato da corrente de troca ser muito menor. Este movimento acontece devido a transferência de momento angular dos elétrons de condução [27]. Devemos tomar um certo cuidado ao aplicar uma corrente de spin polarizada pois, embora altas correntes levem a velocidades maiores se compararmos a correntes de baixa intensidade, estas altas correntes podem provocar o efeito Joule na amostra, o que implica em uma redução da eficiência do método, ou até mesmo a desmagnetização do nanofio [7].

Em resposta a cada pulso de corrente, a parede de domínio transversal se move na direção x positiva. Depois do fim do pulso, a parede de domínio continua se movendo. Simulações com $\alpha = 0$ demonstram que o movimento da parede de domínio é primeiramente um efeito precessional. Por causa da

parede de domínio transversal manter sua forma e os domínios permanecerem uniformemente magnetizados ao longo do eixo da fita, a velocidade da parede pode ser obtida da média da magnetização de todo elemento por [28]

$$v(t) = \frac{L}{2} \frac{d \langle m_x(t) \rangle}{dt} \quad (4.2)$$

Quando $\alpha = 0$ na equação de LLG encontrada no capítulo anterior, a parede de domínio move-se com velocidade constante. Quando $\alpha > 0$, a parede de domínio para algum tempo depois do fim do pulso, embora para pulsos de campo suficientemente grandes, a velocidade da parede aumenta depois do fim do pulso antes de diminuir até parar. Para cada largura w , existe um pulso que maximiza a velocidade da parede. Embora a magnitude do parâmetro adimensional β presente na equação de LLG obtida no final do Capítulo 3 seja prevista da ordem da constante de amortecimento α , seu valor é controverso, mas pode ser obtido experimentalmente. Há também controvérsias a respeito do seu significado físico. Valores de $\beta = \alpha$, $\beta = 8\alpha$ e $\beta = 15\alpha$ têm sido sugeridos para o Permalloy [25].

Capítulo 5

Modelagem Computacional

A simulação computacional é uma ferramenta que ajuda a explicar as observações experimentais de maneira mais rápida. Neste capítulo descreveremos a simulação micromagnética e como nossos conceitos teóricos estudados anteriormente são aplicados nas simulações.

5.1 Simulação Micromagnética

Embora estejamos utilizando simulações computacionais a fim de nos auxiliar em nosso estudo, os nanofios que estamos considerando são compostos de uma quantidade muito grande de partículas. O micromagnetismo descreve uma amostra magnética através de um campo clássico de vetores magnetização $\vec{M}(\vec{r}, t)$, que são as médias espaciais dos momentos magnéticos atômicos $\vec{\mu}$. Portanto, essa teoria não fornece informações sobre a distribuição local dos momentos atômicos, mas apenas sobre a magnetização local [4]. Com o micromagnetismo, reduzimos consideravelmente o tempo computacional. Os métodos utilizados neste capítulo foram apresentados em dissertações e teses

desenvolvidos pelo grupo de pesquisa de Matéria Condensada da UFJF em D. Toscano [4] e V. Ferreira [7].

O Permalloy-79 ($Py - 79$) apresenta uma estrutura de FCC (cúbica de faces centradas) como mostra a Figura 5.1, na qual cada sítio possui 12 vizinhos. O parâmetro de rede de uma célula convencional para o $Py - 79$ é de $a_0 = 0,355nm$ [7].

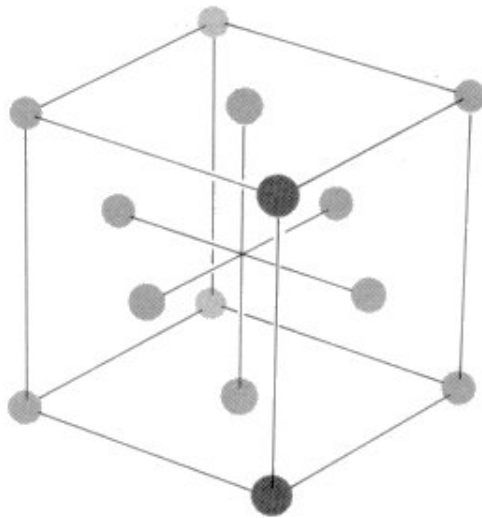


Figura 5.1: Representação gráfica de uma célula de FCC.

Para cada célula unitária, atribuímos um vetor que simboliza a magnetização da célula. Em geral, a discretização do material em células não precisa envolver necessariamente uma rede cúbica. Neste trabalho aproximamos a rede FCC por uma rede cúbica simples. Na Figura 5.2 encontra-se esquematizada uma discretização em duas dimensões tomando uma rede quadrada para facilitar a visualização [4].

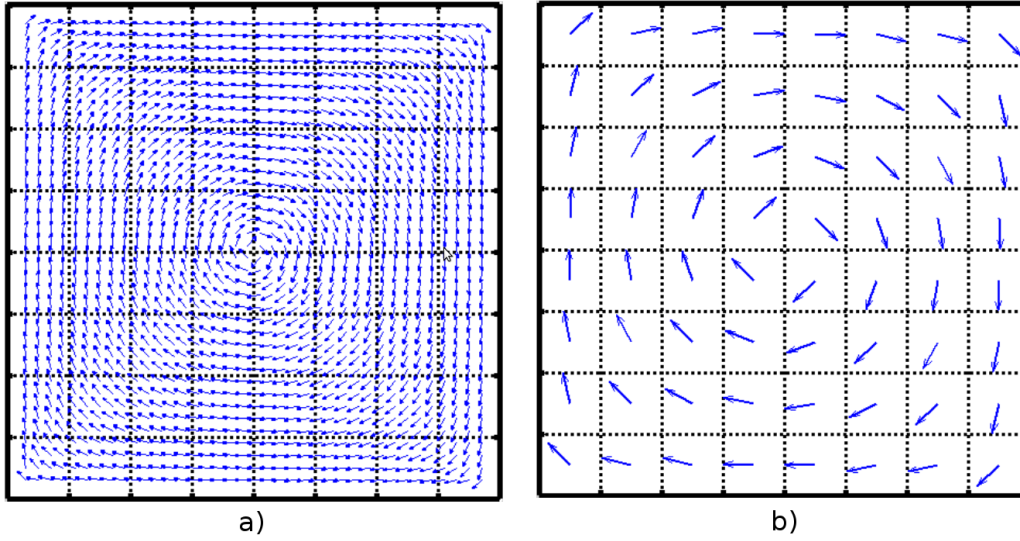


Figura 5.2: Representação gráfica que representa o mecanismo usado para redefinir as células. Em (a) temos um sistema real constituído por muitos momentos atômicos. Em (b) temos uma representação da discretização do sistema (a), onde cada vetor representa as médias espaciais dos momentos magnéticos nas células.

Para trabalhar o micromagnetismo, o volume a^3 da nova célula deve ser pequeno o suficiente para que os momentos em seu interior estejam em média alinhados numa determinada direção, e ao mesmo tempo, grande se comparado com o volume das células reais a_0^3 . Com isso, diminuimos drasticamente o tempo computacional. Para escolhermos a dimensão da nova célula, utilizamos o comprimento de troca λ_{exc} , que representa o “alcance” da interação de troca, dado por: [7].

$$\lambda_{exc} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \quad (5.1)$$

onde, para o *Py-79*, a magnetização de saturação $M_s = 8,6 \cdot 10^5 A/m$ e a rigidez do vetor magnetização $A = 13 \cdot 10^{-12} J/m$, o que fornece $\lambda_{exc} \approx 5,3 nm$. A escolha do novo parâmetro de rede a deve ser feita de modo que $a < \lambda_{exc}$, sendo assim escolhemos $a = 5 nm$.

A magnetização de cada célula é dada por:

$$\vec{M}_i = \frac{1}{v_{cel}} \sum_k \vec{\mu}_k = \frac{1}{v_{cel}} \vec{m}_i \quad (5.2)$$

onde v_{cel} é o volume da célula micromagnética, \vec{m}_i é o momento magnético da célula micromagnética e $\vec{\mu}_k$ é o momento magnético de cada sítio da rede contido dentro das novas células. Deste modo os momentos magnéticos das células podem ser reescritos como:

$$\vec{m}_i = v_{cel} \vec{M}_i = v_{cel} M_s \hat{m}_i = m_{cel} \hat{m}_i \quad (5.3)$$

onde \hat{m}_i é um versor na direção e sentido da magnetização de saturação e m_{cel} é a magnetização da célula micromagnética.

5.1.1 Hamiltoniana micromagnética

Considerando que a partir de agora vamos trabalhar com as novas células micromagnéticas, precisamos renormalizar os termos de nossa Hamiltoniana para ficar coerente com o conceito do micromagnetismo. Sendo assim, a interação de troca entre os momentos magnéticos das células micromagnéticas é dada pela Hamiltoniana:

$$\mathcal{H}_{exc} = -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j \quad (5.4)$$

onde J_{cel} é a constante de troca entre as células.

Estendendo este desenvolvimento para a interação dipolar, temos:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{dip} &= \frac{\mu_0}{8\pi a^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]}{(|\vec{r}_{ij}|/a)^3} \\
&= \frac{\mu_0}{8\pi a^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\{(m_{cel} \hat{m}_i) \cdot (m_{cel} \hat{m}_j) - 3[(m_{cel} \hat{m}_i) \cdot \hat{r}_{ij}][(m_{cel} \hat{m}_j) \cdot \hat{r}_{ij}]\}}{(|\vec{r}_{ij}|/a)^3} \\
&= \frac{\mu_0}{8\pi a^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{[m_{cel}^2 (\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j) - 3m_{cel}^2 (\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]}{(|\vec{r}_{ij}|/a)^3} \\
&= \frac{\mu_0 m_{cel}^2}{8\pi a^3} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{[(\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j) - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]}{(|\vec{r}_{ij}|/a)^3} \\
\mathcal{H}_{dip} &= \frac{D_{cel}}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{[(\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j) - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]}{(|\vec{r}_{ij}|/a)^3} \tag{5.5}
\end{aligned}$$

onde $D_{cel} = \frac{\mu_0}{4\pi a^3}$ é definido como parâmetro da interação dipolar.

Temos então que a Hamiltoniana micromagnética que descreve as interações entre momentos magnéticos num material magnético mole é dada por:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= -\frac{J_{cel}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{D_{cel}}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{[(\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j) - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]}{(|\vec{r}_{ij}|/a)^3} \\
\mathcal{H} &= J_{cel} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{D_{cel}}{2J_{cel}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{[(\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j) - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]}{(|\vec{r}_{ij}|/a)^3} \right\} \\
\mathcal{H} &= J_{cel} \mathcal{H}' \tag{5.6}
\end{aligned}$$

de modo que

$$\mathcal{H}' = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j + \frac{D_{cel}}{2J_{cel}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{[(\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j) - 3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]}{(|\vec{r}_{ij}|/a)^3} \quad (5.7)$$

onde \mathcal{H}' é a parte adimensional da Hamiltoniana do sistema. Utilizamos em nossas simulações as grandezas adimensionais correspondentes, a fim de tornar o sistema de equações integrável do ponto de vista computacional.

Podemos obter o campo efetivo local B_i em Tesla, derivando-se a Hamiltoniana em relação às componentes dos momentos magnéticos das células \vec{m}_i , de modo que:

$$\vec{B}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{m}_i} = -\frac{J_{cel}}{m_{cel}} \frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial \hat{m}_i} = \frac{J_{cel}}{m_{cel}} \vec{b}_i \quad (5.8)$$

de modo que o campo efetivo local adimensional é dado por:

$$\begin{aligned} \vec{b}_i &= -\frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial \hat{m}_i} = -\left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_j + \frac{D_{cel}}{2J_{cel}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{[\hat{m}_j - 3\hat{r}_{ij}(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]}{(|\vec{r}_{ij}|/a)^3} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_j - \frac{D_{cel}}{2J_{cel}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{[\hat{m}_j - 3\hat{r}_{ij}(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})]}{(|\vec{r}_{ij}|/a)^3} \\ \vec{b}_i &= \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{m}_j + \frac{D_{cel}}{2J_{cel}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{[3\hat{r}_{ij}(\hat{m}_j \cdot \hat{r}_{ij}) - \hat{m}_j]}{(|\vec{r}_{ij}|/a)^3} \end{aligned} \quad (5.9)$$

5.1.2 Dinâmica de Spin

Análogo ao que fizemos para a Hamiltoniana, também precisamos encontrar uma equação dinâmica adimensional (referente às células micromagnéticas), para torná-la integrável do ponto de vista computacional. No Capítulo

3, encontramos a seguinte equação dinâmica:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - v_j \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \frac{\beta v_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x}$$

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = \gamma \vec{H}_{eff} \times \vec{M} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - v_j \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \frac{\beta v_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \quad (5.10)$$

Fazendo o produto vetorial de \vec{M} com a Equação (5.10), obtemos:

$$\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = \gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \times \vec{M} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - v_j \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \frac{\beta v_j}{M_s} \vec{M} \times \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x}$$

mas veja que, pela propriedade de produto vetorial $\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c})\vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b})\vec{c}$,

temos:

$$\vec{M} \times \left(\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \right) = \vec{M} \left(\vec{M} \cdot \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \right) - \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} (\vec{M} \cdot \vec{M}) = -\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} |\vec{M}|^2 = -\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} M_s^2$$

Analogamente:

$$\vec{M} \times \left(\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \right) = -\frac{\partial \vec{M}}{\partial x} M_s^2$$

de modo que, temos então:

$$\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = \gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \times \vec{M} - \alpha M_s \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - v_j \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} - \beta v_j M_s \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \quad (5.11)$$

Substituindo (5.11) em (5.10), obtemos:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = \gamma \vec{H}_{eff} \times \vec{M} + \frac{\alpha}{M_s} \left(\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \times \vec{M} - \alpha M_s \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - v_j \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \right. \\ \left. - \beta v_j M_s \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \right) - v_j \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \frac{\beta v_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = & \gamma \vec{H}_{eff} \times \vec{M} + \frac{\alpha \gamma}{M_s} \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \times \vec{M} - \alpha^2 \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{\alpha v_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \\ & - \alpha \beta v_j \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} - v_j \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \frac{\beta v_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha^2 \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = & \gamma \vec{H}_{eff} \times \vec{M} + \frac{\alpha \gamma}{M_s} \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \times \vec{M} - \alpha \beta v_j \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \\ & - v_j \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \frac{\beta v_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} - \frac{\alpha v_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\alpha^2 + 1) \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = & \gamma \vec{H}_{eff} \times \vec{M} + \frac{\alpha \gamma}{M_s} \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \times \vec{M} - (\alpha \beta + 1) v_j \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \\ & + (\beta - \alpha) \frac{v_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \end{aligned} \quad (5.12)$$

Dividindo (5.12) por γ , temos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\gamma} (\alpha^2 + 1) \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = & \frac{1}{\gamma} \gamma \vec{H}_{eff} \times \vec{M} + \frac{1}{\gamma} \frac{\alpha \gamma}{M_s} \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \times \vec{M} - \frac{1}{\gamma} (\alpha \beta + 1) v_j \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \\ & + \frac{1}{\gamma} (\beta - \alpha) \frac{v_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{(\alpha^2 + 1)}{\gamma} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = & \vec{H}_{eff} \times \vec{M} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \vec{H}_{eff} \times \vec{M} - (\alpha \beta + 1) \frac{v_j}{\gamma} \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \\ & + (\beta - \alpha) \frac{v_j}{M_s \gamma} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \end{aligned} \quad (5.13)$$

Conforme citamos no início dessa seção, precisamos encontrar uma equação dinâmica adimensional (referente às células micromagnéticas).

Vamos então fazer algumas alterações:

- A dinâmica que será feita é referente às células micromagnéticas, de

modo que os momentos magnéticos com que iremos trabalhar, são os momentos dessas células ($\vec{M} \rightarrow \vec{m}_i = m_{cel}\hat{m}_i$).

- Devido esta alteração, devemos considerar também que a magnetização de saturação das células é m_{cel} e não mais M_s ($M_s \rightarrow m_{cel}$).

- A mesma alteração devemos fazer para o campo local efetivo, de modo que agora iremos trabalhar com o campo local da célula micromagnética ($H_{eff} \rightarrow \vec{B}_i = \frac{J_{cel}}{m_{cel}}\vec{b}_i$), onde \vec{b}_i é o campo efetivo local adimensional.

Desse modo a equação (5.13) fica:

$$\begin{aligned} \frac{(\alpha^2 + 1)}{\gamma} \frac{\partial \vec{m}_i}{\partial t} &= \vec{B}_i \times \vec{m}_i + \frac{\alpha}{m_{cel}} \vec{m}_i \times \vec{B}_i \times \vec{m}_i - (\alpha\beta + 1) \frac{v_j}{\gamma} \frac{\partial \vec{m}_i}{\partial x} + \\ &+ (\beta - \alpha) \frac{v_j}{m_{cel}\gamma} \vec{m}_i \times \frac{\partial \vec{m}_i}{\partial x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{(\alpha^2 + 1)}{\gamma} \frac{\partial (m_{cel}\hat{m}_i)}{\partial t} &= \left(\frac{J_{cel}}{m_{cel}} \vec{b}_i \right) \times (m_{cel}\hat{m}_i) + \frac{\alpha}{m_{cel}} (m_{cel}\hat{m}_i) \times \left(\frac{J_{cel}}{m_{cel}} \vec{b}_i \right) \times (m_{cel}\hat{m}_i) + \\ &- (\alpha\beta + 1) \frac{v_j}{\gamma} \frac{\partial (m_{cel}\hat{m}_i)}{\partial x} + (\beta - \alpha) \frac{v_j}{m_{cel}\gamma} (m_{cel}\hat{m}_i) \times \frac{\partial (m_{cel}\hat{m}_i)}{\partial x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{(\alpha^2 + 1)m_{cel}}{\gamma} \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial t} &= J_{cel}\vec{b}_i \times \hat{m}_i + \alpha J_{cel}\hat{m}_i \times \vec{b}_i \times \hat{m}_i + \\ &- (\alpha\beta + 1) \frac{v_j m_{cel}}{\gamma} \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x} + (\beta - \alpha) \frac{v_j m_{cel}}{\gamma} \hat{m}_i \times \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x} \end{aligned} \quad (5.14)$$

Dividindo (5.14) por γ , vem:

$$\begin{aligned} \frac{\gamma}{m_{cel}} \frac{(\alpha^2 + 1)m_{cel}}{\gamma} \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial t} &= \frac{\gamma}{m_{cel}} J_{cel}\vec{b}_i \times \hat{m}_i + \frac{\gamma}{m_{cel}} \alpha J_{cel}\hat{m}_i \times \vec{b}_i \times \hat{m}_i + \\ &- \frac{\gamma}{m_{cel}} (\alpha\beta + 1) \frac{v_j m_{cel}}{\gamma} \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x} + \frac{\gamma}{m_{cel}} (\beta - \alpha) \frac{v_j m_{cel}}{\gamma} \hat{m}_i \times \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\alpha^2 + 1) \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial t} &= \frac{J_{cel} \gamma}{m_{cel}} \vec{b}_i \times \hat{m}_i + \frac{\alpha J_{cel} \gamma}{m_{cel}} \hat{m}_i \times \vec{b}_i \times \hat{m}_i + \\
&\quad - (\alpha\beta + 1) v_j \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x} + (\beta - \alpha) v_j \hat{m}_i \times \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x}
\end{aligned} \tag{5.15}$$

De acordo com a referência [7], podemos definir uma frequência angular de precessão do momento magnético ω_0 , tal que:

$$\omega_0 = \frac{J_{cel} \gamma}{m_{cel}} \tag{5.16}$$

Deste modo, substituindo (5.16) em (5.15) temos:

$$\begin{aligned}
(\alpha^2 + 1) \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial t} &= \omega_0 \vec{b}_i \times \hat{m}_i + \alpha \omega_0 \hat{m}_i \times \vec{b}_i \times \hat{m}_i + \\
&\quad - (\alpha\beta + 1) v_j \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x} + (\beta - \alpha) v_j \hat{m}_i \times \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x}
\end{aligned} \tag{5.17}$$

Dividindo (5.17) por ω_0 , temos:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\omega_0} (\alpha^2 + 1) \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial t} &= \frac{1}{\omega_0} \omega_0 \vec{b}_i \times \hat{m}_i + \frac{1}{\omega_0} \alpha \omega_0 \hat{m}_i \times \vec{b}_i \times \hat{m}_i + \\
&\quad - \frac{1}{\omega_0} (\alpha\beta + 1) v_j \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x} + \frac{1}{\omega_0} (\beta - \alpha) v_j \hat{m}_i \times \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x} \\
\frac{1}{\omega_0} (\alpha^2 + 1) \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial t} &= \vec{b}_i \times \hat{m}_i + \alpha \hat{m}_i \times \vec{b}_i \times \hat{m}_i + \\
&\quad - (\alpha\beta + 1) \frac{v_j}{\omega_0} \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x} + (\beta - \alpha) \frac{v_j}{\omega_0} \hat{m}_i \times \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x}
\end{aligned} \tag{5.18}$$

Vamos definir incremento de tempo computacional adimensional $\partial\tau$ e incremento de espaço computacional adimensional $\partial x'$ como:

$$\begin{cases} \partial\partial\tau = \omega_0 \partial t \\ \partial x' = \frac{1}{a} \partial x \rightarrow \partial x = a \partial x' \end{cases}$$

Dessa forma, temos que a equação (5.18) será:

$$(\alpha^2 + 1) \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial \tau} = \vec{b}_i \times \hat{m}_i + \alpha \hat{m}_i \times \vec{b}_i \times \hat{m}_i - (\alpha\beta + 1) \frac{v_j}{\omega_0} \frac{\partial \hat{m}_i}{(a\partial x')} + (\beta - \alpha) \frac{v_j}{\omega_0} \hat{m}_i \times \frac{\partial \hat{m}_i}{(a\partial x')}$$

$$(\alpha^2 + 1) \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial \tau} = \vec{b}_i \times \hat{m}_i + \alpha \hat{m}_i \times \vec{b}_i \times \hat{m}_i - (\alpha\beta + 1) \frac{v_j}{a\omega_0} \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x'} + (\beta - \alpha) \frac{v_j}{a\omega_0} \hat{m}_i \times \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x'}$$

$$\frac{\partial \hat{m}_i}{\partial \tau} = \frac{1}{(\alpha^2 + 1)} \left[\vec{b}_i \times \hat{m}_i + \alpha \hat{m}_i \times \vec{b}_i \times \hat{m}_i - (\alpha\beta + 1) \left(\frac{v_j}{a\omega_0} \right) \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x'} + (\beta - \alpha) \left(\frac{v_j}{a\omega_0} \right) \hat{m}_i \times \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial x'} \right] \quad (5.19)$$

onde (5.19) é a equação de L.L.G. adimensional e a é o espaçamento da rede. Observe que o termo $a\omega_0$ tem dimensão de inverso de velocidade, de modo que a expressão $\left(\frac{v_j}{a\omega_0}\right)$ é adimensional.

5.2 Integração Numérica

No item anterior encontramos a equação de L.L.G. adimensional a fim de torná-la integrável do ponto de vista computacional. Existem vários métodos numéricos capazes de resolver equações diferenciais não-lineares ordinárias, cada um tendo pontos positivos e negativos dependendo da aplicação. Neste trabalho utilizamos o preditor-corretor e o método de Runge-Kutta, mesmos métodos utilizados V. Ferreira [7] e D. Toscano [4] em suas respectivas teses. Escolhemos estes métodos por serem suficientemente precisos e relativamente

fáceis de implementar computacionalmente.

A equação de L.L.G. adimensional possui a seguinte estrutura:

$$\frac{\partial \hat{m}_i}{\partial \tau} = \vec{f}(\hat{m}_x, \hat{m}_y, \hat{m}_z, \tau) \quad (5.20)$$

de modo que podemos reescrevê-la separando nas coordenadas espaciais

$$\begin{cases} \frac{\partial m_i^x}{\partial \tau} = f^x(\hat{m}_x, \hat{m}_y, \hat{m}_z, \tau) \\ \frac{\partial m_i^y}{\partial \tau} = f^y(\hat{m}_x, \hat{m}_y, \hat{m}_z, \tau) \\ \frac{\partial m_i^z}{\partial \tau} = f^z(\hat{m}_x, \hat{m}_y, \hat{m}_z, \tau) \end{cases}$$

Como existem N sítios para integrar nesse sistema, para integrar a equação proposta temos que especificar $3N$ condições iniciais

$$m_i^a(\tau_0) = m_i^{a0} \quad (5.21)$$

onde a se refere às coordenadas x , y e z .

Pretendemos determinar os valores aproximados de m_i^a nos instantes $\tau_n = \tau_0 + n\Delta$, onde $n = 1, 2, \dots, N$ e Δ é o incremento de tempo ($\partial\tau \rightarrow \Delta$). Para evoluir nossa equação no tempo de τ_n para $\tau_n + 1$ utiliza-se o seguinte procedimento:

$$m_{n+1}^a = m_n^a + \frac{\Delta}{6}(K_{n,1}^a + 2K_{n,2}^a + 2K_{n,3}^a + K_{n,4}^a) \quad (5.22)$$

onde

$$\begin{cases} K_{n,1}^a = f^a(m_n^a, \tau_n) \\ K_{n,2}^a = f^a(m_n^a + 0,5\Delta K_{n,1}^a, \tau_n + 0,5\Delta) \\ K_{n,3}^a = f^a(m_n^a + 0,5\Delta K_{n,2}^a, \tau_n + 0,5\Delta) \\ K_{n,4}^a = f^a(m_n^a + \Delta K_{n,3}^a, \tau_n + \Delta). \end{cases}$$

Primeiramente supomos uma configuração inicial. Calculamos então o campo efetivo dessa configuração e os coeficientes $K_{n,1}$ são determinados. Antes que um passo de tempo seja dado, os campos efetivos intermediários e os coeficientes $K_{n,2}$, $K_{n,3}$ e $K_{n,4}$ são computados. Utilizamos este método de Runge-Kutta (método de passo simples) como método de partida.

Posteriormente (para as demais configurações) utilizamos método de previsão e correção de Adams-Bashforth-Moulton, que utiliza informação de alguns passos além do antecessor para obter a nova configuração (método de passos múltiplos). Como agora, após aplicar o método de Runge-Kutta, conhecemos as configurações m_{n-3}^a , m_{n-2}^a , m_{n-1}^a e m_n^a e calculamos f_{n-3}^a , f_{n-2}^a , f_{n-1}^a e f_n^a .

Em seguida, utilizamos o algoritmos de Adams-Bashforth (previsão):

$$m_{n+1}^a = m_n^a + \frac{\Delta}{24}(55f_n^a - 59f_{n-1}^a + 37f_{n-2}^a - 9f_{n-3}^a) \quad (5.23)$$

obtendo agora as configurações m_{n+1}^a e calculamos f_{n+1}^a . Logo após utilizamos o algoritmo de Adams-Moulton (correção):

$$m_{n+1}^a = m_n^a + \frac{\Delta}{24}(9f_{n+1}^a + 19f_n^a - 5f_{n-1}^a + f_{n-2}^a) \quad (5.24)$$

que obtem um valor mais preciso da próxima configuração do momento m_{n+1}^a .

O motivo de usar o Runge-Kutta apenas como método de partida e depois

mudar para Adams-Bashforth-Moulton é o fato do método Runge-kutta de quarta ordem exigir quatro cálculos do campo efetivo em cada passo, enquanto que o método de previsão e correção exige apenas dois. Vale lembrar que o cálculo do campo efetivo é demorado devido ao caráter de longo alcance do campo dipolar.

Usamos a linguagem Fortran 90 para implementar programa que usamos em nossas simulações.

Capítulo 6

Resultados e Discussões

Neste capítulo, discutiremos alguns resultados de simulações feitas para estudar o comportamento dinâmico de paredes de domínio em nanofios magnéticos sob o efeito de corrente de spin-polarizado.

O procedimento inicia-se gerando computacionalmente nanofios magnéticos com vários valores de largura e espessura, porém de comprimento fixo $L = 1255nm$, que é um valor bastante usado em artigos relacionados a este estudo. A configuração inicial de uma parede de domínio transversal (PDT) é apresentada na Figura 6.1.

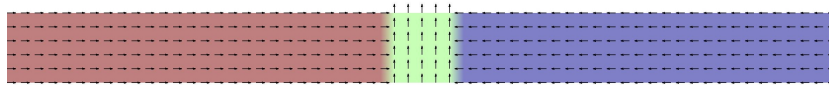


Figura 6.1: Representação gráfica da configuração inicial dos spins dada ao nanofio.

Com esta configuração inicial de spins, integramos a equação de L.L.G. padrão dada pela equação (3.7). Aqui utilizamos uma constante de amortecimento $\alpha \neq 0$ (para o Permalloy, $\alpha = 0,01$), para que o sistema evolua no tempo até encontrar uma configuração de energia local mínima. Tal configuração está representada na Figura 6.2:

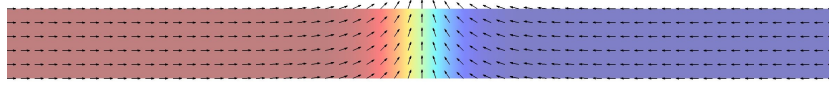


Figura 6.2: Representação gráfica da configuração dos spins no estado fundamental.

Depois que a fita se encontra numa configuração de energia local mínima, aplicamos uma corrente de spin polarizada na direção do eixo da nanofita, a fim de se estudar a dinâmica da parede de domínio contida no centro dela. O grupo de pesquisa em Matéria Condensada da UFJF responsável por simulações computacionais, já realizaram cálculos semelhantes utilizando aplicação de campo magnético na direção do eixo da fita. Foi proposto neste trabalho de mestrado que comparássemos os resultados usando simulação de corrente aplicada com resultados de simulação usando campo magnético aplicado. Para fazer esta comparação utilizei a tese de doutorado de V. A. Ferreira [7] e o artigo de Porter et al. [28].

Para verificar a dinâmica da parede de domínio sem dissipação de energia, fazemos $\alpha = 0$. Utilizamos um pulso de corrente constante conforme a curva representada na figura a seguir:

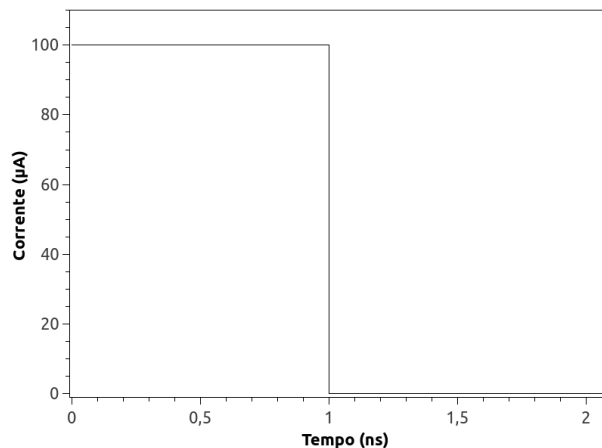


Figura 6.3: Representação gráfica de um exemplo do pulso de corrente aplicada (neste exemplo, $I = 100\mu A$) em função do tempo (duração do pulso $t = 1ns$) sobre os nanofios magnéticos.

Foi observado por V. A. Ferreira[7] que para nanofios com espessura de 5 nm e larguras entre 10 e 35 nm, com amplitude de campo $\mu_0 H_{ap} > 2mT$, a PDT se move atingindo à borda do nanofio e invertendo o sentido do seu movimento, mas mantendo o módulo da velocidade. Além disso, o sentido de magnetização da PDT se inverte nesse processo, ou seja o “V” característico do formato da parede se transforma em “Λ” ao encontrar a borda e retornar e, tal inversão se repete a cada vez que a PDT é refletida pela borda.

Através de simulações com aplicação de corrente de spin-polarizado, pode-se observar que o valor mínimo de densidade de corrente para o qual este comportamento é observado, depende das dimensões do nanofio. Para largura $W = 10nm$, $j_e > 5 \times 10^{10} A/m^2$; para $W = 15nm$, $j_e > 20 \times 10^{10} A/m^2$; para $W = 20nm$, $j_e > 30 \times 10^{10} A/m^2$; para $W = 25nm$, $j_e > 45 \times 10^{10} A/m^2$; são as condições para que este comportamento seja observado. Tal comportamento está representado na sequência temporal mostrada a seguir:

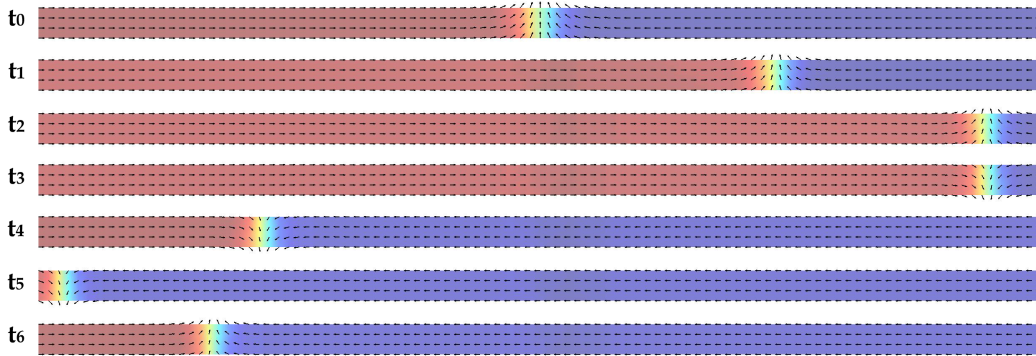


Figura 6.4: Representação gráfica de uma sequência temporal do movimento de uma parede de domínio transversal em um nanofio com $\alpha = 0$ sob a aplicação de um pulso de corrente de spin-polarizado, cuja densidade de corrente é $j_e = 50 \times 10^{10} A/m^2$, com 1 ns de duração num nanofio de dimensões $(5 \times 15 \times 1255)nm^3$.

A Figura 6.5 mostra um gráfico que representa a velocidade da parede de domínio em seu trajeto apresentado na Figura 6.4. Cada variação brusca da velocidade no gráfico representa o momento em que a PDT atinge a borda do nanofio e inverte seu movimento, invertendo assim, o sinal da sua velocidade.

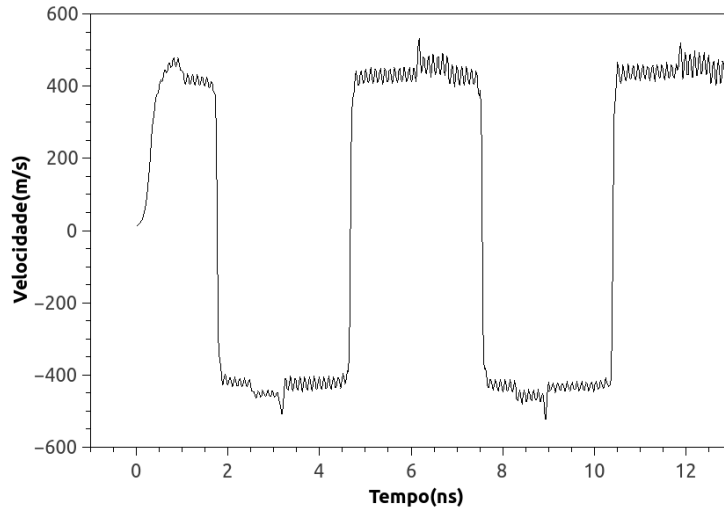


Figura 6.5: Gráfico da velocidade da parede de domínio transversal em um nanofio de dimensões $(5 \times 20 \times 1255)nm^3$ com densidade de corrente $j_e = 50 \times 10^{10} A/m^2$.

Podemos ver por este gráfico que a velocidade média apresenta irregularidades, o que indica uma variação da velocidade em torno do valor médio devido às propagações de ondas de spin que interferem na magnetização, influenciando o cálculo direto da velocidade. Um comportamento semelhante foi observado por V. A. Ferreira[7], apresentado na figura a seguir:

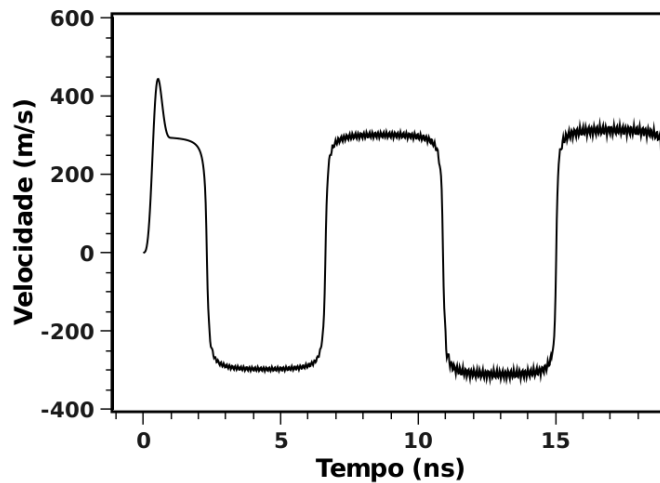


Figura 6.6: Velocidade da PDT em um nanofio de dimensões $(5 \times 15 \times 1255)nm$ com um campo de amplitude $\mu_0 H_{ap} = 6mT$.

Ao aplicarmos uma densidade de corrente de $j_e < 5 \times 10^{10} A/m^2$ para nanofio de largura $W = 10nm$, $j_e < 20 \times 10^{10} A/m^2$ para $W = 15nm$, $j_e < 30 \times 10^{10} A/m^2$ para $W = 20nm$, $j_e < 45 \times 10^{10} A/m^2$ para $W = 25nm$, a parede se move em direção à borda do fio e então é expulsa, transformando a configuração em um monodomínio com os momentos alinhados ao longo do comprimento do fio. Comportamento semelhante também foi previsto por V. A. Ferreira[7]. A figura a seguir mostra um gráfico típico da velocidade em função do tempo para a situação citada no início deste parágrafo:

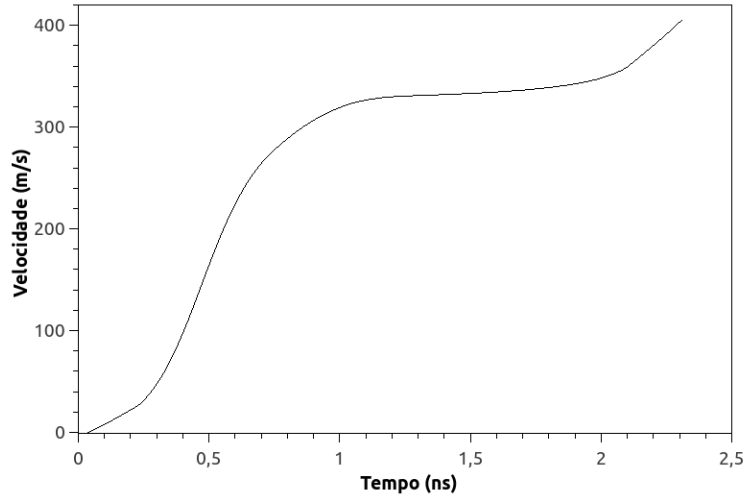


Figura 6.7: Gráfico que apresenta o comportamento da velocidade da parede de domínio em função do tempo num nanofio de dimensões $(5 \times 20 \times 1255)nm^3$ sob uma densidade de corrente de spin-polarizado $j_e = 15 \times 10^{10} A/m^2$.

Nestas condições, podemos observar pelo gráfico que a parede parte do repouso, atinge uma velocidade máxima e posteriormente mantém uma velocidade média constante. Esta velocidade constante será útil em nossos estudos mais adiante. Quando a parede atinge a borda, o gráfico mostra uma ligeira elevação no valor da velocidade, o que se deve a uma variação momentânea da magnetização no eixo x. Quando formos estudar a velocidade média, vamos considerar o movimento da parede apenas em regiões

distantes das extremidades para desconsiderar os efeitos de borda.

A partir de um determinado valor de densidade de corrente, a velocidade máxima é atingida em forma de um pico, e decai em seguida para um valor aproximadamente constante, conforme a figura abaixo:

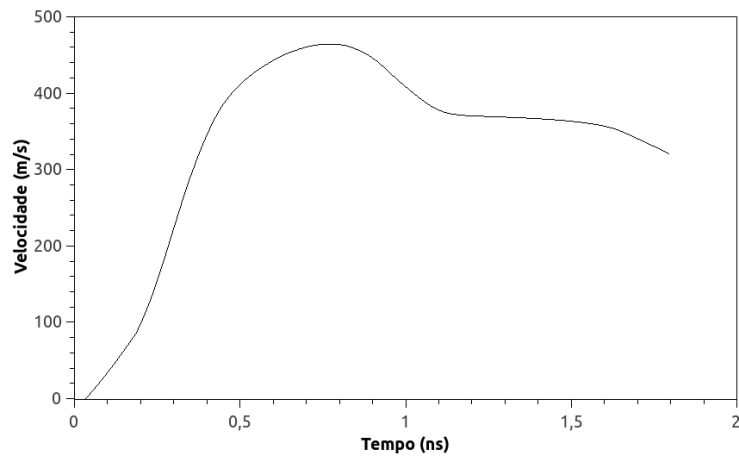


Figura 6.8: Gráfico que apresenta o comportamento da velocidade da parede de domínio em função do tempo num nanofio de dimensões $(5 \times 20 \times 1255)nm^3$ sob uma densidade de corrente de spin-polarizado $j_e = 55 \times 10^{10} A/m^2$.

A partir do menor valor de densidade de corrente para o qual este comportamento da velocidade da parede em função do tempo pode ser observado, a velocidade média alcançada passa a ser cada vez menor, conforme proposto por Walker[31] e observado por V. A. Ferreira[7]. Se continuarmos aumentando esta densidade de corrente, vamos chegar numa situação onde ocorre a nucleação da magnetização, e a sua precessão no eixo z, o que em alguns casos, não preserva o formato da parede, levando a magnetização para o eixo z. Quando isto acontece, paramos de aumentar a densidade de corrente.

À medida que vamos aumentando a densidade de corrente, quando o regime de estado estacionário termina, a velocidade média cai (veremos isto posteriormente). Este comportamento é chamado de quebra Walker. Acima do campo chamado Campo de Walker, após a parede iniciar seu movimento,

um antivórtice é criado na parte inferior da parede e sobe através dela. Neste momento a parede de domínio sofre uma desaceleração inverte o sentido de seu movimento variando polaridade da parede de “V” passa a ser “Λ”, passando pelo eixo z no processo. Podemos ver este fato na figura a seguir:

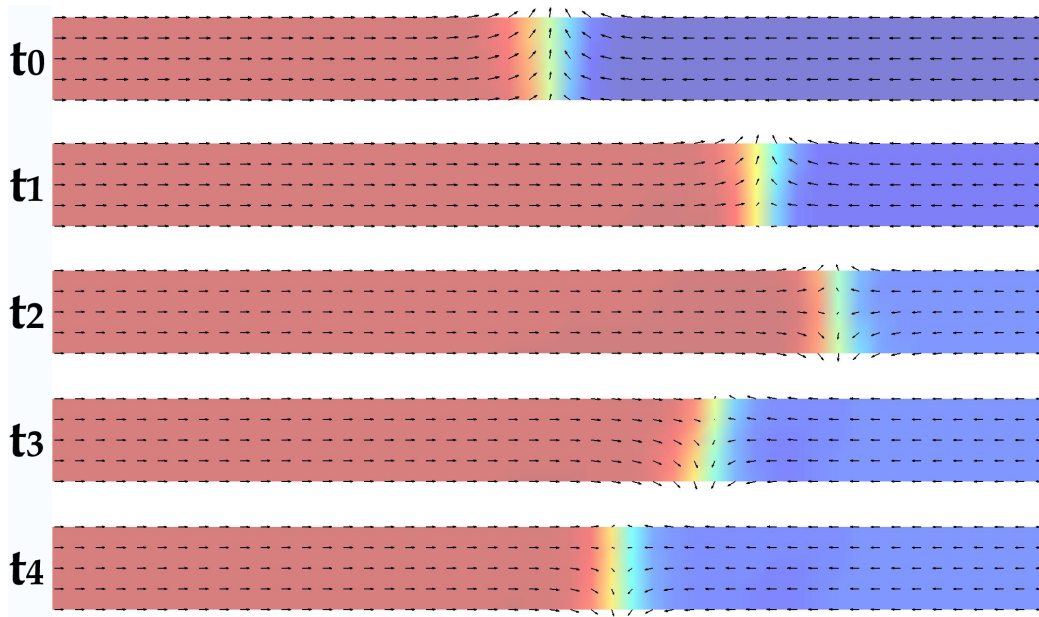


Figura 6.9: Representação gráfica de uma sequência temporal do movimento de uma parede de domínio transversal em um nanofio com $\alpha = 0$ sob a aplicação de um pulso de corrente de spin-polarizado, cuja densidade de corrente é $j_e = 85 \times 10^{10} A/m^2$, com 1 ns de duração num nanofio de dimensões $(5 \times 25 \times 1255)nm^3$.

Conforme vamos aumentando o valor da densidade de corrente, maior será a velocidade máxima da parede de domínio, até um pico de velocidade. A partir de um determinado valor densidade de corrente, o pico de velocidade máxima possui um valor aproximadamente constante em cada nanofio. Isso sugere que, para esses fios, existe um limite de corrente de spin aplicado para que se alcance o valor máximo na velocidade da parede de domínio. Esta descrição pode ser verificada nos gráficos a seguir:

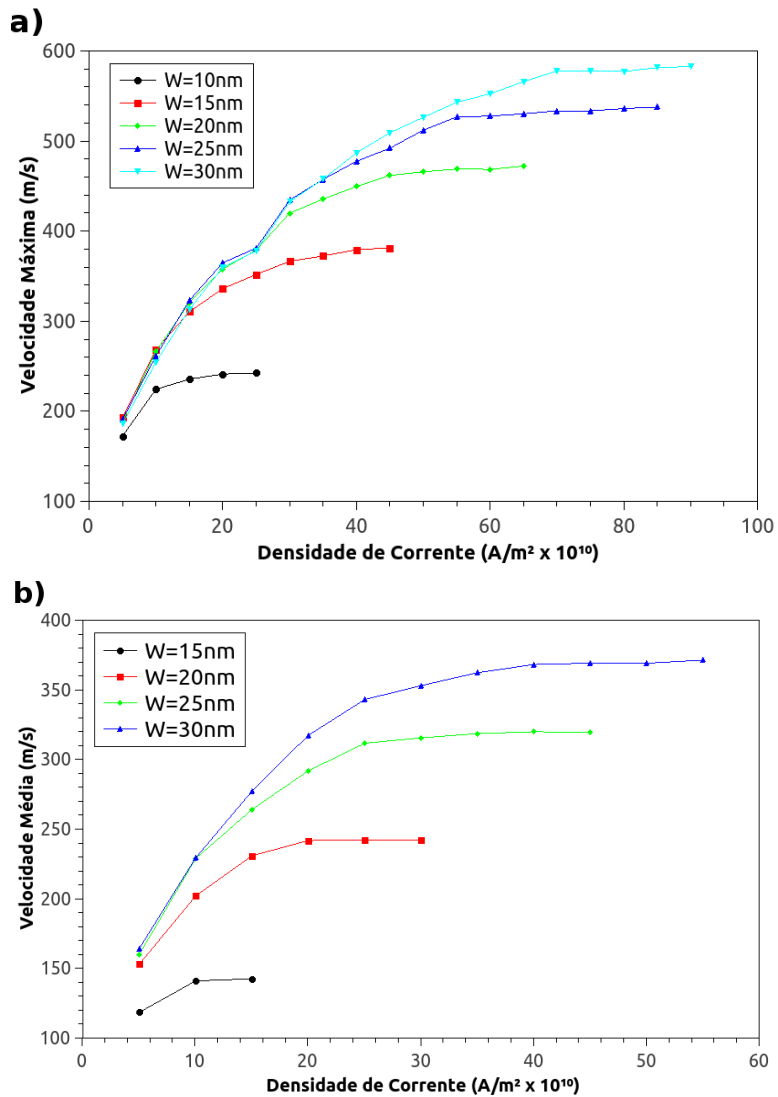


Figura 6.10: Gráfico da velocidade máxima alcançada pela parede de domínio em função da densidade de corrente para nanofios de espessura a) $t = 5nm$, b) $t = 10nm$.

Conforme discutido anteriormente, podemos ver que nos gráficos das Figuras 6.7 e 6.8, a parede parte do repouso, atinge uma velocidade máxima e mantém uma velocidade média constante, que é menor ou aproximadamente igual à velocidade máxima, dependendo do valor da densidade de corrente aplicada. Ao fazer o gráfico (Figura 6.11) dessa velocidade média em função da densidade de corrente, conforme já citado, à medida que aumentamos

a densidade de corrente para um determinado nanofio, maior será a velocidade média atingida; mas quando o regime de estado estacionário termina, a velocidade média cai. Percebemos também que a velocidade da parede de domínio aumenta com o aumento da largura do nanofio, e este resultado irá se repetir para as outras espessuras. Um resultado parecido pode ser encontrado em trabalhos de V. A. Ferreira[7] e Porter/Donahue[28], onde estes autores aplicaram campo magnético ao invés de corrente de spin-polarizado.

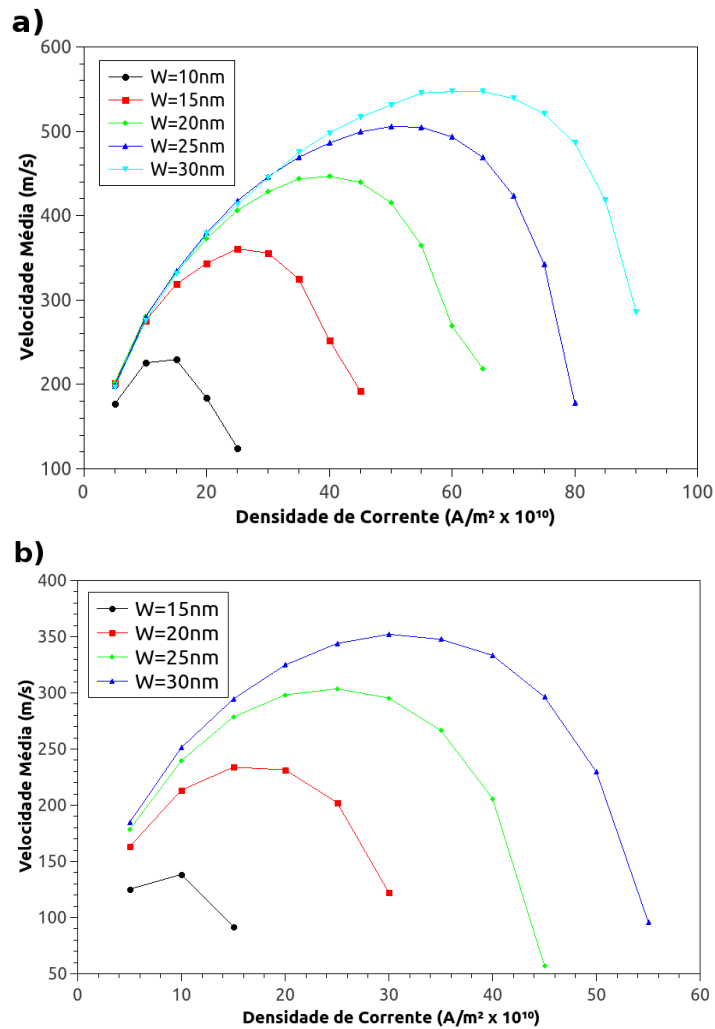


Figura 6.11: Gráfico da velocidade média alcançada pela parede de domínio em função da densidade de corrente para nanofios de espessura a) $t = 5nm$, b) $t = 10nm$.

Observando o gráfico da Figura 6.12, percebemos que quanto mais espesso é o nanofio, menor é a velocidade da parede de domínio, fato também observado por V. A Ferreira[7]. Tal comportamento é o inverso para a relação entre a velocidade com a largura do nanofio, e se deve ao fato de que ao aumentar a espessura do nanofio, surge uma dificuldade de mobilidade da parede de domínio devido à força de interação dipolar existente entre os momentos.

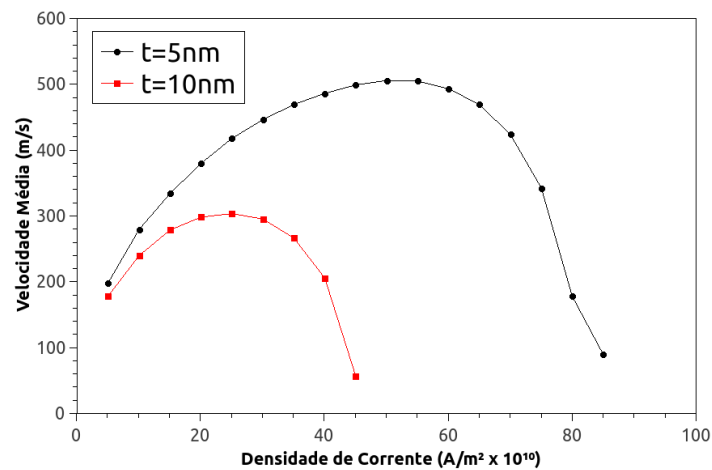


Figura 6.12: Gráfico da velocidade média alcançada pela parede de domínio em função da densidade de corrente para nanofios de largura $W = 25nm$.

6.1 Conclusões

Vimos neste trabalho que nanofitas magnéticas são ferramentas que prometem melhorar e muito o desempenho de mídias de gravação. Fizemos aqui uma revisão das teorias que envolvem materiais magnéticos e desenvolvemos cálculos para encontrar a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert para corrente de spin-polarizado aplicada, modelo de Heisenberg e termo dipolar. Para isto, precisamos tratar nosso sistema semi-classicamente. Baseado nessas teorias, desenvolvemos um programa capaz de estudar estas nanofitas magnéticas por simulação computacional.

Nossos estudos mostram resultados parecidos com outros trabalhos, porém um pouco diferentes e ao mesmo tempo interessantes. Inicialmente, tivemos como objetivo comparar resultados de simulações que utilizam campo magnético para mover a parede com simulações que utilizam corrente de spin-polarizado.

Embora tenhamos encontrado configurações que possibilitaram a parede de se mover seguindo um movimento oscilatório, em nosso trabalho esta configuração aparece e deixa de acontecer em diferentes valores de densidade de corrente quando mudamos as dimensões do nanofio, ao contrário do que se pode ver no trabalho de V. A. Ferreira[7] mesmo alterando a largura do nanofio, os valores de campo nos quais estas configurações aparecem são os mesmos. Isso também vale para o valor da corrente equivalente ao campo de Walker. Este fato que tornou os gráficos de velocidade média e máxima para o problema com aplicação de corrente diferentes dos gráficos de velocidade média e máxima para o problema com aplicação de campo. O comportamento individual é semelhante, porém a diferença torna-se perceptível ao visualizar coletivamente. Os gráficos a seguir foram retirados dos trabalhos de V. A. Ferreira[7] e de Porter[28] e ilustram estas diferenças aqui discutidas:

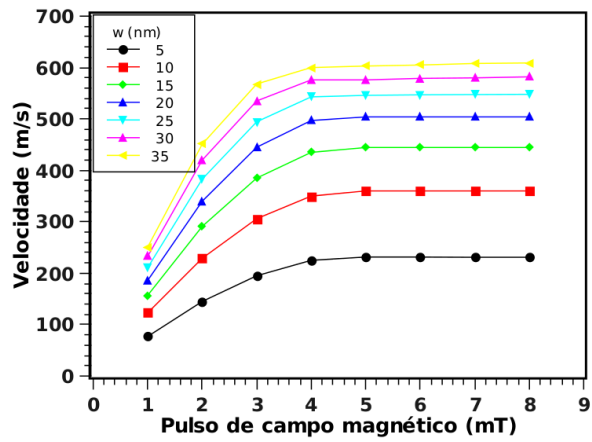


Figura 6.13: Velocidade máxima alcançada pela PDT em função da amplitude de campo magnético $\mu_0 H_{ap}$ para os nanofios de espessura $t = 5$ nm estudados [7]. Equivalente aos gráficos da Figura 6.10.

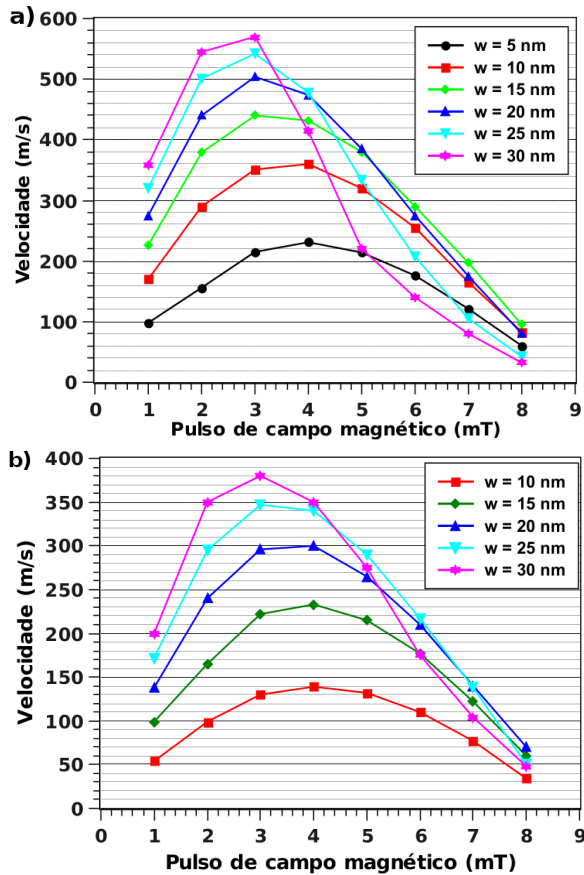


Figura 6.14: Velocidade média da PDT em um nanofio de, a) $t = 5$ nm b) $t = 10$ nm para diferentes larguras em função da amplitude de campo magnético $\mu_0 H_{ap}$ [7]. Equivalente aos gráficos da Figura 6.11.

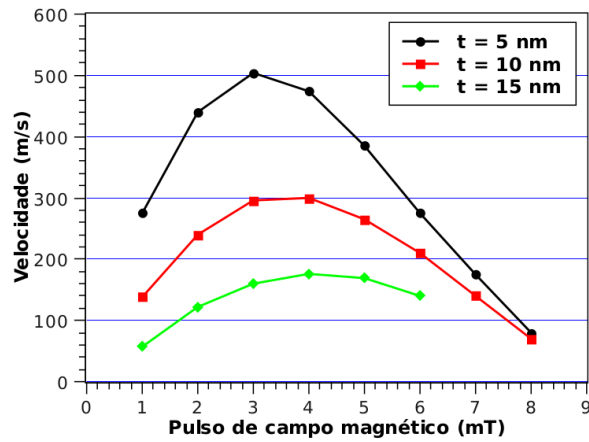


Figura 6.15: Velocidade da PDT em função da amplitude de campo magnético aplicado em um nanofio de largura $w = 20nm$ para as espessuras $t = 5, 10$ e $15nm$ [7]. Equivalente ao gráfico da Figura 6.12.

Resumindo o que dito, ao fazer as comparações percebemos que cada sistema individualmente possui comportamento semelhante tanto quando aplicamos corrente de spin polarizada, como quando aplicamos campo magnético. Porém ao analisar coletivamente percebemos algumas diferenças, pois ao aplicarmos campo magnético, o comportamento é o mesmo, num determinado valor de campo, para todos as larguras. Isto não acontece quando aplicamos corrente.

6.2 Perspectivas Futuras

É de grande interesse alterar a construção do programa, tornando-o capaz de estudar nanofitas de dimensões maiores utilizando programação paralela. Também é de nosso interesse, acrescentar impurezas magnéticas em nossas amostras para ver como as paredes de domínio se comportam na presença delas.

Apêndice A

Modelo de Heisenberg

Primeiramente vamos considerar um magneto de banda (metal ferromagnético). O princípio de Pauli cuida para que os elétrons com spins paralelos um ao outro (ou seja, se eles pertencem à mesma faixa de energia e com isso o mesmo conjunto de números quânticos) não chegue muito perto uns dos outros. Isto leva a uma redução da repulsão de Coulomb de partículas de carga semelhante. Isto implica na propriedade adicional (e fundamental) que as funções de onda devem obedecer: a simetria ou anti-simetria de acordo com o tipo de partícula. Como estamos estudando interação entre elétrons, a função de onda total (envolvendo também os graus de liberdade de spin) deve ser anti-simétrica.

Vamos demonstrar agora com um exemplo simples de um sistema de dois elétrons, como o princípio do Pauli pode levar a efeitos magnéticos. Os dois elétrons são férmions idênticos, de modo que a função de onda total deve ser anti-simétrica. Estes elétrons interagem via potencial Coulombiano

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \quad (\text{A.1})$$

onde $r_{12} = |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$ é a distância entre os elétrons.

A função de onda $|\Psi\rangle$ deve ser um produto da parte espacial e pela parte de spin:

$$|\Psi\rangle = |q^{(\pm)}\rangle |S; m_S\rangle^{(\mp)} \quad (\text{A.2})$$

de modo que para um sistema de dois elétrons temos duas possibilidades: $S = 0$ e $S = 1$.

A simetria da parte de spin corrige a simetria da parte correspondente ao espaço $|q\rangle$, uma vez que a função de onda total de $|\Psi\rangle$ deve ser anti-simétrica.

- Resolvendo a parte correspondente ao spin:

Nos cursos de mecânica quântica vemos que, dado um sistema de duas partículas de spin $1/2$, considerando apenas seu spin como grau de liberdade e fazendo \vec{S}_1 e \vec{S}_2 os operadores de spin dessas duas partículas, podemos definir um spin total \vec{S} tal que:

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad (\text{A.3})$$

Os vetores $|S, m_S\rangle$ satisfazem às equações:

$$\vec{S}_1^2 |S, m_S\rangle = \vec{S}_2^2 |S, m_S\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |S, m_S\rangle \quad (\text{A.4})$$

$$\vec{S}^2 |S, m_S\rangle = S(S+1) \hbar^2 |S, m_S\rangle \quad (\text{A.5})$$

Para este sistema de duas partículas, existem quatro estados possíveis de spin: $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\downarrow\rangle$, de modo que podemos representar os estados de singleto e tripleto por:

$$\chi_A \text{ (singleto)} \rightarrow |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\chi_S \text{ (triplete)} \rightarrow \begin{cases} |1, 1\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle] \\ |1, -1\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle \end{cases}$$

Vemos então que:

$$\vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (\text{A.6})$$

uma vez que \vec{S}_1 e \vec{S}_2 comutam. Então podemos fazer:

$$\vec{S}^2|S, m_S\rangle = \vec{S}_1^2|S, m_S\rangle + \vec{S}_2^2|S, m_S\rangle + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2|S, m_S\rangle$$

$$S(S+1)\hbar^2|S, m_S\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|S, m_S\rangle + \frac{3}{4}\hbar^2|S, m_S\rangle + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2|S, m_S\rangle$$

$$S(S+1)\hbar^2|S, m_S\rangle = \frac{3}{2}\hbar^2|S, m_S\rangle + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2|S, m_S\rangle$$

$$S(S+1)\hbar^2|S, m_S\rangle = \left(\frac{3}{2}\hbar^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2\right)|S, m_S\rangle$$

$$S(S+1)\hbar^2 = \frac{3}{2}\hbar^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2} \left[S(S+1)\hbar^2 - \frac{3}{2}\hbar^2 \right] \quad (\text{A.7})$$

→ Se estamos nos referindo ao estado de singlete ($S = 0$):

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2} \left[0(0+1)\hbar^2 - \frac{3}{2}\hbar^2 \right] = -\frac{3}{4}\hbar^2 \quad (\text{A.8})$$

→ Se estamos nos referindo ao estado de tripleto ($S = 1$):

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2} \left[1(1+1)\hbar^2 - \frac{3}{2}\hbar^2 \right] = \frac{1}{2} \left[2\hbar^2 - \frac{3}{2}\hbar^2 \right] = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2}\hbar^2 \right] = \frac{1}{4}\hbar^2 \quad (\text{A.9})$$

Como consequência, o operador Hamiltoniano ficará da forma:

$$\hat{\mathcal{H}} \equiv \frac{1}{4}(E^+ + 3E^-) - (E^+ - E^-) \frac{1}{\hbar^2} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (\text{A.10})$$

onde E^+ e E^- são valores médios de energia de interação nos estados simétrico e anti-simétrico referentes à parte espacial, que serão estudados mais a frente.

- Resolvendo a parte correspondente ao espaço:

Para resolver a parte espacial vamos utilizar o método de Heitler-London para o sistema de 2 elétrons de molécula de H_2 . Sejam $\phi_1(\vec{r}_1)$ e $\phi_2(\vec{r}_2)$ funções de onda de elétrons individuais. As funções de onda espaciais simétricas e anti-simétricas para o sistema de dois elétrons são:

$$\begin{cases} |q^{(+)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_1(\vec{r}_1)\rangle |\phi_2(\vec{r}_2)\rangle + |\phi_1(\vec{r}_2)\rangle |\phi_2(\vec{r}_1)\rangle] \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [|q_1\rangle + |q_2\rangle] (\text{simétrica}) \\ |q^{(-)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_1(\vec{r}_1)\rangle |\phi_2(\vec{r}_2)\rangle - |\phi_1(\vec{r}_2)\rangle |\phi_2(\vec{r}_1)\rangle] \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [|q_1\rangle - |q_2\rangle] (\text{anti-simétrica}) \end{cases}$$

Sejam os valores médios da energia de interação calculada nos estados simétrico e anti-simétrico definidos por:

$$\begin{aligned} \rightarrow E^+ &\equiv \langle U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle^+ = \langle q^+ | U | q^+ \rangle = (\langle q_1 | + \langle q_2 |) U (|q_1\rangle + |q_2\rangle) \\ &= \langle q_1 | U | q_1 \rangle + \langle q_1 | U | q_2 \rangle + \langle q_2 | U | q_1 \rangle + \langle q_2 | U | q_2 \rangle \end{aligned}$$

Mas como $\langle q_1|U|q_1\rangle = \langle q_2|U|q_2\rangle$ e $\langle q_1|U|q_2\rangle = \langle q_2|U|q_1\rangle$, temos:

$$\begin{aligned}
E^+ &= \langle q_1|U|q_1\rangle + \langle q_1|U|q_2\rangle + \langle q_1|U|q_2\rangle + \langle q_1|U|q_1\rangle = 2(\langle q_1|U|q_1\rangle + \langle q_1|U|q_2\rangle) \\
&= 2\left\{ \int \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2) \right] U \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) \right] d^3r_1 d^3r_2 + \right. \\
&\quad \left. + \int \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2) \right] U \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1) \right] d^3r_1 d^3r_2 \right\} \\
&= 2\left\{ \frac{1}{2} \int \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2)U\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)d^3r_1 d^3r_2 + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \int \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2)U\phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1)d^3r_1 d^3r_2 \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E^+ &= \int \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2)U\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)d^3r_1 d^3r_2 + \\
&\quad + \int \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2)U\phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1)d^3r_1 d^3r_2 \quad (\text{A.11})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rightarrow E^- &\equiv \langle U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle^- = \langle q^-|U|q^- \rangle = (\langle q_1| - \langle q_2|)U(|q_1\rangle - |q_2\rangle) \\
&= \langle q_1|U|q_1\rangle - \langle q_1|U|q_2\rangle - \langle q_2|U|q_1\rangle + \langle q_2|U|q_2\rangle
\end{aligned}$$

Mas como $\langle q_1|U|q_1\rangle = \langle q_2|U|q_2\rangle$ e $\langle q_1|U|q_2\rangle = \langle q_2|U|q_1\rangle$, temos:

$$\begin{aligned}
E^- &= \langle q_1|U|q_1\rangle - \langle q_1|U|q_2\rangle - \langle q_1|U|q_2\rangle + \langle q_1|U|q_1\rangle = 2(\langle q_1|U|q_1\rangle - \langle q_1|U|q_2\rangle) \\
&= 2\left\{ \int \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2) \right] U \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) \right] d^3r_1 d^3r_2 + \right. \\
&\quad \left. - \int \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2) \right] U \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1) \right] d^3r_1 d^3r_2 \right\} \\
&= 2\left\{ \frac{1}{2} \int \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2)U\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)d^3r_1 d^3r_2 + \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} \int \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2)U\phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1)d^3r_1 d^3r_2 \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E^- &= \int \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2)U\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)d^3r_1d^3r_2 + \\
&\quad - \int \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2)U\phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1)d^3r_1d^3r_2
\end{aligned} \tag{A.12}$$

Definindo K e J de modo que:

$$\begin{cases} E^+ = K + J \\ E^- = K - J \end{cases}$$

onde:

$$K \equiv \int \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2)U\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2)d^3r_1d^3r_2 \tag{A.13}$$

$$J \equiv \int \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2)U\phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1)d^3r_1d^3r_2 \tag{A.14}$$

tal que K é o termo direto e J é o termo de troca (exchange). K representa a energia Coulombiana média do sistema. Seria o único termo presente se não levassemos em conta o princípio de exclusão de Pauli, ou seja, a condição anti-simétrica das funções de onda. J é um termo extra que aparece devido ao princípio da exclusão de Pauli e é chamado “integral de troca”. Enfim, podemos também escrever

$$2J = E^+ - E^- \tag{A.15}$$

Retornando à equação (A.10), temos:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{4}(E^+ + 3E^-) - (E^+ - E^-)\frac{1}{\hbar^2}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \tag{A.16}$$

Vamos agora provar a veracidade desta expressão. Conforme dito anteriormente, a função de onda total de $|\Psi\rangle$ deve ser anti-simétrica. De modo que, se aplicarmos um estado de spin simétrico, a energia média referente ao espaço deve ser anti-simétrico e vice-versa.

→ Seja $|\psi_A\rangle$ um estado de spin anti-simétrico:

$$\begin{aligned}\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle &= \langle\psi_A|\hat{\mathcal{H}}|\psi_A\rangle = \frac{1}{4}(E^+ + 3E^-) - (E^+ - E^-)\frac{1}{\hbar^2}\langle\psi_A|\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2|\psi_A\rangle \\ &= \frac{1}{4}(E^+ + 3E^-) - (E^+ - E^-)\frac{1}{\hbar^2}\left(-\frac{3}{4}\hbar^2\right)\langle\psi_A|\psi_A\rangle \\ &= \frac{1}{4}(E^+ + 3E^-) + \frac{3}{4}(E^+ - E^-) = E^+ \quad (\text{A.17})\end{aligned}$$

→ Seja $|\psi_S\rangle$ um estado de spin simétrico:

$$\begin{aligned}\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle &= \langle\psi_S|\hat{\mathcal{H}}|\psi_S\rangle = \frac{1}{4}(E^+ + 3E^-) - (E^+ - E^-)\frac{1}{\hbar^2}\langle\psi_S|\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2|\psi_S\rangle \\ &= \frac{1}{4}(E^+ + 3E^-) - (E^+ - E^-)\frac{1}{\hbar^2}\frac{1}{4}\hbar^2\langle\psi_S|\psi_S\rangle \\ &= \frac{1}{4}(E^+ + 3E^-) - \frac{1}{4}(E^+ - E^-) = E^- \quad (\text{A.18})\end{aligned}$$

Comparando (A.15) e (A.16), temos que:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{4}(E^+ + 3E^-) - 2J\frac{1}{\hbar^2}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad (\text{A.19})$$

Redefinindo o zero de energia e estendendo o tratamento para um sistema com N spins, podemos reescrever (A.19) como

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (\text{A.20})$$

onde \vec{S}_α ($\alpha = i, j$) representa os operadores de spins localizados nos sítios do cristal e a soma é realizada sobre os primeiros vizinhos, já que a integral

de troca envolve a superposição de funções de onda que decrescem muito rapidamente para partículas distantes e são apreciáveis somente até os limites dos primeiros vizinhos. O Hamiltoniano (A.20) é conhecido como Modelo de Heisenberg.

Apêndice B

Energia Dipolar

Neste apêndice vamos fazer demonstrar os cálculos que levam à expressão da energia dipolar.

Da lei de Biot-Savart, temos que se $d\vec{l}$ é um elemento de comprimento de um fio que carrega uma corrente I e \vec{x} é o vetor coordenada do elemento de comprimento para um ponto de observação P , então a densidade de fluxo elementar $d\vec{B}$ no ponto P é dado por:

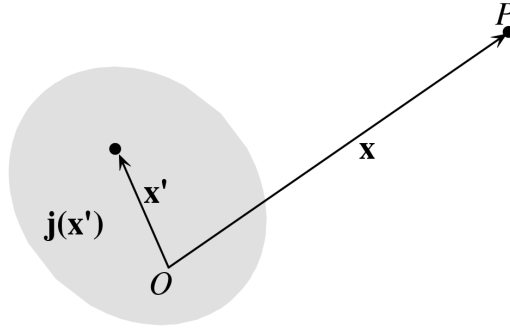
$$d\vec{B} = kI \frac{d\vec{l} \times \vec{x}}{|\vec{x}|^3} \quad (\text{B.1})$$

onde $k = \mu_0/4\pi$ no SI.

Podemos escrever a indução magnética numa forma geral para uma densidade de corrente $\vec{j}(\vec{x})$:

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

onde temos uma indução magnética no ponto P devido ao à região localizada em \vec{x}' .



Como:

$$\frac{\vec{x} - \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3} = -\vec{\nabla} \left(\frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \right) \quad (\text{B.3})$$

temos:

$$\begin{aligned} \vec{B}(\vec{x}) &= \frac{\mu_0}{4\pi} \int \vec{j}(\vec{x}') \times \left[-\vec{\nabla} \left(\frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \right) \right] d^3x' = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \vec{\nabla} \times \vec{j}(\vec{x}') \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d^3x' \\ \vec{B}(\vec{x}) &= \vec{\nabla} \times \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\vec{j}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d^3x' \right) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Do eletromagnetismo clássico, define-se a relação entre indução magnética \vec{B} e o potencial vetor \vec{A} de modo que

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (\text{B.5})$$

Então a expressão para o potencial vetor \vec{A} no espaço é tal que

$$\vec{A}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\vec{j}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d^3x' \quad (\text{B.6})$$

Considerando $|\vec{x}| \gg |\vec{x}'|$, expandimos o denominador em potências de \vec{x}' :

$$\frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} = \frac{1}{|\vec{x}|} + \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{|\vec{x}|^3} + \dots \quad (\text{B.7})$$

$$\vec{A}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \vec{j}(\vec{x}') \left(\frac{1}{|\vec{x}|} + \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{|\vec{x}|^3} + \dots \right) d^3x' \quad (\text{B.8})$$

de modo que uma dada componente A_i do potencial vetor terá a expansão:

$$A_i(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int j_i(\vec{x}') \left(\frac{1}{|\vec{x}|} + \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{|\vec{x}|^3} + \dots \right) d^3x'$$

$$A_i(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{|\vec{x}|} \int j_i(\vec{x}') d^3x' + \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} \cdot \int j_i(\vec{x}') \vec{x}' d^3x' + \dots \quad (\text{B.9})$$

Vamos considerar agora duas funções $f(\vec{x}')$ e $g(\vec{x}')$ bem comportadas. Se \vec{j} for localizada e tiver divergência nula ($\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$), temos:

$$\int g \vec{j} \cdot \vec{\nabla}' f d^3x' = - \int f \vec{\nabla}' \cdot (g \vec{j}) d^3x' = - \int [f \vec{j} \cdot \vec{\nabla}' g + f g (\vec{\nabla}' \cdot \vec{j})] d^3x' = - \int f \vec{j} \cdot \vec{\nabla}' g d^3x'$$

$$\int [f \vec{j} \cdot \vec{\nabla}' g + g \vec{j} \cdot \vec{\nabla}' f] d^3x' = 0 \quad (\text{B.10})$$

• Seja o primeiro termo de B.9. Para $f = 1$ e $g = x'_i$, a equação B.10 ficará:

$$\int [\vec{j} \cdot \vec{\nabla}'(x'_i) + x'_i \vec{j} \cdot \vec{\nabla}'(1)] d^3x' = \int \vec{j} \cdot \vec{\nabla}'(x'_i) d^3x' = 0$$

ou

$$\int j_i(\vec{x}') d^3x' = 0 \quad (\text{B.11})$$

Comparando B.9 com B.11 percebemos que o primeiro termo, referente ao monopolo, está ausente.

• Seja o segundo termo de B.9. Para $f = x'_i$ e $g = x'_j$, a equação B.10 ficará:

$$\int [x'_i \vec{j} \cdot \vec{\nabla}'(x'_j) + x'_j \vec{j} \cdot \vec{\nabla}'(x'_i)] d^3 x' = \int (x'_i j_j + x'_j j_i) d^3 x'$$

ou

$$\int x'_i j_j d^3 x' = - \int x'_j j_i d^3 x' \quad (\text{B.12})$$

A integral no segundo termo de B.9 pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \vec{x} \cdot \int \vec{x}' j_i(\vec{x}') d^3 x' &= \sum_j x_j \int x'_j j_i(\vec{x}') d^3 x' = \frac{1}{2} \sum_j \left[x_j \int x'_j j_i(\vec{x}') d^3 x' + x_j \int x'_j j_i(\vec{x}') d^3 x' \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_j \left[-x_j \int x'_i j_j(\vec{x}') d^3 x' + x_j \int x'_j j_i(\vec{x}') d^3 x' \right] = \frac{1}{2} \sum_j x_j \int [-x'_i j_j(\vec{x}') + x'_j j_i(\vec{x}')] d^3 x' \\ &= -\frac{1}{2} \sum_j x_j \int [x'_i j_j(\vec{x}') - x'_j j_i(\vec{x}')] d^3 x' = -\frac{1}{2} \sum_j x_j \int [\vec{x}' \times \vec{j}]_k d^3 x' \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} x_j \int [\vec{x}' \times \vec{j}]_k d^3 x' = -\frac{1}{2} \vec{x} \times \int [\vec{x}' \times \vec{j}]_i d^3 x' \end{aligned}$$

De modo que:

$$A_i \approx -\frac{\mu_0}{8\pi|\vec{x}|^3} \vec{x} \times \int [\vec{x}' \times \vec{j}]_i d^3 x' \quad (\text{B.13})$$

É costume definir a densidade de momento magnético ou magnetização como

$$\vec{M} = \frac{1}{2} (\vec{x} \times \vec{j}) \quad (\text{B.14})$$

e sua integral de volume como o momento magnético $\vec{\mu}$

$$\vec{\mu} = \int \vec{M}(\vec{x}') d^3 x' = \frac{1}{2} \int \vec{x}' \times \vec{j}(\vec{x}') d^3 x' \quad (\text{B.15})$$

de modo que o potencial vetor do dipolo magnético será

$$\begin{aligned}
 A_i &= \frac{\mu_0}{4\pi|\vec{x}|^3} \vec{x} \cdot \int j_i(\vec{x}') \vec{x}' d^3x' = -\frac{\mu_0}{8\pi|\vec{x}|^3} \left[\vec{x} \times \int (\vec{x}' \times \vec{j}) d^3x' \right]_i \\
 &= -\frac{\mu_0}{4\pi|\vec{x}|^3} [\vec{x} \times \vec{\mu}]_i = \frac{\mu_0}{4\pi} [\vec{x} \times \vec{\mu}]_i \\
 \vec{A} &= \frac{\mu_0}{4\pi} [\vec{x} \times \vec{\mu}] \tag{B.16}
 \end{aligned}$$

Então a indução magnética será:

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{\nabla} \times \left[\left(\frac{\mu_0}{4\pi} \right) \frac{\vec{\mu} \times \vec{x}}{|\vec{x}|^3} \right] \tag{B.17}$$

Usando a identidade vetorial

$$\vec{\nabla} \times (\vec{a} \times \vec{b}) = \vec{a}(\vec{\nabla} \cdot \vec{b}) - \vec{b}(\vec{\nabla} \cdot \vec{a}) + (\vec{b} \cdot \vec{\nabla})\vec{a} - (\vec{a} \cdot \vec{\nabla})\vec{b} \tag{B.18}$$

temos (para μ constante):

$$\begin{aligned}
 \vec{B} &= \vec{\nabla} \times \left[\frac{\mu_0}{4\pi} \left(\vec{\mu} \times \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} \right) \right] = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\vec{\mu} \left(\vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} \right) - \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} (\vec{\nabla} \cdot \vec{\mu}) + \left(\frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} \cdot \vec{\nabla} \right) \vec{\mu} - (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} \right] \\
 &= \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\vec{\mu} \left(\vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} \right) - (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} \right] = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\vec{\mu} \left\{ \vec{\nabla} \cdot \left[-\vec{\nabla} \left(\frac{1}{|\vec{x}|} \right) \right] \right\} - (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} \right] \\
 &= -\frac{\mu_0}{4\pi} \left[\vec{\mu} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{1}{|\vec{x}|} \right) + (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} \right] = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left[\vec{\mu} \vec{\nabla}^2 \left(\frac{1}{|\vec{x}|} \right) + (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} \right] = -\frac{\mu_0}{4\pi} (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3}
 \end{aligned}$$

pois $\vec{\nabla}^2 \left(\frac{1}{|\vec{x}|} \right) = 0$ para $\vec{x} \neq 0$.

$$\vec{B} = -\frac{\mu_0}{4\pi} (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|^3} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left[\left(\frac{1}{|\vec{x}|^3} \right) (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \vec{x} + \vec{x} (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{|\vec{x}|^3} \right) \right] \tag{B.19}$$

$$\bullet (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \vec{x} = \left(\mu_x \frac{\partial}{\partial x} + \mu_y \frac{\partial}{\partial y} + \mu_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \vec{x} = \vec{\mu} \tag{B.20}$$

$$\begin{aligned}
\bullet(\vec{m} \cdot \vec{\nabla}) \left(\frac{1}{|\vec{x}|^3} \right) &= \left(\mu_x \frac{\partial}{\partial x} + \mu_y \frac{\partial}{\partial y} + \mu_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(\frac{1}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} \right) \\
&= -\frac{3x\mu_x}{(x^2 + y^2 + z^2)^{5/2}} - \frac{3y\mu_y}{(x^2 + y^2 + z^2)^{5/2}} - \frac{3z\mu_z}{(x^2 + y^2 + z^2)^{5/2}} \\
&= -\frac{3(x\mu_x + y\mu_y + z\mu_z)}{(x^2 + y^2 + z^2)^{5/2}} = -\frac{3(\vec{\mu} \cdot \vec{x})}{|\vec{x}|^5} \quad (\text{B.21})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\vec{B} &= -\frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\vec{\mu}}{|\vec{x}|^3} - \frac{3(\vec{\mu} \cdot \vec{x})\vec{x}}{|\vec{x}|^5} \right] = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3(\vec{\mu} \cdot \hat{x})\hat{x}}{|\vec{x}|^5} - \frac{\vec{\mu}}{|\vec{x}|^3} \right] = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3(\vec{\mu} \cdot \hat{x})\hat{x}|\vec{x}|^2}{|\vec{x}|^5} - \frac{\vec{\mu}}{|\vec{x}|^3} \right] \\
\vec{B} &= \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3(\vec{\mu} \cdot \hat{x})\hat{x}}{|\vec{x}|^3} - \frac{\vec{\mu}}{|\vec{x}|^3} \right] = \frac{\mu_0}{4\pi|\vec{x}|^3} [3(\vec{\mu} \cdot \hat{x})\hat{x} - \vec{\mu}] \quad (\text{B.22})
\end{aligned}$$

Segundo o eletromagnetismo, a força numa distribuição de corrente localizada num campo magnético externo \vec{B} é $\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$. Se interpretarmos a força como o gradiente negativo uma energia potencial U , temos:

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (\text{B.23})$$

De modo que a energia potencial dipolar é dada por:

$$U = -\vec{\mu}' \cdot \left[\frac{\mu_0}{4\pi|\vec{x}|^3} [3(\vec{\mu} \cdot \hat{x})\hat{x} - \vec{\mu}] \right] = \frac{\mu_0}{4\pi|\vec{x}|^3} [\vec{\mu} \cdot \vec{\mu}' - 3(\vec{\mu} \cdot \hat{x})(\vec{\mu}' \cdot \hat{x})] \quad (\text{B.24})$$

Apêndice C

Cálculo Complementar da Dinâmica de Spin

Neste apêndice faremos uma abordagem mais completa dos cálculos presentes do Capítulo 3. Trouxemos parte das contas para este apêndice com a intenção de facilitar a leitura do capítulo citado.

Mediante às considerações feitas nas equações (3.14), (3.15), (3.16) e (3.17), podemos abrir os termos da equação (3.13) como:

$$\bullet \frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left[n_o \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} + \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \right] = \frac{n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \delta \vec{m}(\vec{r}, t)$$

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} \approx \frac{n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}(\vec{r}, t)}{\partial t} \tag{C.1}$$

$$\bullet \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = \nabla \cdot \left[- \left(\frac{\mu_B P}{e} \right) \vec{j}_e \otimes \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} + \delta \vec{J}(\vec{r}, t) \right]$$

$$= -\left(\frac{\mu_{BP}}{e}\right)(\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} + \nabla \cdot [\delta \vec{J}(\vec{r}, t)] = -\frac{\mu_{BP}}{e}(\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} + \nabla \cdot (-D_o \nabla \delta \vec{m})$$

$$\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = -\frac{\mu_{BP}}{e}(\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} - D_o \nabla^2 \delta \vec{m} \quad (C.2)$$

$$\bullet -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \left[n_o \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} + \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \right] \times \vec{M}(\vec{r}, t)$$

$$-\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) \quad (C.3)$$

$$\bullet \langle \Gamma(\vec{s}) \rangle = \frac{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}} \quad (C.4)$$

Agora substituindo as equações (C.1), (C.2), (C.3) e (C.4) na equação (3.13), temos:

$$\begin{aligned} \frac{n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}(\vec{r}, t)}{\partial t} - \frac{\mu_{BP}}{e}(\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} - D_o \nabla^2 \delta \vec{m} &= -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) - \frac{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}} \\ -D_o \nabla^2 \delta \vec{m} + \frac{1}{\tau_{ex} M_s} \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + \frac{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}} &= -\frac{n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\mu_{BP}}{e}(\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} \end{aligned}$$

Mas, $D_o \nabla^2 \delta \vec{m} \approx 0$:

$$\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + \frac{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}} = -\frac{n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\mu_{BP}}{e}(\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}(\vec{r}, t)}{M_s} \quad (C.5)$$

Definindo $\vec{\varphi}$ como um vetor qualquer, tal que:

$$\vec{\varphi} \equiv \frac{1}{\tau_{ex} M_s} \delta \vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + \frac{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}} \quad (C.6)$$

$$(\tau_{ex}M_s)\vec{\varphi} = (\tau_{ex}M_s)\frac{1}{\tau_{ex}M_s}\delta\vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + (\tau_{ex}M_s)\frac{\delta\vec{m}(\vec{r}, t)}{\tau_{sf}}$$

$$\tau_{ex}M_s\vec{\varphi} = \delta\vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + \left(\frac{\tau_{ex}}{\tau_{sf}}\right)M_s\delta\vec{m}(\vec{r}, t)$$

$$\tau_{ex}M_s\vec{\varphi} = \delta\vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + \xi M_s\delta\vec{m}(\vec{r}, t) \quad (\text{C.7})$$

onde definimos $\xi \equiv \tau_{ex}/\tau_{sf}$. Multiplicando (C.7) por (ξ/M_s) , sendo $M_s = |\vec{M}|$ a magnetização de saturação do sítio, temos:

$$\left(\frac{\xi}{M_s}\right)\tau_{ex}M_s\vec{\varphi} = \left(\frac{\xi}{M_s}\right)\delta\vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + \left(\frac{\xi}{M_s}\right)\xi M_s\delta\vec{m}(\vec{r}, t)$$

$$\xi\tau_{ex}\vec{\varphi} = \frac{\xi}{M_s}\delta\vec{m}(\vec{r}, t) \times \vec{M}(\vec{r}, t) + \xi^2\delta\vec{m}(\vec{r}, t) \quad (\text{C.8})$$

Vamos reservar esta equação. Agora fazendo o produto vetorial $\vec{M} \times$ (C.7), obteremos:

$$\vec{M} \times (M_s\tau_{ex}\vec{\varphi} = \delta\vec{m} \times \vec{M} + \xi M_s\delta\vec{m})$$

$$M_s\tau_{ex}\vec{M} \times \vec{\varphi} = \vec{M} \times \delta\vec{m} \times \vec{M} + \xi M_s\vec{M} \times \delta\vec{m} \quad (\text{C.9})$$

Das propriedades do produto vetorial, $\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c})\vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b})\vec{c}$.

Então:

$$M_s\tau_{ex}\vec{M} \times \vec{\varphi} = (\vec{M} \cdot \vec{M})\delta\vec{m} - (\vec{M} \cdot \delta\vec{m})\vec{M} + \xi M_s\vec{M} \times \delta\vec{m}$$

$$M_s \tau_{ex} \vec{M} \times \vec{\varphi} = (|\vec{M}|^2) \delta \vec{m} - (\vec{M} \cdot \delta \vec{m}) \vec{M} + \xi M_s \vec{M} \times \delta \vec{m}$$

$$M_s \tau_{ex} \vec{M} \times \vec{\varphi} = M_s^2 \delta \vec{m} + \xi M_s \vec{M} \times \delta \vec{m} \quad (\text{C.10})$$

onde $\vec{M} \cdot \delta \vec{m} = 0$ pois $\vec{M} \perp \delta \vec{m}$. Dividindo esta equação por M_s^2 :

$$\frac{1}{M_s^2} (M_s \tau_{ex} \vec{M} \times \vec{\varphi} = M_s^2 \delta \vec{m} + \xi M_s \vec{M} \times \delta \vec{m})$$

$$\frac{\tau_{ex}}{M_s} \vec{M} \times \vec{\varphi} = \delta \vec{m} + \frac{\xi}{M_s} \vec{M} \times \delta \vec{m} \quad (\text{C.11})$$

Somando as equações (3.21) e (3.23), obtemos:

$$\xi \tau_{ex} \vec{\varphi} + \frac{\tau_{ex}}{M_s} \vec{M} \times \vec{\varphi} = \frac{\xi}{M_s} \delta \vec{m} \times \vec{M} + \xi^2 \delta \vec{m} + \delta \vec{m} + \frac{\xi}{M_s} \vec{M} \times \delta \vec{m}$$

$$\frac{\tau_{ex}}{M_s} \vec{M} \times \vec{\varphi} + \xi \tau_{ex} \vec{\varphi} = \frac{\xi}{M_s} \delta \vec{m} \times \vec{M} - \frac{\xi}{M_s} \delta \vec{m} \times \vec{M} + (\xi^2 + 1) \delta \vec{m}$$

$$\tau_{ex} \left(\frac{1}{M_s} \vec{M} \times \vec{\varphi} + \xi \vec{\varphi} \right) = (\xi^2 + 1) \delta \vec{m}$$

$$\delta \vec{m} = \frac{\tau_{ex}}{(\xi^2 + 1)} \left(\frac{1}{M_s} \vec{M} \times \vec{\varphi} + \xi \vec{\varphi} \right) \quad (\text{C.12})$$

Substituindo $\vec{\varphi}$ em (C.6), temos:

$$\delta \vec{m} = \frac{\tau_{ex}}{(\xi^2 + 1)} \left\{ \frac{1}{M_s} \vec{M} \times \left[-\frac{n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\mu_B P}{e} (\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}}{M_s} \right] + \xi \left[-\frac{n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\mu_B P}{e} (\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}}{M_s} \right] \right\}$$

$$\delta\vec{m} = \frac{\tau_{ex}}{(\xi^2 + 1)} \left[-\frac{n_o}{M_s^2} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\mu_B P}{e M_s^2} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M} - \frac{\xi n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\xi \mu_B P}{e} (\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}}{M_s} \right] \quad (\text{C.13})$$

Conforme vimos anteriormente:

$$\begin{aligned} \vec{T} &= \frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{m} \times \vec{M} = -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{M} \times \vec{m} = -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{M} \times \left[n_o \frac{\vec{M}}{M_s} + \delta\vec{m} \right] \\ &= -\frac{n_o}{\tau_{ex} M_s^2} \vec{M} \times \vec{M} - \frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{M} \times \delta\vec{m} \end{aligned}$$

$$\vec{T} = -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{M} \times \delta\vec{m} \quad (\text{C.14})$$

substituindo (C.13) em (C.14), obtemos:

$$\begin{aligned} \vec{T} &= -\frac{1}{\tau_{ex} M_s} \vec{M} \times \left\{ \frac{\tau_{ex}}{(\xi^2 + 1)} \left[-\frac{n_o}{M_s^2} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\mu_B P}{e M_s^2} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. -\frac{\xi n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\xi \mu_B P}{e} (\vec{j}_e \cdot \nabla) \frac{\vec{M}}{M_s} \right] \right\} \\ &= \frac{1}{(\xi^2 + 1)} \left\{ \frac{n_o}{M_s^3} \vec{M} \times \left(\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \right) - \frac{\mu_B P}{e M_s^3} \vec{M} \times \left[\vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\xi n_o}{M_s^2} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{\xi \mu_B P}{e M_s^2} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M} \right\} \quad (\text{C.15}) \end{aligned}$$

Pelas propriedades do produto vetorial, $\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c})\vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b})\vec{c}$, de modo que:

$$\vec{M} \times \left(\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \right) = \vec{M} \left(\vec{M} \cdot \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} \right) - \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} (\vec{M} \cdot \vec{M}) = -\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} |\vec{M}|^2 = -\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} M_s^2$$

Então, a expressão para o torque fica:

$$\begin{aligned} \vec{T} &= \frac{1}{(\xi^2 + 1)} \left\{ -\frac{n_o}{M_s} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\xi n_o}{M_s^2} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{\mu_B P}{e M_s^3} \vec{M} \times \left[\vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M} \right] + \right. \\ &\quad \left. - \frac{\xi \mu_B P}{e M_s^2} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M} \right\} \\ \vec{T} &= -\frac{n_o}{M_s (\xi^2 + 1)} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\xi n_o}{M_s^2 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \\ &\quad + \frac{\mu_B P}{|e| M_s^3 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times \left[\vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M} \right] + \\ &\quad + \frac{\xi \mu_B P}{|e| M_s^2 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M} \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Podemos acrescentar o torque \vec{T} encontrado na equação (3.27) à equação de LLG padrão [24]:

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \vec{T} \quad (\text{C.17})$$

Redefinindo a razão giromagnética e a constante de amortecimento, obtemos [24]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} &= -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\mu_B P}{|e| M_s^3 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times \left[\vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M} \right] + \\ &\quad + \frac{\xi \mu_B P}{|e| M_s^2 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times (\vec{j}_e \cdot \nabla) \vec{M} \end{aligned}$$

Assumindo a direção-x como a direção da corrente aplicada, temos [24]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} &= -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\mu_B P}{|e| M_s^3 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times \left[\vec{M} \times (j_e \hat{e}_x \cdot \nabla) \vec{M} \right] + \\ &\quad + \frac{\xi \mu_B P}{|e| M_s^2 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times (j_e \hat{e}_x \cdot \nabla) \vec{M} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} + \frac{\mu_B P j_e}{|e| M_s^3 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times \left[\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \right] + \\
&\quad + \frac{\xi \mu_B P j_e}{|e| M_s^2 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \quad (C.18)
\end{aligned}$$

Como $\vec{M} \times (\vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x}) = \vec{M} (\vec{M} \cdot \frac{\partial \vec{M}}{\partial x}) - \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} (\vec{M} \cdot \vec{M}) = -\frac{\partial \vec{M}}{\partial x} |\vec{M}|^2 = -\frac{\partial \vec{M}}{\partial x} M_s^2$,

temos:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} &= -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{\mu_B P j_e}{|e| M_s^3 (\xi^2 + 1)} M_s^2 \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \\
&\quad + \frac{\xi \mu_B P j_e}{|e| M_s^2 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \\
&= -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{\mu_B P j_e}{|e| M_s (\xi^2 + 1)} \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \\
&\quad + \frac{\xi \mu_B P j_e}{|e| M_s^2 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \quad (C.19)
\end{aligned}$$

Assumindo a direção-x como a direção da corrente aplicada, temos [24]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} &= -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - \frac{\mu_B P j_e}{|e| M_s (\xi^2 + 1)} \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \\
&\quad + \frac{\xi \mu_B P j_e}{|e| M_s^2 (\xi^2 + 1)} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \quad (C.20)
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t} - v_j \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} + \frac{\beta v_j}{M_s} \vec{M} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \quad (C.21)$$

onde

$$\eta \equiv \frac{\mu_B P}{|e| M_s (\xi^2 + 1)}, \quad \beta \equiv \xi \text{ e } v_j \equiv \eta j_e \quad (C.22)$$

Referências Bibliográficas

- [1] C. BUZEA, I. PACHECO, K. ROBBIE; "Nanomaterials and Nanoparticles: Sources and Toxicity". *Biointerphases* 2 (2007).
- [2] J. H. SILVA; Dissertação de Mestrado: "Estudo via Simulação Computacional do Efeito de Impurezas no Modo Girotrópico em Nanodisco Magnético"; (2011).
- [3] Proceedings of the 43rd Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, Miami, FL; 9-12 November 1998- *J.Appl. Phys.* 85,4277; (1999).
- [4] D. TOSCANO; Dissertação de Mestrado: Estudo Via Simulação Computacional da Formação de Vórtice e do Modo Girotrópico em Nanodiscos Magnéticos (2011).
- [5] B. LENEN, U. NOWAK, G. DUMPICH; Domain wall resistance in $(Co/Pt)_{10}$ -nanowires; *Europhys. Lett.*, 70 (6), p. 803 (2005).
- [6] E. L. M. da PAIXÃO; Dissertação de Mestrado: Filmes Magnéticos Ultrafinos.
- [7] V. A. FERREIRA; Tese de Doutorado: Estudo da Dinâmica da Parede de Domínio Transversal em Nanofios Magnéticos (2013).

- [8] M. KNOBEL; Aplicações do magnetismo. *Ciência Hoje*, Rio de Janeiro, v. 36, n. 215, p. 18-26; (2005).
- [9] S. S. PARKIN, M. HAYASHI, L. THOMAS; Magnetic Domain-Wall Racetrack Memory. *Science*, v. 320, p. 190-194 (2008).
- [10] G. S. D. BEACH, M. TSOI, J. L. ERSKINE; Current-induced domain wall motion; DOI:10.1016/j.jmmm.2007.12.021 (2008).
- [11] R. L. VALVERDE; *Historia del Electromagnetismo* (1999).
- [12] H. M. NUSSENZVEIG; *Curso de Física Básica, Vol.3*; Editora Edgard Blücher LTDA (1997).
- [13] J. D. JACKSON; *Classical Elettrodynamics*; Editora John Wiley & Sons, Inc. (1925).
- [14] J. F. KEITHLEY; *The Story of Electrical and Magnetic Measurements: From 500 BC to the 1940s* (1999).
- [15] D. HALLIDAY, R. RESNICK, J. WALKER; *Fundamentos de Física*; Editora LTC (2009).
- [16] R. FITZPATRICK; *Ampère's Circuital Law* (2007).
- [17] M. FARADAY, by L. Pearce Williams; p. 191-5.
- [18] E. BELLONE; *A World on Paper: Studies on the Second Scientific Revolution* (1980).
- [19] K. BUSCHOW, F. BOER; *Physics of Magnetism and Magnetic Materials*. [S.l.]: Kluwer Academic Publishers, (2003).

- [20] D. JILES; Introduction to Magnetism and Magnetic Materials; Editora Chapman & Hall (1991).
- [21] T. L. GILBERT; A Phenomenological Theory of Damping in Ferromagnetic Materials; DOI: 10.1109/TMAG.2004.836740 (2004).
- [22] M. d'AQUINO; Tese de Doutorado: Nonlinear Magnetization Dynamics in Thin-films and Nanoparticles (2004).
- [23] C. C. TANNOUDJI, B. DIU, F. LALOË; Quantum Mechanics, vol. 1 (2005)
- [24] S. ZHANG, Z. LI; Roles of Nonequilibrium Conduction Electrons on the Magnetization Dynamics of Ferromagnets; PhysRevLett.93.127204 (2004).
- [25] Y. JANG, M. D. MASCARO, G. S. D. BEACH, C. A. ROSS; Current-driven domain wall motion in heterostructured ferromagnetic nanowires; Appl. Phys. Lett. 100, 112401 (2012).
- [26] M. VÁZQUEZ; Advanced Magnetic Nanowires. In: KRONMULLER, H.; PARKIN, S. (Ed.). Magnetism and Advanced Magnetic Materials. Chichester: Wiley, 2007. v. 4, p. 2193-2226.
- [27] S. E. BARNES, S. MAEKAWA; Current-Spin Coupling for Ferromagnetic Domain Walls in Fine Wires; Phys. Rev. Lett. 95, 107204 (2005).
- [28] D. G. PORTER, M. J. DONAHUE; Velocity of transverse domain wall motion along thin, narrow strips; J. Appl. Phys. 95, 6729 (2004).
- [29] C. ZENER; Interaction Between the d Shells in the Transition Metals; Phys. Rev. 81, 440 (1951).

- [30] A. M. NETO; Tese de Doutorado: A Influência da Diluição Magnética na Competição Entre Efeito Kondo e Interação RKKY em Sistema Kondo Concentrados (1998).
- [31] N. SCHRYER, L. R. WALKER; The motion of 180° domain walls in uniform dc magnetic fields; J. Appl. Phys., v. 45, p. 5409 (1974).
- [32] A. KUNZ; Simulated domain wall dynamics in magnetic nanowires; J. Appl. Phys., v.99, p. 08G107 (2006).
- [33] S. SALINAS; Introducao a Física Estatística. [S.l.]: EDUSP, 1999.
- [34] D. J. GRIFFITHS; Introduction to Electrodynamics, Third Edition; Editora Prentice Hall (1999).
- [35] C. J. G. CERVERA, WEINAN E; Improved Gauss–Seidel Projection Method for Micromagnetics Simulations (2003).
- [36] C. J. G. CERVERA; Numerical Micromagnetics: A Review (2007).