

George Frederick Tavares da Silva

*Método de Monte Carlo no Estudo de Sistemas
Magnéticos Bidimensionais*

Fortaleza – CE

Junho / 2008

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

George Frederick Tavares da Silva

*Método de Monte Carlo no Estudo de Sistemas
Magnéticos Bidimensionais*

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Raimundo Nogueira Costa Filho

MESTRADO EM FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CENTRO DE CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Fortaleza – CE

Junho/ 2008

Dissertação de Mestrado sob o título *Método de Monte Carlo no Estudo de Sistemas Magnéticos Bidimensionais*, defendida por George Frederick Tavares da Silva e aprovada em 20 de Junho de 2008, em Fortaleza, Ceará, pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Raimundo Nogueira Costa Filho
Departamento de Física - Universidade Federal do
Ceará
Orientador

Prof. Dr. Wandemberg Paiva Ferreira
Departamento de Física - Universidade Federal do
Ceará

Prof. Dr. Francisco Welington de Sousa Lima
Departamento de Física - Universidade do Estado do
Piauí

Dedicatória

*Para meu pai,
José Jorge da Silva,
Para minha mãe,
Maria Neida Tavares da Silva,
Para minha avó, meus dois irmãos,
e todos os meus amigos que sempre me apoiaram nessa jornada.*

Agradecimentos

- Primeiramente e acima de tudo, à minha família, que amo muito e me apoiou mesmo diante de todas as dificuldades enfrentadas.

- Ao Professor Doutor Raimundo Nogueira Costa Filho pela orientação, apoio e dedicação desde a graduação.

- Ao Professor João Milton Pereira e Luis Eduardo Araripe pela contribuição no desenvolvimento deste trabalho.

- Em especial à minha querida e amada esposa Mara Carneiro, pelo apoio e companheirismo inclusive nas noitadas.

- Ao meu grande amigo Sérgio Gomes, companheiro nas noites de trabalho no Campus do Pici.

- Aos meus amigos Alexandre Paschoal, José Júnior, Pablo Abreu, Leandro Andrade, Antônio Neves, Antônio Márcio, Saulo Davi, Roner Ferreira, Erneson Alves, Eduardo Girão, Acrísio, Abraão Cefas, Hudson, Janduy, Eveline, Éder, Daniela, Apiano, Roberto, e Tayroni.

- Ao Departamento de Física e à Pós-Graduação da UFC e ao CNPq pelo financiamento.

Resumo

Empregando o Método de Monte Carlo [1], estudou-se sistemas magnéticos bidimensionais. A transição de fase que ocorre no modelo de Ising, foi também investigada para o modelo XY bidimensional, ou geralmente chamado na literatura de 2D XY [2–5]. Observa-se neste modelo uma transição não-usual do tipo Kosterlitz-Thouless-Berezinskii, envolvendo vórtices de spins que se descorrelacionam em uma temperatura T_{KT} [6]. Contudo, pode-se observar a transição sem a presença de vórtices para sistemas pequenos como foi feito neste trabalho. A implementação do método nos dois modelos citados, será detalhada e posteriormente utilizada no estudo de sistemas com bicamadas magnéticas caracterizada pela existência de ordenamento ferromagnético (FM) e antiferromagnético (AFM). Serão então reproduzidas através das simulações, curvas de magnetização em relação ao campo magnético, com o objetivo de encontrar as condições nas quais o fenômeno conhecido como *exchange bias* [7] ocorre. Este deve-se a existência de uma interface FM-AFM [8], que será o foco nas investigações.

Abstract

Employing the Monte Carlo Method [1], studied is two-dimensional magnetic systems. The phase transition that occurs in Ising model was also investigated for the two-dimensional XY model, or also called 2D XY in the literature [2–5]. There is this model an unusual transition type Kosterlitz-Thouless-Berezinskii, involving vortices of spins which unbinding in a temperature T_{KT} [6]. However, you can see the transition without the presence of vortices for small systems as was done in this work. The implementation of the method cited in the two models will be detailed and then used in the study of magnetic bylayers systems characterized by the existence of planning ferromagnetic (FM) and antiferromagnético (AFM). They will be then reproduced through simulations, curves of magnetization in relation to the magnetic field, with the goal of find the conditions in which the phenomenon known as Exchange Bias [7] occurs. This is because the existence of an interface FM-AFM [8], which will be the focus of research.

Sumário

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

1	Introdução	p. 14
2	Magnetismo e Materiais Magnéticos	p. 17
2.1	Introdução	p. 17
2.2	As Grandezas B , H e M	p. 19
2.3	Diamagnetismo e Paramagnetismo	p. 22
2.4	Ferromagnetismo	p. 24
2.4.1	A Teoria Clássica do Campo Molecular	p. 25
2.4.2	A Interação de Troca	p. 26
2.4.3	Anisotropia Cristalina	p. 29
2.5	A Magnetização de Materiais Ferromagnéticos	p. 30
2.5.1	Domínios Magnéticos	p. 31
2.5.2	Tipos de Ferromagnetos	p. 34
2.6	Antiferromagnetismo	p. 35
2.7	Interface FM-AFM	p. 37
3	O Método de Monte Carlo e Aplicações	p. 40
3.1	Introdução	p. 40
3.2	Números Aleatórios	p. 42

3.3	Princípios da Mecânica Estatística	p. 43
3.4	O Algoritmo de Metrópolis	p. 51
4	Resultados e Discussões	p. 53
4.1	Introdução	p. 53
4.2	Modelo de Ising	p. 53
4.3	Modelo 2DXY	p. 59
4.4	Bicamadas FM/AFM	p. 71
5	Conclusões e Perspectivas	p. 83
	Referências	p. 85

Lista de Figuras

- 1 O telégrafo original de Valdemar Poulsen patentado e construído em 1898. p. 18
- 2 Exemplos de sistemas ferromagnéticos bidimensionais contendo domínios. p. 20
- 3 Susceptibilidade como função da temperatura para um sistema paramagnético (primeiro gráfico), em seguida para um ferromagnético em temperaturas acima de T_c e, por fim, para um antiferromagnético acima de sua temperatura crítica, chamada de Temperatura de Néel, T_N [9]. . . p. 25
- 4 Magnetização de saturação do níquel como função da temperatura, e curva teórica para $S=1/2$ na teoria do campo médio. Valores experimentais de P. Weiss e R. Forrer [9]. p. 26
- 5 Esquema da variação da integral de troca J_e como função da distância interatômica r_{ab} [10]. p. 28
- 6 Magnetização vs. campo para o ferro (a) e nickel (b) em três direções diferentes, [100] correspondendo à direção da aresta de um cristal cúbico, [110] correspondendo à diagonal da face de um cubo e [111] à diagonal do mesmo [9]. p. 29
- 7 Estrutura dos domínios ferromagnéticos de uma placa de níquel [9]. . . p. 30
- 8 Formação de domínios em materiais ferromagnéticos, considerando a energia magnética. p. 31
- 9 Esquema de um possível processo de magnetização de um ferromagneto. p. 33
- 10 Gráfico da função $F_T(X) = X^4 - 2aX^2$, representando a energia livre de Helmholtz. A função foi utilizada apenas para compreender a metaestabilidade de um sistema e usamos $a = 1.2$ p. 34
- 11 Sequências da forma da função 2.21 para vários valores de H p. 35
- 12 Duas espécies de arranjo antiferromagnético dos momentos atômicos em uma rede cúbica de corpo centrado. p. 36

13	a) Histerese de partículas de cobalto revertido de óxido de cobalto a temperatura de 77K. A curva tracejada é a histerese do mesmo material resfriado na ausência de campo. b) Arranjo dos momentos magnéticos atômicos de uma bicamada ferromagneto/antiferromagneto depois de resfriada na presença de um campo magnético.	p. 38
14	a) Curva de torque e b) energia de rotação de partículas de cobalto revestida de seu óxido a uma temperatura de 77K, resfriado em um campo magnético de 300K.	p. 39
15	Gráfico da função $f(x) = \sin^2(\frac{1}{x})$ para $-2.0 < x < 2.0$	p. 41
16	Cinco sucessivos processos de Markov, formando uma Cadeia de Markov de estados. Temos um sistema com apenas quatro estados e inicialmente ele se encontra no estado $\mu = 3$, e a partir deste escolhemos aleatoriamente um novo estado ν seguindo as condições do processo de Markov.	p. 50
17	Configurações sucessivas de spins de uma rede quadrada 100 X 100 no modelo de Ising com condições periódicas de contorno para 0, 1, 2, 4, 8, 16, 32 e 64 passos de Monte Carlo em somente uma realização. A constante de troca $J = 1$ e temos um exemplo de relaxamento com $k_B T = 3.0$ onde inicializamos com todos os spins para cima. Os pontos brancos representa os spins com $\sigma_i = -1$ e os pretos $\sigma_i = +1$	p. 54
18	Energia (à esquerda) e magnetização (à direita) por spin no modelo de Ising 2D, com $L = 100$ e $J = 1$. Cada uma das curvas representa uma simulação com semente diferente uma da outra. A simulação iniciou com uma configuração em altas temperaturas e relaxou para até o equilíbrio, com $T = 1.0J/k_B$, depois de aproximadamente 1500 passos de Monte Carlo.	p. 55
19	Energia (em preto) e magnetização (em vermelho) por spin no modelo de Ising 2D, com $L = 100$ e $J = 1$. Nesse caso temos uma temperatura de $2.0J/k_B$ e o sistema alcança o equilíbrio depois de aproximadamente 5000 passos.	p. 56
20	Configuração de spins em estado de domínio. A figura a direita representa uma configuração de equilíbrio enquanto que a outra b) se encontra em um estado mais energético que a primeira, e portanto, não representaria uma configuração de equilíbrio em uma temperatura suficientemente baixa.	p. 57

21	Configuração de spins em estado de domínio com vórtices no Modelo 2DXY.	p. 58
22	Magnetização e energia por spin, e o calor específico como funções da temperatura, a) para uma rede quadrada de spins 8 X 8 e b) 100 X 100, respectivamente, no Modelo de Ising.	p. 60
23	Energia e magnetização por spin para quatro sementes distintas e duas inicializações. Temos um sistema ferromagnético isotrópico em campo nulo. As curvas pretas inicializaram com uma configuração em que os spins têm direções aleatórias e as vermelhas com spins todos alinhados em uma mesma direção. Em a) temos uma temperatura $T = 0.2J/k_B$ e em b) a temperatura é $T = 0.8J/k_B$	p. 62
24	Energia e magnetização por spin para quatro sementes distintas e duas inicializações. Temos um sistema ferromagnético isotrópico em campo $H = 0.2J$. As curvas pretas inicializaram com uma configuração em que os spins têm direções aleatórias e as vermelhas com spins todos alinhados em uma mesma direção. Em a) temos uma temperatura $T = 0.2J/k_B$ e em b) a temperatura é $T = 0.8J/k_B$	p. 64
25	Magnetização e calor específico como função da temperatura para diversos tamanhos de rede.	p. 66
26	a) Efeito do aumento da anisotropia na histerese magnética. b) Coercividade extraída do resultado da figura a).	p. 69
27	Histerese para diversos valores de temperatura abaixo da temperatura crítica. Temos que $D = 0.05J$ e $k_B T = 0.1J$ em uma rede quadrada 32 X 32 ferromagnética.	p. 70
28	Coercividade como função do tamanho da rede e passos de Monte Carlo.	p. 72
29	Representação de uma bicamada FM/AFM com uma interface compensada. Os marcas em vermelho está representando a frustração na interface.	p. 74
30	Dependência do campo de exchange bias (círculos fechados em "a)" e os quadrados em "b)") e coercivo (círculos abertos em "a)" e triângulos em "b)") com a grossura do meio a) FM e b) AFM para o composto $Fe_{80}Ni_{20}/FeMn$	p. 75

31	Magnetização e energia por spin versos o campo magnético externo. A interação de troca na interface aqui é dada por $J_{I1} = J_{I2} = J_F$	p. 77
32	Magnetização e energia por spin versos o campo magnético externo. Já neste caso, temos $J_{I1} = -J_{I2} = J_F$	p. 79
33	Magnetização versos campo magnético externo para dois casos. O primeiro para $L_{AF} = 4$ e $L_F = 12$ e o segundo para $L_{AF} = 10$ e $L_F = 6$. Os gráficos são resultados para as duas situações de exchange bias.	p. 80
34	Curva de magnetização contra campo magnético para três valores de anisotropia no meio FM. Em a) temos o exchange bias negativo e em b) o exchange bias positivo. Ambas foram obtidas da mesma simulação descrita no texto para duas sementes distintas.	p. 82

Lista de Tabelas

- 1 Tabela de estados de configurações possíveis para o lançamento de três moedas. p. 44

1 *Introdução*

Nesse trabalho, será apresentado as principais características de materiais ferromagnéticos (FM), antiferromagnéticos (AFM) e que possuem uma interface FM-AFM. As transições de fase de ferromagnetos bidimensionais em dois modelos magnéticos e ainda os processos de magnetização para alguns casos será mostrado. Para a obtenção dessas propriedades precisa-se, essencialmente, da compreensão do comportamento microscópico dos momentos magnéticos desses materiais, bem como dos diversos tipos de interações envolvidas. Mais precisamente, também deve-se entender as origens dos momentos magnéticos atômicos, os quais são resultados da soma dos momentos de dipolo magnético orbital e intrínseco dos elétrons (o spin). Entretanto, pretende-se mostrar, de forma breve e geral, a origem clássica dos spins e de suas possíveis interações com o meio.

Para se estudar materiais magnéticos classicamente, faz-se aproximações, modelando-os como um conjunto de momentos magnéticos sob vários tipos de interações. Ising, em 1925, foi o primeiro a propor um modelo para um material magnético [11]. Sua proposta consiste em uma cadeia linear de momentos magnéticos $\sigma_i = \pm 1$, localizados em uma rede, os quais interagem com seus vizinhos mais próximos σ_{i+1} e σ_{i-1} . A interação é descrita pelo valor da energia $E = -J \sum_i \sigma_i (\sigma_{i+1} + \sigma_{i-1})$, onde J é uma constante que determina o tipo de ordenamento, o qual compete com a desordem imposta pela temperatura. Anos mais tarde, depois que a Mecânica Quântica foi formulada em 1927, Heisenberg propôs um modelo semelhante, onde os momentos σ_i são substituídos por operadores de spins \mathbf{S}_i [12]. Classicamente, estes operadores podem ser vistos como vetores no espaço tridimensional representando o momento de dipolo magnético intrínseco atômico ou molecular. Outro modelo consiste em considerar o spin com somente duas componentes, o chamado modelo XY [1]. Cada um desses três modelos citados, dentre outros [1], podem ser utilizados em uma, duas ou três dimensões, apesar de algumas componentes de spin não existirem em alguns modelos. Estes e outros modelos surgiram no intuito de se obter as propriedades magnéticas e termodinâmicas de sistemas de ordenamento ferromagnético, antiferromagnético e ferrimagnético.

Atualmente a maioria das propriedades de materiais FM e AFM são bem conhecidas. Porém, ainda há muito a ser estudado quando se trata de acoplamentos entre estes. Desde 1956, quando W. H. Meiklejohn e C. Bean descobriram alguns efeitos interessantes em materiais com interfaces FM-AFM, estes são bastante estudados [8, 13, 14]. Eles apresentaram um material com novo tipo de anisotropia magnética, denominado de **anisotropia de troca** e que hoje também é chamado de *exchange bias*. Este fenômeno é caracterizado pelo deslocamento da curva de histerese [8, 13, 14], e acompanhado por uma elevação na coercividade do material [15–18]. Bicamadas magnéticas FM-AFM que possuem estes e outros efeitos semelhantes podem também ser utilizadas para produzir resistência elétrica, efeito conhecido como magnetoresistência [7, 19], importante na produção de válvulas de spin [7]. Vários modelos foram desenvolvidos para entender todos esses efeitos [13, 15, 16, 20–26], mas existem muitos casos a serem resolvidos e explorados [7, 19], e também alguns que não concordam completamente com os resultados experimentais.

Todos esses fenômenos relacionados com bicamadas magnéticas, principalmente as que envolvem interfaces FM-AFM, têm despertado o interesse de muitos pesquisadores teóricos e experimentais [7, 8, 13–23, 25–36]. Isso se deve ao grande potencial destes materiais na aplicação em cabeças de leitura e escrita de discos rígidos, e em memórias magnéticas não-voláteis com maior capacidade de armazenar informações, as MRAM [7, 19]. Hoje é possível fabricar essas estruturas magnéticas artificialmente, o que tem dado origem a um inovador ramo da tecnologia, a eletrônica de spin, também chamada de “spintrônica”.

Uma das ferramentas bastante utilizada no estudo dos fenômenos relacionados com essas bicamadas magnéticas FM-AFM é o Método de Monte Carlo (MMC) [21, 27, 28, 35]. Ele é uma técnica numérica que se utiliza de eventos ou números aleatórios para resolver problemas físicos, matemáticos e estatísticos. Historicamente, o método é mais antigo que o próprio computador, mas a utilização do seu nome e um desenvolvimento sistemático só foi apresentado em 1929 por Nicolas Metropolis [1]. Contudo, a primeira aplicação real do método para responder problemas físicos foi feita por Enrico Fermi [1], quando a técnica ainda era chamada de *statistical samplings*, que em português pode ser traduzido como amostras estatísticas. Ainda hoje a técnica é bastante utilizada e se tornou uma ferramenta essencial no estudo de sistemas magnéticos.

Hoje existem computadores com poder de processamento muito maior que há décadas atrás, o que deu um enorme destaque ao MMC, pois ele se tornou cada vez mais preciso e abrangente. Isso se deve principalmente à criação de novos algoritmos. O trabalho de Metropolis e seus colaboradores publicado em 1953 [1] descreveu pela primeira vez o tão

conhecido **Algoritmo de Metropolis**, que é um marco histórico no desenvolvimento de novas técnicas para o MMC. Desde a sua publicação até a atualidade ele vem sendo intensivamente utilizado, principalmente na solução de problemas físicos e, mais especificamente em problemas que envolvem mecânica estatística, como é o caso do magnetismo a nível microscópico.

Uma das maiores motivações em se aplicar o MMC é que ele pode ser utilizado em problemas que são de difícil solução analítica. Um outro estímulo para utilização do MMC é que nas simulações computacionais pode-se alterar os parâmetros físicos de forma arbitrária, coisa que dificilmente se consegue em experimentos. Além disso, a técnica tem servido para melhor compreender a natureza estatística das propriedades macroscópicas de qualquer sistema físico com um número grande de estados acessíveis. Esse assunto é fundamental em duas grandes áreas da Física, a Mecânica Estatística e a Termodinâmica. Entretanto, o MMC também possui um grande destaque em Matemática, Estatística, Economia e em muitas outras áreas da Física. Será mostrado, portanto, no decorrer desse trabalho, os passos detalhados para se aplicar o Método de Monte Carlo, com foco no estudo de materiais ferromagnéticos bidimensionais nos modelos de Ising e 2D XY e sistemas com interface magnética FM-AFM.

Esse trabalho está ordenado da seguinte forma. No capítulo seguinte, Capítulo 2, será apresentado a teoria geral do magnetismo focando na origem macroscópica e microscópica do ferromagnetismo e antiferromagnetismo. O processo de magnetização de ferromagnetos será visto e, por fim, os detalhes a respeito de sistemas de bicamadas magnéticas FM-AFM em duas dimensões. Em seguida, no Capítulo 3, será introduzida a metodologia, intitulada de Método de Monte Carlo, mostrando exemplos didáticos e simples para formar a base da técnica. Os conceitos gerais da Mecânica Estatística com suas definições de espaço de fase, coordenadas generalizadas, função de fase, e outras também serão brevemente citados. Finalmente, o Algoritmo de Metrópolis será descrito com exemplos de aplicação no modelo de Ising e 2D XY.

Os resultados serão apresentados no Capítulo 4, onde mostra-se, da forma mais detalhada possível, o desenvolvimento das simulações de Monte Carlo, bem como os cuidados necessários para se obter resultados coerentes, tanto para o modelo de Ising quanto para o modelo 2D XY. Será discutido também alguns resultados obtidos em sistemas com interface magnética FM-AFM, com a apresentação de algumas perspectivas e propostas de pesquisa para investigar esse assunto tão importante.

2 Magnetismo e Materiais Magnéticos

2.1 Introdução

A magnetita, minério encontrado na natureza de composição química Fe_2O_4 , foi quem deu origem aos estudos que culminaram na teoria do Magnetismo que se conhece hoje. O minério tem uma propriedade de atrair fragmentos de ferro e era encontrado na Magnésia, uma cidade na região da Turquia Antiga [37]. Essa característica tão interessante estimulou o homem à compreender as propriedades do interior da matéria e a utilizá-la em benefício próprio.

Historicamente, existem algumas evidências de aplicações e experiências com a força magnética na antiguidade. Os chineses, por exemplo, inventaram a bússola bem antes de 2000 a.C. [10, 38]. Escritos de Thales de Mileto, na Grécia, também mostravam que ele acreditava no poder da magnetita por volta de 600 a.C. [10]. Séculos mais tarde, em 1269, Petrus Peregrines descobre os pólos magnéticos, denominando-os de pólo norte e sul. William Gilbert de Colchester (1544-1603) é o primeiro a afirmar que a terra possui campo magnético próprio e Coulomb(1736-1806) realiza experimentos com sua balança de torção para medir as forças magnéticas [10].

Já no século XIX, as descobertas nessa área foram bem mais marcantes. Em 1820, Oersted e Ampère descobrem como gerar forças magnéticas a partir de correntes elétricas e 20 anos mais tarde, Faraday e Henry descobrem a indução eletromagnética. Ambas descobertas possibilitaram a criação de motores e geradores elétricos, os quais fazem parte da nossa vida nos eletrodomésticos, eletroeletrônicos, automóveis e etc. Elas também possibilitaram a criação de grandes usinas hidrelétricas e têm um papel fundamental em telecomunicações. Esses descobrimentos foram verdadeiras revoluções para o desenvolvimento tecnológico.

A gravação magnética também marcou o desenvolvimento tecnológico no final do

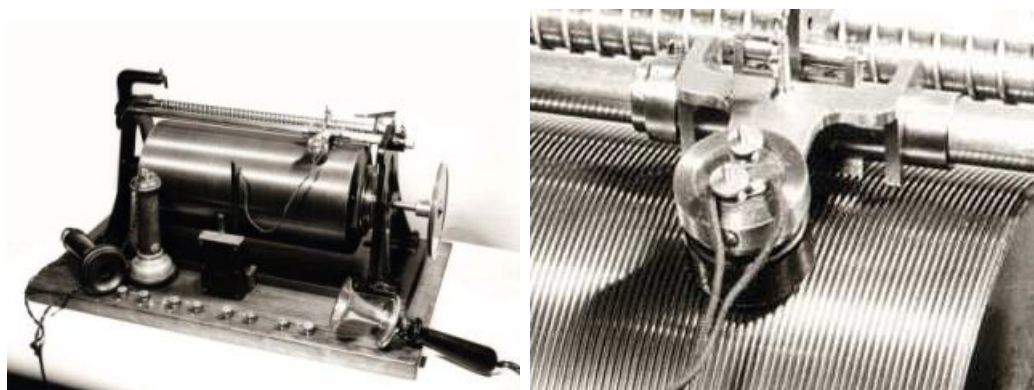


Figura 1: O telégrafo original de Valdemar Poulsen patentado e construído em 1898.

século XIX. Oberlin Smith foi o primeiro a sugerir o desenvolvimento de um gravador magnético de som, o qual foi posto em prática pouco tempo depois pelo dinamarquês Valdemar Poulsen [38], veja Figura 1. Desde então pesquisas foram feitas para se produzir materiais com maior capacidade de gravação. O **ciclo de histerese**, portanto, foi a característica principal de observação que possibilitou a classificação de materiais ferromagnéticos quanto à sua capacidade de armazenar informações. Esse termo foi usado por James Erwin em seu livro publicado em 1891 nos EUA [38].

Pode-se também classificar os ferromagnetos de acordo com a sua **susceptibilidade** magnética relativa, definida como a resposta da magnetização com respeito à variação do campo magnético. Eles podem ser **diamagnéticos**, **paramagnéticos**, **antiferromagnéticos**, **ferrimagnéticos** e **ferromagnéticos**. Esse tipo de classificação teve uma grande contribuição de Pierre Curie no final do século XIX, quando determinou curvas de magnetização para diferentes materiais magnéticos, e também de pesquisadores teóricos como Paul Langevin e Pierre Weiss, os quais explicaram o diamagnetismo e o ferromagnetismo, respectivamente. Curie determinou a temperatura acima da qual um ferromagneto muda de fase, quando o material não apresenta uma magnetização espontânea característica de materiais ferromagnéticos. Acima dessa temperatura, a **Temperatura Crítica de Curie**, o sistema passa para a fase paramagnética. Weiss elaborou uma teoria para explicar a origem microscópica do ferromagnetismo, a qual dizia que existe uma forte interação entre os momentos magnéticos atômicos, que resultava em um **campo molecular** ou campo de Weiss proporcional à magnetização [10]. Contudo, essa teoria não previa a existência de ferromagnetos que não apresentavam espontaneamente uma magnetização. A explicação para isso é que alguns materiais ferromagnéticos possuíam pequenas regiões magnetizadas em direções variadas dentro do material. Isso produzia uma magnetização total menor do que a prevista por Weiss. Cada região dessa foi chamada pelo próprio de

Domínio Magnético e sua compreensão é de suma importância para o objetivo desse trabalho e será visto na Seção 2.5. A Figura 2 mostra exemplos de um material com domínios magnéticos. Veja que, entre um domínio e outro, as chamadas **paredes de domínios**, existe uma mudança gradual na direção dos momentos magnéticos, que aumentam a energia de troca interatômica entre os mesmos. Isso pode ocorrer quando um outro tipo de interação está presente na amostra ou ainda quando o sistema se encontra em um estado de **metaestabilidade**, como será visto mais adiante.

Depois desse breve contexto histórico com uma introdução básica de alguns conceitos, uma revisão geral a respeito das propriedades magnéticas da matéria em uma visão macroscópica e microscópica será feita nas próximas seções. Em seguida, será apresentado cada uma das fases magnéticas e seus respectivos processos de magnetização, dando ênfase às duas fases mais importantes para este trabalho, o ferromagnetismo e o antiferromagnetismo. Por fim, será exposta a teoria do **Exchange Bias**, como e em quais circunstâncias foi descoberto, e como se pode estudá-la.

2.2 As Grandezas \mathbf{B} , \mathbf{H} e \mathbf{M}

O campo magnético \mathbf{H} , pode ser extraído por analogia à lei de Coulomb. Podemos, portanto, definir a força magnética \mathbf{F} entre dois monopólos magnéticos m_1 e m_2 como

$$\mathbf{F} = k \frac{m_1 m_2}{r^2} \hat{\mathbf{r}}, \quad (2.1)$$

onde r é a distância entre eles, $\hat{\mathbf{r}}$ é o versor na direção radial e k é uma constante de proporcionalidade. Apesar de não encontrarmos monopólos magnéticos na natureza, podemos interpretar a Equação 2.1 como a força que um monopólo sente na presença de um campo magnético \mathbf{H} gerado pelo outro. Dessa forma, podemos reescrever a equação da seguinte forma

$$\mathbf{F} = m_1 \mathbf{H}, \quad (2.2)$$

onde m_1 seria o monopólo de prova, em analogia à Teoria Eletrostática.

Como os momentos magnéticos existem na natureza, é comum representá-los pelo vetor momento magnético $\mu_i = m\mathbf{l}$, onde \mathbf{l} é o vetor que vai de um monopólo negativo a outro positivo de intensidade m . Por outro lado, segundo a Mecânica Quântica, o momento magnético μ_i atômico é proporcional ao spin do elétron. No início da década de 20, O. Stern e W. Gerlach conseguiram mostrar através de seus experimentos que o elétron possui um momento magnético intrínseco com apenas dois valores de intensidade, $\pm\hbar/2$, e que



Figura 2: Exemplos de sistemas ferromagnéticos bidimensionais contendo domínios.

são múltiplos de alguma unidade fundamental de momento angular [12]. Hoje, sabemos que esta unidade é exatamente o *Magneton de Bohr*, $\mu_B = e\hbar/2m_e c = 9.274.10^{24} J/T$, que pode ser extraída do caso de um elétron em um átomo de hidrogênio.

Assim, de forma bem resumida, a magnetização \mathbf{M} , presente em certos materiais, origina-se essencialmente do momento de **dipolo magnético**, μ , proporcional ao momento angular total \mathbf{J} de cada átomo ou molécula. Sendo \mathbf{J} é resultado da soma dos momentos angular orbital \mathbf{L} e intrínseco \mathbf{S} dos elétrons. A natureza destes tem uma explicação bem desenvolvida e comprovada pela **Mecânica Quântica**. A equação, portanto, que relaciona o vetor momento magnético μ com o momento angular total \mathbf{J} é

$$\mu = -g\mu_B\mathbf{J}, \quad (2.3)$$

onde g é o fator de Landé (Ver ref. [9]). Para o spin do elétron $g = 2.0023$, embora geralmente utiliza-se $g = 2.0$.

Pode-se representar, do ponto de vista macroscópico, o estado magnético dos materiais pelo vetor magnetização \mathbf{M} , dado por

$$\mathbf{M} = \frac{1}{V} \sum_i \mu_i, \quad (2.4)$$

onde μ_i é o momento de dipolo magnético total do i -ésimo átomo ou molécula dentro de uma rede cristalina de volume V . Para que \mathbf{M} represente uma grandeza magnética local dentro da amostra e ao mesmo tempo uma média estatisticamente relevante, V deve ser grande o suficiente para conter um número elevado de momentos e muito pequeno em relação ao tamanho da amostra.

A grandeza \mathbf{M} pode variar com respeito à várias outras, como a temperatura T ou campo magnético \mathbf{H} , as qual o material possa estar submetido. A forma do comportamento com respeito ao campo por exemplo, tem origem nos diversos tipos de interações entre os momentos magnéticos μ_i . A estrutura da rede cristalina e os defeitos nela existente também contribuem com a resposta da magnetização com a variação do campo. Se o meio possuir um comportamento linear, teremos

$$\mathbf{M} = \chi\mathbf{H}, \quad (2.5)$$

onde χ é a **susceptibilidade magnética**, que é uma quantidade escalar se o meio for isotrópico e homogêneo, caso contrário ela será um tensor não-diagonal.

Um meio magnetizado produz um campo magnético em sua volta. Portanto, é con-

veniente introduzirmos o vetor indução magnética \mathbf{B} , o qual depende tanto do campo magnético \mathbf{H} (geralmente gerado por uma corrente de condução) quanto da magnetização do meio. Assim, podemos definí-lo como

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}), \quad (2.6)$$

onde μ_0 é a **permeabilidade magnética** no vácuo. Se o meio for isotrópico e homogêneo, podemos utilizar as Equação 2.5 e 2.6 e obter

$$\mathbf{B} = \mu_0(1 + \chi)\mathbf{H} = \mu\mathbf{H}, \quad (2.7)$$

onde μ agora representa a permeabilidade magnética no meio.

A energia de interação de um momento de dipolo magnético permanente individual com um campo magnético \mathbf{H} é bem fácil de obter. Para isso, considere dois pólos $-m$ e $+m$ a uma distância d um do outro¹. Se o potencial nos pólos é ϕ_{-m} e ϕ_{+m} , respectivamente, então o trabalho realizado é $-m\phi_{-m} + m\phi_{+m}$, e assim a energia potencial é

$$W = m(\phi_{-m} + \phi_{+m}) = m \frac{\partial \phi}{\partial r}, \quad (2.8)$$

onde r é a direção do vetor \mathbf{d} . Logo,

$$W_i = -\mu_i \cdot \mathbf{H} \quad (2.9)$$

para um dipolo individual. Para todos os momentos a energia de interação total é

$$W = -\sum_i \mu_i \cdot \mathbf{H} = -\sum_i g\mu_B \mathbf{S} \cdot \mathbf{H}, \quad (2.10)$$

se considerarmos desprezível o momento angular orbital \mathbf{L} . Segundo a Equação 2.10 um material sob a ação de um campo magnético tem seus momentos individuais com uma forte tendência a se alinhar com o campo. Contudo, isso não ocorrerá quando não temos momentos magnéticos permanentes, como será mostrado na próxima seção.

2.3 Diamagnetismo e Paramagnetismo

Os momentos magnéticos atômicos ou moleculares têm três possíveis origens: no spin eletrônico, no movimento dos elétrons em torno do núcleo atômico (momento angular orbital), e na mudança do momento orbital devido a um campo magnético aplicado. Este

¹Na natureza não encontramos monopólos magnéticos, mas em princípio podemos considerar um dipolo magnético como um par de pólos, em analogia ao dipolo elétrico.

último efeito se deve à lei de Lenz, onde a variação de um campo magnético \mathbf{H} , produz uma mudança na forma com que os elétrons giram em torno do núcleo. Esta mudança é tal que um campo magnético é gerado por uma corrente induzida, devido ao movimento dos elétrons, que se opõe à variação de \mathbf{H} . Isso fica bem evidente em materiais classificados como **diamagnéticos**, pois ao aplicarmos um campo magnético nestes, eles exibem uma magnetização em sentido contrário ao campo. Exemplos de materiais diamagnéticos são aqueles que têm átomos com camadas eletrônicas completas como o *He*, *Ne*, *Ar*, *Kr*, *Xe*, e sólidos com ligações iônicas como o *KBr*, *LiF*, *CaF₂* e *NaCl* e ainda alguns condutores como o *Cu*, *Au* [10].

O diamagnetismo está presente em todos os materiais, mas alguns podem possuir momentos magnéticos de origem nos spins eletrônicos. Materiais como estes podem ser classificados como paramagnéticos, ferromagnéticos, antiferromagnéticos ou ainda ferri-magnéticos. Os paramagnéticos, na ausência de campo, possuem magnetização praticamente zero. Isso decorre da fraca interação entre os momentos com respeito à temperatura na qual o sistema se encontra. Com uma perturbação mínima os momentos não têm direção privilegiada alguma e, com isso, possuem direções variadas de tal forma que a soma dada pela Equação 2.4 é nula. Ao se aplicar um campo magnético nestes materiais os momentos tendem a se alinhar com este, de acordo com a Equação 2.10. E, assim, ao aumentar o campo aumenta-se também a magnetização \mathbf{M} . A susceptibilidade resultante é positiva e da ordem de 10^{-5} e 10^{-3} , que diminui com o aumento da temperatura do sistema. Essa última observação foi primeiro colocada em 1895 por Curie. Segundo ele, a susceptibilidade desses materiais como função da temperatura era dada segundo a **lei de Curie**

$$\chi \cong \frac{NJ(J+1)g^2\mu^2}{3k_B T} = \frac{C}{T}, \quad (2.11)$$

onde N é o número total de átomos, k_B é a constante de Boltzmann, C é a constante de Curie e T é a temperatura absoluta do material (ver ref. [10]).

Sua conclusão foi baseada em experimentos realizados com o gás de oxigênio (O_2). Estudos posteriores também mostraram que nem todos os paramagnetos obedeciam a lei de Curie, Eq. 2.11. Contudo, Weiss, em seguida, mostrou que a susceptibilidade seria dada por

$$\chi = \frac{C}{T - \theta}, \quad (2.12)$$

onde θ é uma constante denominada de Temperatura de Curie. A Equação 2.12 é hoje chamada de lei de Curie-Weiss. A constante C está relacionada com a intensidade de interação entre os momentos. Se θ é positivo, significa que a interação ajuda a alinhar os

momentos paralelamente. Caso contrário, a interação é do tipo antiferromagnética como veremos nas seções posteriores.

Alguns materiais paramagnéticos são os metais de elementos não-magnéticos, isolantes, e os que contêm átomos livres ou íons de elementos dos actinídios, entre outros.

2.4 Ferromagnetismo

Ao contrário dos materiais paramagnéticos, os ferromagnéticos possuem seus momentos magnéticos altamente interagentes e ainda buscam o alinhamento paralelo entre si. Eles são o ferro, cobalto, níquel, gadolínio, térbio, dysprósio, holmio, érbio, túlio e etc. A maioria dos ferromagnetos são metais, e componentes iônicos como $La_{1-\delta}Ca_{\delta}MnO_3$ ($0.2 < \delta < 0.4$), $CrBr_3$, EuO , EuS , $EuSe$, EuI_2 e Eu_2SiO_4 . Todos eles apresentam uma magnetização espontânea, mesmo na ausência de campo, em certas condições de temperatura e depois de estarem sujeitos a campos magnéticos. Contudo, acima de uma temperatura crítica T_c (a Temperatura de Curie) essa magnetização se anula e o meio passa para a fase paramagnética.

Algumas amostras de ferromagnetos podem não exibir uma magnetização à campo nulo. A explicação postulada por Weiss [10] é bem conhecida e estabelecida hoje e prevê a existência de pequenas regiões ou domínios, com magnetização local em uma direção qualquer. Porém, a magnetização total seria a soma vetorial de todos os domínios o que resulta em uma magnetização próxima de zero. Esse fenômeno nos leva a fazer estudos quanto ao processo de magnetização sobre dois aspectos. O primeiro consiste na análise de sistemas que possuem um único domínio magnético, verificando as propriedades da magnetização com respeito ao campo ou temperatura. Este aspecto está mais relacionado com as propriedades microscópicas ou a nível atômico, e é o assunto de maior interesse nesse trabalho. O segundo diz respeito ao comportamento da magnetização em um campo aplicado de materiais que possuem muitos domínios magnéticos (é o caso da maioria dos materiais), embora, sob certas condições, como a aplicação de um campo suficientemente grande, esses domínios podem desaparecer. Tal aspecto está relacionado com as propriedades macroscópicas ou de volume.

Portanto, na próxima seção será apresentado alguns detalhes da teoria clássica para a magnetização espontânea desenvolvida por Weiss. Em seguida, será apresentada a origem Quântica da interação de troca prevista pelo mesmo, e que está de acordo com muitos casos observados experimentalmente. Por fim, as características teóricas e experimentais

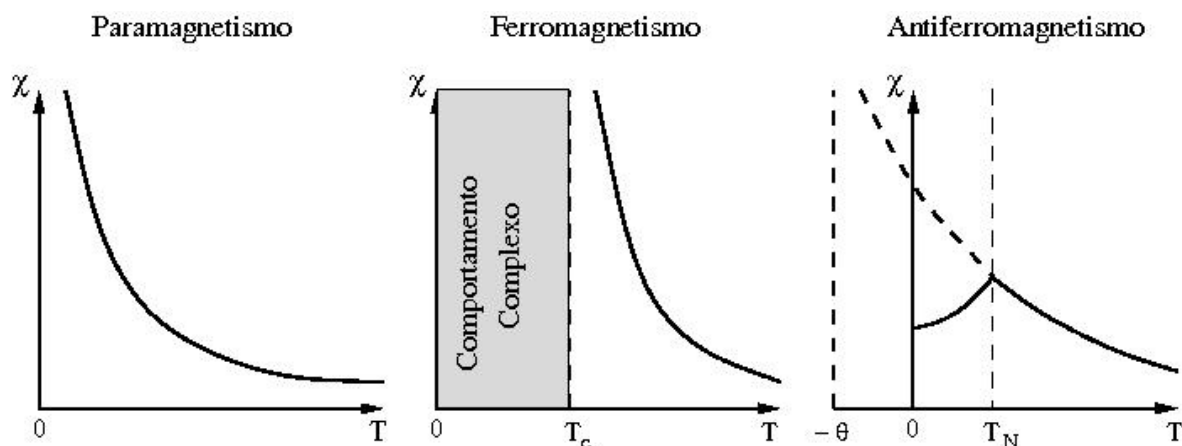


Figura 3: Susceptibilidade como função da temperatura para um sistema paramagnético (primeiro gráfico), em seguida para um ferromagnético em temperaturas acima de T_c e, por fim, para um antiferromagnético acima de sua temperatura crítica, chamada de Temperatura de Néel, T_N [9].

da anisotropia presente em materiais ferromagnéticos será comentada.

2.4.1 A Teoria Clássica do Campo Molecular

A teoria clássica do campo molecular formulada por Weiss, em 1907, consiste em um postulado (proposto antes mesmo do total desenvolvimento da Mecânica Quântica) da existência de um campo interno proporcional à magnetização em materiais ferromagnéticos. Este campo interno, também chamado de campo molecular de Weiss ou campo de exchange (\mathbf{H}_W), substitui a forte interação existente entre os momentos de dipolo magnético, a qual é minimizada com o aumento da temperatura. Ele é, então, matematicamente dado por

$$\mathbf{H}_W = N_W \mathbf{M}, \quad (2.13)$$

onde N_W é a constante do campo molecular.

Podemos agora mostrar a origem da lei de Curie da Equação 2.12. Suponha a fase paramagnética com χ_p dada pela Equação 2.11. A magnetização \mathbf{M} é então dada pela Equação 2.5, com $\mathbf{H} = \mathbf{H}_A + \mathbf{H}_W$, onde \mathbf{H}_A é o campo aplicado que causa uma magnetização finita e, conseqüentemente, um campo molecular de Weiss. Desse modo, é fácil ver que a nova susceptibilidade χ será

$$\chi = \frac{\mathbf{M}}{\mathbf{H}_A} = \frac{C}{T - CN_W}. \quad (2.14)$$

E se $\theta = CN_W$ tem-se exatamente a Equação 2.12 e em $T = \theta$ uma singularidade. Nesta

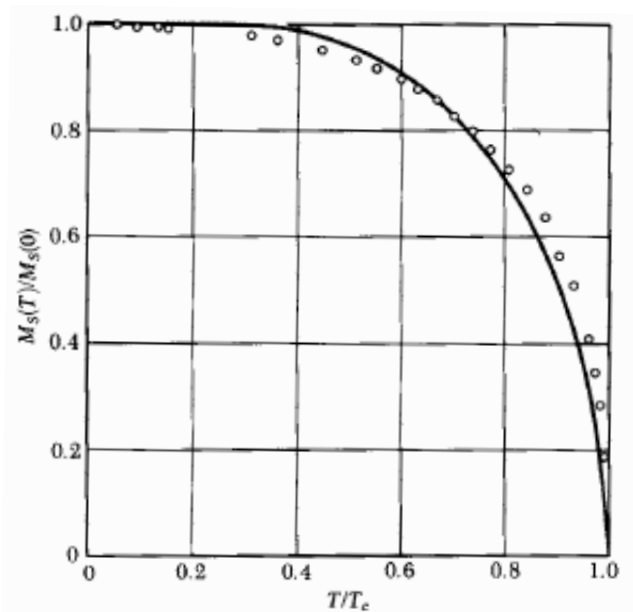


Figura 4: Magnetização de saturação do níquel como função da temperatura, e curva teórica para $S=1/2$ na teoria do campo médio. Valores experimentais de P. Weiss e R. Forrer [9].

temperatura e abaixo dela o sistema terá uma magnetização espontânea e um ordenamento denominado ferromagnético se $N_W > 0$. Caso contrário ele será antiferromagnético.

A Figura 3 mostra a susceptibilidade para um paramagneto ($T > 0$), ferromagneto ($T > T_c$) e um antiferromagneto para $T > T_N$, onde T_N é a temperatura crítica acima da qual o sistema antiferromagnético muda para a fase paramagnética, denominada de Temperatura de Néel.

A teoria do campo médio ou campo molecular de Weiss pode ser usada para verificar a dependência da magnetização de saturação em função da temperatura. A demonstração disso não tem importância fundamental para o propósito desse trabalho, porém essa dependência será simulada através do Método de Monte Carlo e é preciso saber como a magnetização se comporta com respeito a temperatura. A Figura 4 mostra, então, o comportamento da magnetização com o aumento da temperatura para o Ni e o resultado a partir da teoria do campo molecular. Em $T = T_c$ ela se anula, caracterizando a mudança de fase ferromagnética/paramagnética classificada como uma transição de segunda ordem.

2.4.2 A Interação de Troca

Em 1928, Heisenberg publicou um artigo no qual mostrou que o campo molecular de Weiss é resultado da interação de troca da Mecânica Quântica e que ela não tem análogo

clássico. Sua teoria se baseou no método de Heitler - London desenvolvido para o átomo de hidrogênio [10]. Os detalhes dessa teoria não serão apresentados aqui, mas qualquer livro de mecânica quântica pode ter detalhes sobre o cálculo. Contudo, o que é necessário conhecer é que a constante de troca tem origem eletrostática e é resultado direto da indistinguibilidade dos elétrons. Seu valor resulta de uma integral, chamada de integral de troca, das funções de onda sobrepostas de partículas idênticas, e pode ser negativo ou positivo. Por exemplo, para a molécula de hidrogênio ela é negativa. Isso varia de acordo com as distâncias entre as partículas elementares dos átomos ou moléculas envolvidos. Se considerarmos a molécula de hidrogênio (dois átomos de hidrogênio ligados por uma interação interatômica), com interações entre os núcleos atômicos, entre os elétrons de cada átomo e entre um elétron de um átomo com o núcleo do outro, teríamos um potencial eletrostático entre os dois átomos representado pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H}_{(H_2)} = \frac{e^2}{r_{ab}} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}}, \quad (2.15)$$

onde r_{ab} é a distância entre os núcleos do hidrogênio a com o do b , r_{12} a distância entre os elétrons 1 do átomo de núcleo a e 2 do átomo de núcleo b , r_{1b} e r_{2a} as distâncias entre núcleo e elétron, e e é a carga elementar. Então, o sinal da integral de troca será positivo se os dois primeiros termos do lado direito da Equação 2.15 forem suficientemente grandes de forma que $\mathcal{H} > 0$. Uma representação possível para a constante de troca como função da distância entre os núcleos atômicos pode ser vista na Figura 5. Ela é conhecida como a curva de Bethe-Slater, pois foi Slater quem primeiro encontrou uma correlação entre a natureza da interação de troca com a distância interatômica em 1930 e três anos mais tarde Bethe, juntamente com Sommerfeld, confirmaram seus resultados [39]. Contudo, a figura representa alguns poucos casos e, por isso, somente deve ser usada como um exemplo de comportamento da constante de troca.

Os materiais que possuem interações interatômicas ferromagnéticas, ou seja, quando a constante de troca $J_e > 0$, são o ferro e metais de terras raras, pois possuem ligações do tipo d e f . Alguns metais como o Mn e Cr não são ferromagnéticos, mas alguns de seus compostos são, pois nestes podem existir pequenas mudanças no espaçamento interatômico, os quais favorecem o ferromagnetismo. Como exemplo disso tem-se $MnAs$ e $MnSb$ [10].

É comum escrever o Hamiltoniano de um cristal completo como a soma, sobre todos

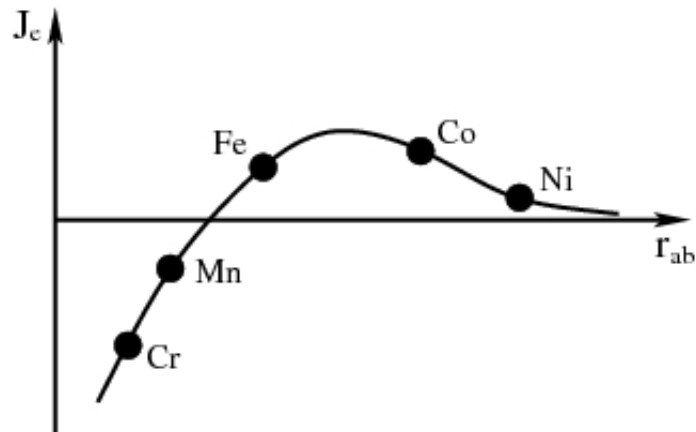


Figura 5: Esquema da variação da integral de troca J_e como função da distância interatômica r_{ab} [10].

os átomos, do produto escalar entre os spins de átomos vizinhos da forma

$$\mathcal{H}_e = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.16)$$

onde \mathbf{S}_i é o operador de spin. Este pode ser considerado, classicamente, como um vetor com uma, duas ou três componentes. Quando o spin possui as três componentes, onde $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2$ podemos dizer que a Equação 2.16 representa o Modelo de Heisenberg para um material ferromagnético.

Existem outros modelos mais simples. Um deles, mais conhecido que o próprio modelo de Heisenberg, por ter sido pioneiro em modelar ferromagnetos como um conjunto de momentos magnéticos através de vetores clássicos interagentes entre si, é o modelo de Ising. Esse modelo, como já comentado na introdução deste trabalho, consiste em uma rede de spins com apenas uma componente, ou seja, considerando somente a componente z , tem-se um hamiltoniano em que $S_i^z = \pm 1$. Esse é um dos modelos mais estudados, desde o seu desenvolvimento, devido sua simplicidade. Um outro modelo, o qual também é objeto de estudo nesse trabalho, é o chamado de Modelo XY. Este consiste em spins com apenas duas componentes. Nesse caso, é conveniente representá-los como vetores de componentes S^x e S^y de forma que $S^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2$, ou apenas pelo ângulo que o spin faz com o eixo principal [1]. O fato de esses dois modelos não possuírem uma ou duas componentes do spin, não implica que não possa ser tratado em uma, duas ou três dimensões. O modelo XY será estudado neste trabalho em duas dimensões e, por isso, será chamado de Modelo 2D XY, como é comum na literatura.

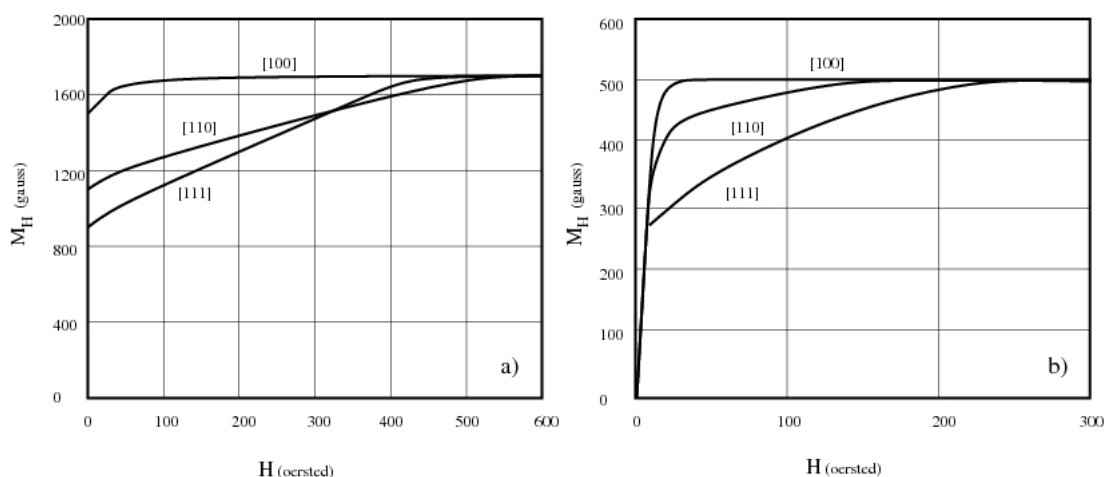


Figura 6: Magnetização vs. campo para o ferro (a) e nickel (b) em três direções diferentes, [100] correspondendo à direção da aresta de um cristal cúbico, [110] correspondendo à diagonal da face de um cubo e [111] à diagonal do mesmo [9].

2.4.3 Anisotropia Cristalina

Muitos materiais não exibem o mesmo comportamento em direções diferenciadas. Um exemplo simples é um pedaço de madeira, que na tentativa de quebrá-lo em uma direção, é bem provável que será mais fácil ou mais difícil do que quebrá-lo em outra. Pode-se dizer então, que essa madeira não é isotrópica. Ela possui um certo tipo de anisotropia espacial. Em materiais magnéticos não é diferente. Observa-se, por meio de experimentos, que a magnetização tende a se alinhar com o campo magnético, mas, dependendo da direção deste, isso pode ocorrer de forma que a magnetização sature com mais ou menos facilidade. Como exemplo, mostramos na Figura 6 a magnetização para o ferro (Figura 6a) e para o nickel (Figura 6b) contra o campo aplicado em três direções cristalográficas diferentes [10, 39]. Notemos por exemplo que, para o ferro a direção de fácil magnetização é a [100] correspondendo à uma aresta de um cristal cúbico, e a direção correspondendo à diagonal [111] é de difícil magnetização.

É comum expressar a energia de anisotropia em série de potências de funções trigonométricas dos ângulos que o vetor magnetização faz com o eixo principal do cristal [10]. A expressão para essa energia tem origem fenomenológica. Como exemplo, para um material com simetria tetragonal os termos de mais baixa ordem são dados por

$$E(\theta, \phi) = K_1 \sin^2(\theta) + K_2 \sin^4(\theta) + K_3 \sin^4(\theta) \cos^4(\phi), \quad (2.17)$$

onde K_1 , K_2 e K_3 são as constantes anisotrópicas, θ e ϕ são os ângulos polares da magnetização espontânea, ou à nível microscópico, dos momentos magnéticos de spin dos

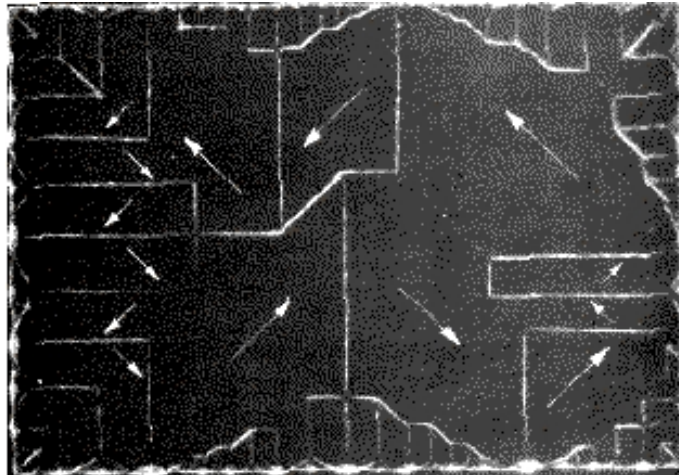


Figura 7: Estrutura dos domínios ferromagnéticos de uma placa de níquel [9].

átomos [39].

A energia de anisotropia depende da geometria da amostra e, para modelos simples como será tratado aqui, ela pode ser expressa somente por termos de mais baixa ordem. Isso significa que podemos considerar somente termos como $K_1 \sin^2(\theta)$ ou mesmo em função de cossenos. Nesse trabalho, a energia magnetocristalina E_A será representada como uma soma sobre todos os spins da rede cristalina bidimensional, os quais fazem um ângulo θ com o eixo-x. Dessa forma, teremos

$$E_A = -D \sum_i \cos^2(\theta), \quad (2.18)$$

onde D será a constante anisotrópica. O eixo de fácil magnetização será o eixo-x se $D > 0$ ou o eixo-y se $D < 0$.

2.5 A Magnetização de Materiais Ferromagnéticos

Como foi dito anteriormente, um ferromagneto pode exibir uma magnetização espontânea na ausência de campos, no entanto essa magnetização pode se dar em várias regiões dentro da amostra denominada domínios magnéticos, como mostra Figura 7. Portanto, a atuação de um campo magnético H em um ferromagneto altera a configuração dos domínios de forma a levá-lo a um aumento na magnetização total da amostra.

As próximas seções mostrarão como se dá a formação dos domínios e qual a forma geral que eles se comportam na presença de um campo magnético. Também será exposto sobre as propriedades da curva de histerese e a classificação geral dos ferromagnetos de

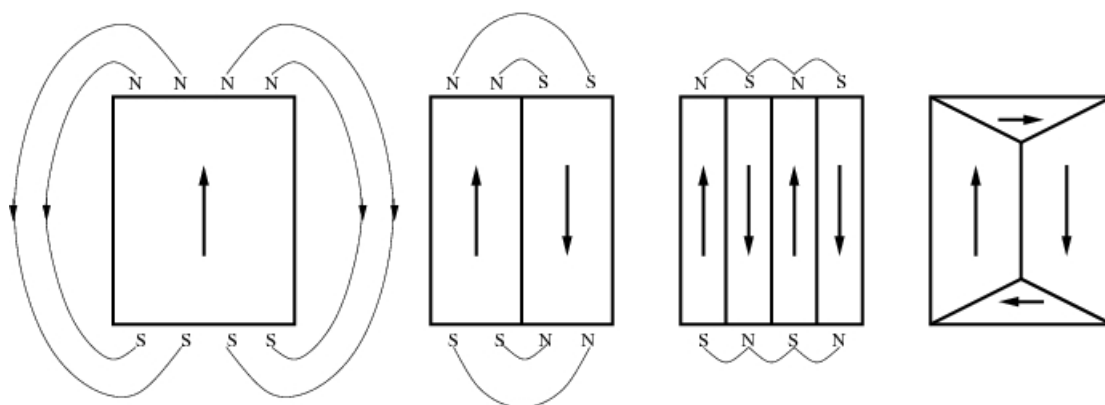


Figura 8: Formação de domínios em materiais ferromagnéticos, considerando a energia magnética.

acordo com os valores do campo coercivo.

2.5.1 Domínios Magnéticos

Para se entender melhor o processo de magnetização é preciso, primeiramente, compreender a origem dos domínios magnéticos. Essa compreensão nos leva ao emprego da Termodinâmica, no sentido de que o estado de equilíbrio estável da magnetização de uma amostra é alcançado através da minimização da energia livre total F_T da mesma.

A energia livre total de um ferromagneto em um campo aplicado é resultado da soma de vários tipos de energias, as quais representam as interações existentes dentro do material. São elas a energia de troca, a energia resultante da interação do campo com os momentos magnéticos (Energia de Zeeman), a energia anisotrópica e energia magnética. Elas competem entre si no sentido de minimizar a energia total. Por exemplo, a Figura 8 mostra uma sequência de um mesmo material ferromagnético formando as paredes de domínios de forma a minimizar a energia magnética, a qual tem a forma

$$E_M = - \int_V \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_s dV, \quad (2.19)$$

onde \mathbf{H}_s é o campo magnético na superfície e dentro do material, o qual é dado pelo campo aplicado subtraído de $d\mathbf{M}$, onde d é o fator de demagnetização que depende da geometria da amostra.

Ao mesmo tempo que a energia magnética diminui na Figura 8, as paredes de domínio aumentam resultando em um aumento de energia de troca. Existe, portanto, uma quantidade máxima de paredes de forma que F_T seja o menor valor possível.

Quando temos um ferromagneto que não apresenta uma magnetização macroscópica, mas que contenha domínios, e aplicamos nele um campo magnético dois processos podem ocorrer. O primeiro é o movimento das paredes, onde os domínios que já estão no sentido do campo crescem e os demais diminuem. Em um segundo processo, os domínios que não estão na direção do campo sofrem uma rotação até ficarem no mesmo sentido do campo aplicado. Os processos podem ser reversíveis ou não, dependendo da natureza do material e da intensidade do campo aplicado. Contudo, quando o processo é irreversível, ou seja, quando aplicamos um campo reverso e a diminuição da magnetização segue uma trajetória diferente, temos um fenômeno muito interessante e útil, a **histerese**. A Figura 9a mostra o esquema de um processo inicial de magnetização até a saturação, onde duas formas estão presentes, os deslocamentos das paredes e a rotação dos domínios magnéticos. Quando o campo é suficientemente grande de forma que a magnetização da amostra satura e, em seguida, reduzimos gradualmente o campo a zero, a magnetização não se anula e assume um valor finito chamado de **magnetização remanente** (M_R). Para zerar a magnetização é preciso que aumentemos o campo em sentido contrário ao aplicado anteriormente. A intensidade do campo necessário para isso é denominado de **campo coercivo** (H_c). A Figura 9b mostra o ciclo completo de histerese mostrando os pontos referente a **remanência** e a **coercividade**.

O ciclo de histerese não é fácil assim de se obter. Isso porque existem várias possibilidades de configurações de domínios dentro de uma amostra e, assim, as curvas da Figura 9 não serão sempre as mesmas. Alguns fatores influenciam na formação da curva de histerese como a geometria do material. Um mesmo material pode ter curvas de histerese distintas se eles simplesmente possuírem formas diferentes [40]. Além disso, o tamanho da amostra é fator considerável na interpretação da curva $M(H)$. A magnetização é uma propriedade local dos materiais e, portanto, o tamanho e forma dos materiais, bem como as impurezas e defeitos, podem modificar a curva de histerese consideravelmente. Contudo, para simplificar o estudo desse fenômeno, vamos nos restringir ao estudo da histerese de pequenas partículas. Estas, geralmente possuem um único domínio magnético. É bom notar que o comportamento de um material com vários domínios, ou ferromagnetos massivos (em inglês, *bulk materials*), é apenas a superposição dos comportamentos individuais de partículas pequenas.

A razão pela qual um ferromagneto pode exibir histerese, está novamente na análise da energia livre total F_T do material. Os estados de equilíbrio estável são correspondentes aos mínimos F_T . Contudo, esses mínimos podem ser locais, caracterizando os estados metaestáveis, os quais são essenciais para a formação da curva de histerese. Para entender

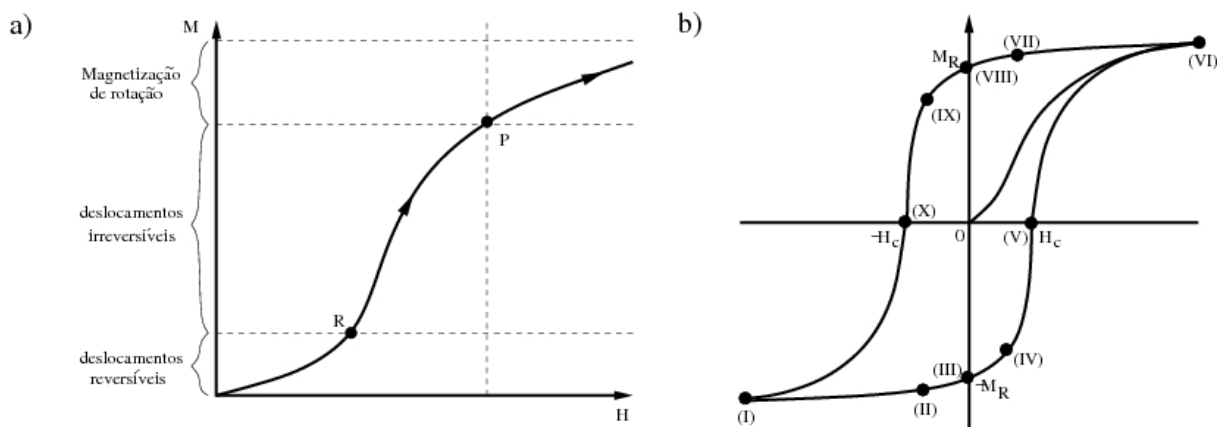


Figura 9: Esquema de um possível processo de magnetização de um ferromagneto.

melhor, suponha que a energia livre seja uma função de fase da forma da Figura 10, que foi gerada a partir da equação $F_T(X) = X^4 - 2aX^2$, onde a é uma constante igual a 1.2 e X é uma característica do estado do sistema. No caso de um sistema de spins, X pode ser a magnetização total. Em Mecânica Estatística $F_T(X)$ também é função da temperatura e é chamada de energia livre de Helmholtz. Se o sistema completo é caracterizado pelas quantidades H , X e a temperatura T , e as duas primeiras variáveis são conjugadas, então é possível escrever a energia como $G(H, T) = F_T(X, T) - HX$, correspondendo a energia livre de Gibbs. Esta, é conhecida em Termodinâmica como um potencial termodinâmico que controla todas as transformações para H e T fixos, as quais produzem a minimização de $G(H, T)$. Assim o equilíbrio termodinâmico é alcançado quando $G(H, T)$ possui um valor de mínimo global. Qualquer transformação implica na existência de graus de liberdades internos. Contudo, se considerarmos o caso em que esses graus de liberdades incluem a grandeza X , o sistema relaxa através de sequências de estados termodinâmicos onde sua energia é representada pela *energia livre de Landau* da equação abaixo [41].

$$G_L(X, H, T) = F(X, T) - HX. \quad (2.20)$$

Voltando novamente para a função $F_T(X)$, é possível observar que ela possui apenas dois mínimos em $X = \pm\sqrt{a}$ e um máximo em $X = 0$. E, de acordo com a Equação 2.20, a energia para valores de campo H diferentes de zero será

$$g_L(X, H) = X^4 - 2aX^2 - HX. \quad (2.21)$$

Os estados metaestáveis sob a ação de um campo H são determinados pelas condições de mínimo da função 2.21. A Figura 11 apresenta a função acima para vários valores de

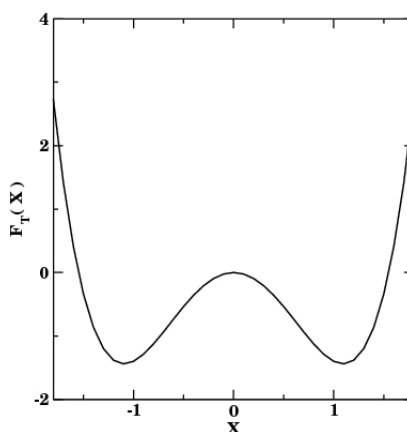


Figura 10: Gráfico da função $F_T(X) = X^4 - 2aX^2$, representando a energia livre de Helmholtz. A função foi utilizada apenas para compreender a metaestabilidade de um sistema e usamos $a = 1.2$.

H . Quando este assume valores grandes, $g_L(X, H)$ possui somente um mínimo global (casos I e VI), mas quando $H = 0$ tem-se novamente dois mínimos com a mesma energia. Os estados intermediários (casos II, IV, VII e IX) possuem dois mínimos, um global e outro local, o qual chamamos de estado metaestável. Observe que, dependendo do estado anterior, caracterizado pela quantidade X , esses estados podem estar ocupados em um certo intervalo de campo. Quando isso acontece, o campo necessário para fazer o sistema sair desse estado de metaestabilidade é exatamente o campo coercivo. A Figura 9b mostra os pontos correspondente na curva de histerese, se a variável X for a magnetização da amostra no monocristal. É claro que, geralmente, a energia livre é bem mais complexa que a função apresentada, ela pode possuir uma quantidade enorme de estados metaestáveis e ainda uma grande quantidade de estados degenerados correspondendo ao mínimo global. Mas essa análise pode ser bem aproveitada, visto que as funções mais complexas podem ser resultado de uma superposição de funções como a da Figura 10. Além disso, o exemplo tem um caráter pedagógico para melhor compreender a relação que existe entre histerese e metaestabilidade.

2.5.2 Tipos de Ferromagnetos

Quando analisa-se curvas de histerese de materiais ferromagnéticos, três características principais devem ser observadas. A **magnetização de saturação**, a qual é definida como a magnetização máxima que uma amostra pode alcançar, a **magnetização remanente**, obtida quando retira-se completamente o campo que saturou o material, e a **coercividade**, representado por H_c e significa o campo necessário para zerar a magnetiza-

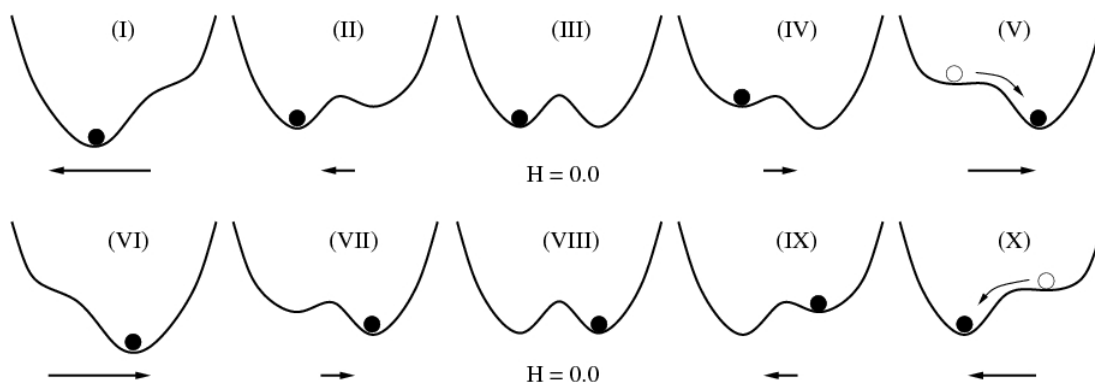


Figura 11: Sequências da forma da função 2.21 para vários valores de H .

ção remanente. Esta última propriedade nos permite classificar os ferromagnetos em dois tipos principais, ferromagnetos duros (ímãs) e ferromagnetos moles ou doces. É comum definirmos que um material com uma coercividade maior que 10^4A/m é considerado duro e se for menor que 500A/m é doce [37].

Ambos os tipos têm formidáveis aplicações. Os materiais que possuem alta coercividade, mais popularmente conhecidos como os ímãs permanentes, têm incontáveis aplicações. Eles geralmente são usados para gerar um campo magnético. Podemos vê-los em geradores e motores elétricos, eletrodomésticos, eletroeletrônicos, relógios, computadores, sensores, fitas magnéticas, alto-falantes, fones, microfones, galvanômetros, balanças, equipamentos médicos, microondas e muitos outros. Já os ferromagnetos doces são utilizados para produzir um alto fluxo magnético a partir de correntes elétricas ou mesmo para criar uma grande indução magnética devido a um campo. Por possuírem baixa coercividade e magnetização remanente eles dissipam uma quantidade de energia muito pequena.

2.6 Antiferromagnetismo

O antiferromagnetismo também tem origem na interação entre os spins, mas esta, diferentemente do ferromagnetismo, tende a alinhar os momentos em sentidos opostos. Apesar de não exibir magnetização espontânea, ele é um estado ordenado de longo alcance. Néel foi o primeiro a encarar uma substância antiferromagnética como a composição de duas subredes com magnetizações finitas, mas em sentidos contrários. Entretanto, o termo antiferromagnetismo também pode ser aplicado em sistemas com mais de duas subredes. O arranjo dos momentos em uma rede cristalina antiferromagnética pode se observada experimentalmente por **difração de neutrões**, método desenvolvido na década de 40.

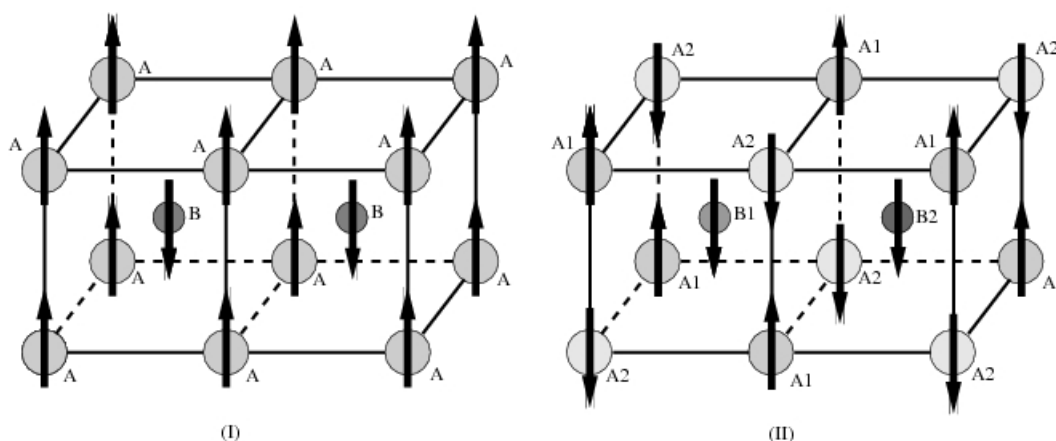


Figura 12: Duas espécies de arranjo antiferromagnético dos momentos atômicos em uma rede cúbica de corpo centrado.

Como já visto, a interação de troca, de origem eletrostática e explicado somente com argumentos quânticos, pode ser positiva ou negativa. Quando negativa, temos o antiferromagnetismo. Em uma certa temperatura, esse ordenamento pode mudar de fase, a chamada **Temperatura de Néel** T_N . Acima desta, o material se torna paramagnético. A teoria do campo molecular para o antiferromagnetismo é bastante parecida com aplicada ao ferromagnetismo, a qual prevê o comportamento da magnetização, susceptibilidade e outras grandezas magnéticas e termodinâmicas. A Figura 3 dá uma idéia geral de como a susceptibilidade magnética varia com a temperatura [10].

O arranjo dos momentos atômicos dos materiais antiferromagnéticos podem assumir formas diversas. Como exemplo, vejamos uma estrutura cúbica de corpo centrado, para o zero absoluto. A Figura 12 mostra duas formas de arranjos de momentos, os quais estão representados pelas setas para cima ou para baixo. Em (I) temos apenas duas subredes A e B e em (II) temos quatro subredes A1, A2, B1 e B2. Em qualquer outra temperatura abaixo da temperatura de Néel as setas podem representar uma média temporal dos momentos atômicos por átomo.

Ao se aplicar um campo magnético em um ferromagneto, observando a temperatura de Curie, observa-se que esta aumenta com respeito a temperatura crítica na ausência desse campo. Já em materiais antiferromagnéticos o que ocorre é uma diminuição da temperatura crítica de Néel. A razão para isso pode ser explicado da seguinte forma. Considere um antiferromagneto que possui duas subredes A e B, em uma certa temperatura $T < T_N$ e em campo nulo. Agora suponha a aplicação de um campo no mesmo sentido de \mathbf{M}_A , a magnetização da subrede A. Dessa forma, a magnetização da subrede B, \mathbf{M}_B , terá sentido oposto. Aumentarmos o campo, o que ocorre é que a intensidade de \mathbf{M}_B na direção do

campo diminui até se anular, e então aumenta, agora no mesmo sentido do campo, até se tornar paralelo ao mesmo. Para isso, é preciso uma intensidade muito grande do campo magnético quando a amostra possui baixas temperaturas. A diminuição da temperatura de Néel com o campo tem sido observada em alguns materiais como $CuCl_2 \cdot (2H_2)$ e em $Co(NH_4)_2(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ [10].

A energia magnetocristalina em sistemas antiferromagnéticos pode ser escrita como uma série de potências, da mesma forma que mostramos para o caso ferromagnético. Contudo, como o antiferro pode ser visto como duas subredes, é comum escrevermos essa energia de acordo com a equação

$$F_K = -D(\cos^2 \theta_A + \cos^2 \theta_B), \quad (2.22)$$

onde θ_A e θ_B são os ângulos entre as magnetizações das subredes, M_A e M_B , e o eixo fácil de magnetização [10]. Contudo, quando se calcula a energia anisotrópica a partir dos momentos magnéticos atômicos, é possível expressá-la de acordo com a equação

$$E_{an} = -D \sum_i \cos^2 \theta_i, \quad (2.23)$$

onde θ_i é o ângulo do i -ésimo átomo da rede cristalina e a soma é sobre todos os átomos da amostra.

2.7 Interface FM-AFM

Os dois tipos de ordenamento magnético que foi detalhado nesse trabalho, o ferromagnético e antiferromagnético, podem coexistir em um único monocristal. Quando isso ocorre, um efeito interessante e que pode ser de muita utilidade mostra-se presente em determinadas condições. Ele é conhecido hoje como o *Exchange Bias* (EB), mas primeiramente chamado de **anisotropia de troca** por Meiklejohn e Bean, quando em 1956 observaram o fenômeno em partículas de cobalto (material ferromagnético) revertido com seu óxido, CoO (antiferromagnético). O EB é caracterizado por um deslocamento da curva de histerese, como mostra a Figura 13a. Ele é resultado de uma interação existente entre o material ferromagnético com o antiferromagnético, embora só ocorra em certas condições. Os experimentos feitos por Meiklejohn e Bean mostraram que para o material apresentar esse novo tipo de anisotropia, era preciso resfriar o material de uma temperatura $T_N < T < T_C$ na presença de um campo magnético. A curva tracejada na Figura 13a mostra o resultado quando a histerese é obtida sem que o sistema tenha sido resfriado

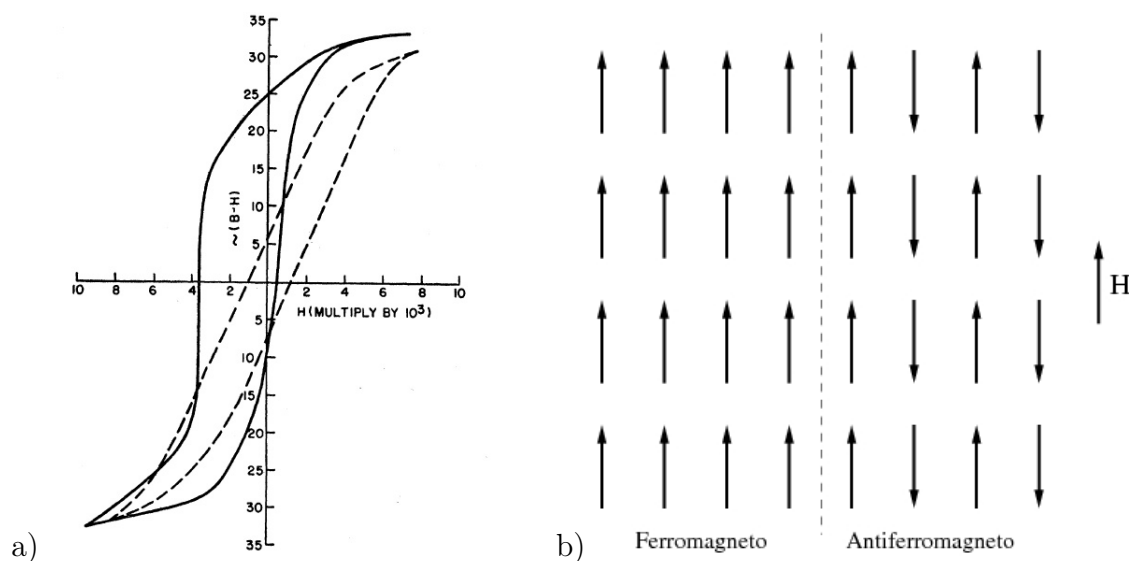


Figura 13: a) Histerese de partículas de cobalto revertido de óxido de cobalto a temperatura de 77K. A curva tracejada é a histerese do mesmo material resfriado na ausência de campo. b) Arranjo dos momentos magnéticos atômicos de uma bicamada ferromagneto/antiferromagneto depois de resfriada na presença de um campo magnético.

na presença desse campo. A Figura 13b mostra, de forma simplificada, um possível arranjo dos momentos magnéticos de um sistema acoplado FM-AFM depois que o sistema é resfriado na presença de um campo paralelo a interface.

A presença da interface produz uma anisotropia unidirecional. Esse aspecto é observado através do resultado, publicado também por Meiklejohn e Bean, o qual mostrava que a curva de torque era proporcional a $\sin(\theta)$, e não a $\sin(2\theta)$ como ocorre em materiais com anisotropia uniaxial. A energia e o torque em relação ao ângulo são mostrados na Figura 14.

Vários anos se passaram e muitas pesquisas foram feitas no sentido de explicar o EB, reproduzi-lo em outros materiais, e também de estudá-lo através de simulações computacionais. Recentemente, J. Nogués e Ivan K. Shuller, produziram um trabalho completo sobre o exchange bias, apresentando a importância de se estudar esse fenômeno devido o grande potencial em aplicações tecnológicas, mostrando também as técnicas experimentais, os modelos teóricos e uma razoável quantidade de questões ainda não resolvidas [7, 19]. Ele conseguiu reunir uma grande quantidade de pesquisas realizadas desde a descoberta do efeito até o final da década de 90.

O Método de Monte Carlo também tem sido uma técnica importante na compreensão desse fenômeno e é a ferramenta utilizada nesse trabalho para reproduzir o EB. Isto será feito no sentido de verificar em quais condições o fenômeno pode ocorrer. Para

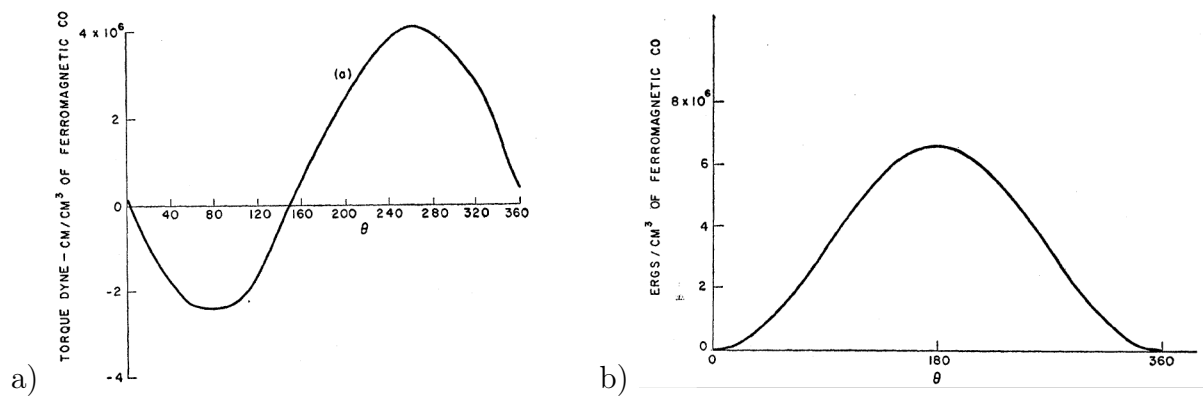


Figura 14: a) Curva de torque e b) energia de rotação de partículas de cobalto revestida de seu óxido a uma temperatura de 77K, resfriado em um campo magnético de 300K.

isso, veremos no próximo capítulo a teoria geral do método, o algoritmo e todos os passos necessários para o estudo de sistemas ferromagnéticos, antiferromagnéticos e acoplamentos entre estes. Em seguida, alguns dos resultados obtidos para um caso particular em que ocorre o efeito será apresentado.

3 *O Método de Monte Carlo e Aplicações*

3.1 Introdução

Em meados do século XVIII, o matemático e naturalista francês, Conde de Buffon lançou o problema de se obter a probabilidade de uma agulha de comprimento L cair de forma a cruzar uma das retas de um conjunto destas, paralelas entre si e espaçadas por uma distância d em um plano [1, 42]. Esse problema pôde ser resolvido analiticamente, o que possibilitou a estimativa experimental do valor de π , realizando sucessivos lançamentos da agulha. O problema ficou conhecido como Agulha de Buffon (Dörrie 1965) [1]. Ele foi solucionado por meio de um método estatístico que se utiliza de eventos aleatórios para estimar o valor de π . Esta técnica, hoje conhecida como Método de Monte Carlo (MMC), é largamente utilizada na resolução de problemas de Física e Matemática. O método, apesar de já aplicado a muito tempo, ganhou o nome e um desenvolvimento sistemático na metade do século XX, quando Stanislaw Ulam, Enrico Fermi, John Von Neumann, e Nicholas Metropolis o utilizaram para fazer estimativas dos autovalores da equação de Schrodinger [1, 43]. Eles deram esse nome devido à cidade de Monte Carlo no Principado de Mônaco, sul da França, muito conhecida por seus cassinos.

Uma das suas primeiras aplicações, foi no cálculo aproximado de integrais de difícil solução através de outros meios. Vejamos um exemplo para melhor compreender o método e suas aplicações. Seja a integral dada por

$$I = \int_a^b \sin^2\left(\frac{1}{x}\right) dx, \quad (3.1)$$

onde a e b são os limites da integração. O procedimento para esta estimativa também é bem fácil de entender. Sabemos que $0 < f(x) = \sin^2\left(\frac{1}{x}\right) < 1$, então podemos dizer que a função em um intervalo $a < x < b$ está contida em uma região de área conhecida $A = (b - a)$, como mostra a Figura 15.

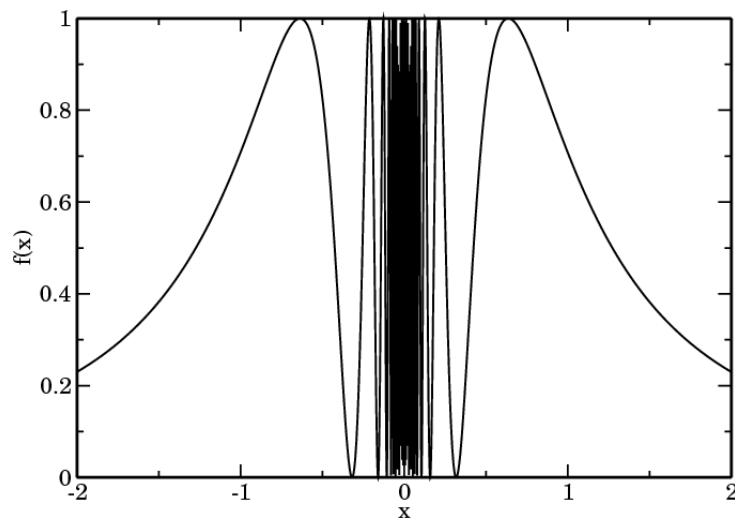


Figura 15: Gráfico da função $f(x) = \sin^2\left(\frac{1}{x}\right)$ para $-2.0 < x < 2.0$.

Assim, selecionando um ponto qualquer (ν, ω) aleatoriamente dentro da área A , qual seria a probabilidade deste ponto ficar abaixo da curva definida por $f(x)$? A resposta é exatamente igual a $p = \frac{I}{A}$. Podemos portanto, usar esta informação para estimar o valor de I seguindo os procedimentos.

1. Sortear um ponto dentro da região de área A , ou seja, sortear os números $a < \nu < b$ e $0 < \omega < 1$.
2. Verificar se $\omega < f(\nu)$. Se for, o ponto (ν, ω) está abaixo da curva.
3. Fazer N realizações dos dois primeiros passos e verificar quantas vezes o ponto sorteado ficou abaixo da curva e atribuir à variável M .

Desse modo, teremos que

$$p = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M}{N}. \quad (3.2)$$

Logo, o valor da integral $I = pA = p(b - a)$ deverá ser

$$I = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M(b - a)}{N}. \quad (3.3)$$

Esse mesmo método, o qual se baseia na utilização de eventos aleatórios, pode também ser aplicado em muitos problemas. Como exemplos, temos o ajuste de curvas ou superfícies para um determinado conjunto de pontos; a determinação da configuração de equilíbrio de sistemas de partículas (dotadas de massa, carga, momento, spin e etc.) em um certo potencial e ainda em sistemas financeiros para avaliar aplicações e investimentos

de mercado. Cada um desses exemplos possui características que formam a base para a aplicação do método em qualquer problema de matemática ou física. As principais são:

1. Existe a utilização de variáveis aleatórias, a qual caracteriza o MMC. No exemplo anterior os valores ν e ω são aleatórios.
2. Temos o conhecimento prévio do intervalo de valores que as variáveis aleatórias podem possuir, ou seja, em outras palavras conhecemos o *espaço de fase*, o qual é definido em Física Estatística como um espaço abstrato n-dimensional, formado por suas *coordenadas generalizadas* [41]. Esta abordagem se aplica melhor em problemas mais complexos, que será visto adiante. Veja que no exemplo $a < \nu < b$ e $0 < \omega < 1$.
3. Devemos garantir que cada sorteio seja tal que, todo o espaço de fase seja acessível. No caso do cálculo da integral I , devemos garantir que todo e qualquer ponto aleatório (ν, ω) na área A seja igualmente provável.
4. Existe uma ou mais grandezas que, para determinado número de sorteios $N \rightarrow \infty$, converge para uma constante de interesse. Para o mesmo exemplo citado temos o valor da integral I como essa grandeza.

3.2 Números Aleatórios

Na seção anterior, foi visto que o método de Monte Carlo exige a presença de um processo físico aleatório como, por exemplo, o simples ato de jogar uma agulha, o lançamento de um dado de seis lados ou de uma moeda. Esses processos devem ser tal que gerem uma sequência de números aleatórios independentes, reais e uniformemente distribuído em um dado intervalo, geralmente entre zero e um. No que diz respeito a simulação computacional, tais sequências são geradas por meio de operações algébricas **determinísticas** e, por isso, geram uma sequência de números considerados pseudo aleatórios [43]. A operação padrão segue a fórmula de recorrência

$$R_{i+1} = \text{mod}(aR_i + b, m), \quad (3.4)$$

onde a , b e m são inteiros denominados de multiplicador, incremento e módulo, respectivamente. A função $\text{mod}(x, y)$ é exatamente o resto da divisão de x por y .

A Equação 3.4 significa a realização do seguinte procedimento. Escolha um número inteiro R_1 entre zero e $(m - 1)$. Em seguida, calcule o valor de $(aR_1 + b)$ e então divida o

resultado por m , encontrando o resto que será o próximo número inteiro pseudo aleatório R_2 . Realize o mesmo processo para encontrar R_3 a partir de R_2 e assim você terá a sequência $\{R_1, R_2, R_3, \dots\}$ a partir da **semente** R_1 . Desse modo, $\{0 \leq R_i \leq (m - 1) : i = 1, 2, 3, \dots\}$ é uma sequência de números inteiros pseudo aleatórios. Para se obter números reais entre zero e 1, devemos apenas dividir cada número por m [43].

Nesse trabalho utilizamos a função `rand48()` que utiliza a recorrência da Equação 3.4 trabalhando com inteiros de 48 bits de tamanho. O valor do módulo m é fixado em 2^{48} e o multiplicador padrão a é dado por 25214903917. O incremento b é 11 [43].

3.3 Princípios da Mecânica Estatística

Antes de aplicar o método de Monte Carlo (descrito de forma geral nas seções anteriores) em sistemas magnéticos de nosso interesse, é preciso que tenhamos alguns conceitos importantes de Mecânica Estatística.

Ela é um ramo da Física Estatística que trata de sistemas físicos com um alto número de constituintes, átomos ou moléculas, analisando o comportamento do conjunto por meio de uma abordagem probabilística. Ela descreve com detalhes seus constituintes e as interações envolvidas, observando a evolução dos estados do sistema como um todo. Um estado, descrito com esse nível de detalhe, é chamado de *estado microscópico*, ao contrário de um *estado macroscópico*, particularmente estudado na *Termodinâmica*. Contudo, a necessidade de uma fundamentação não-empírica desta estimulou o desenvolvimento de uma teoria ou modelo microscópico para prever o macroscópico. O resultado disso foi o melhor entendimento do comportamento irreversível da matéria por meio de formulações determinísticas e reversíveis de seus constituintes.

Porém, o estudo de sistemas com muitas partículas não é trivial. Ele exige a formulação de alguns conceitos. Assim, um sistema mecânico, com muitos graus de liberdade, é completamente descrito pela *função de Hamilton ou Hamiltoniano*, que representa sua energia total segundo os princípios da Mecânica Clássica (ver ref. [44]). O Hamiltoniano pode depender do tempo caso existam variáveis que também dependem explicitamente do tempo, como o campo externo, forças centrais, temperatura e etc. Ele é função das *coordenadas generalizadas* e de seus *momentos conjugados* (ver ref. [41]), escolhidas de forma arbitrária contanto que estas descrevam o sistema completamente com o mínimo necessário de variáveis. Todas estas formam o conhecido *espaço de fase* ou *espaço de configurações*. Pode-se dizer, portanto, que o Hamiltoniano é uma *função de fase* repre-

sentando um ponto no espaço de fase.

Um sistema descrito por essa função de fase pode ser visto como parte de um outro sistema bem maior com o qual troca energia, o chamado **reservatório térmico**. Este é responsável por mudar constantemente o estado do primeiro, entre os estados degenerados de energias representados pelo seu próprio hamiltoniano. Essas energias são determinadas pela temperatura do reservatório, a qual é entendida como uma perturbação no hamiltoniano, levando o sistema de um nível de energia a outro através de uma **dinâmica** intrínseca ao próprio sistema como um todo.

Para melhor entender a dinâmica desses sistemas, analise o seguinte exemplo. Suponha um grande conjunto de moedas lançadas aleatoriamente uma após a outra em um plano repetidas vezes. Analisando somente três destas, existem somente oito possibilidades de estados como mostra a Tabela 1.

























Estados	Configurações			Estados	Configurações		
1				2			
3				4			
5				6			
7				8			

Tabela 1: Tabela de estados de configurações possíveis para o lançamento de três moedas.

A forma da dinâmica dada às moedas nos leva a concluir que cada um dos estados (representando um ponto no espaço de fases) é igualmente provável em qualquer instante de tempo e possivelmente cada um desses estados serão atingidos para longos intervalos de tempo. Um sistema como esse, em que qualquer ponto no espaço de fase, tem a mesma probabilidade de ocorrer e faz parte de um *ensemble microcanônico*, como definido em Mecânica Estatística. Definindo, então, $p_\mu(t)$ como a probabilidade do sistema estar no estado μ em um tempo t , para o caso citado tem-se que

$$p_\mu = \frac{1}{8} \quad (3.5)$$

é constante no tempo, pois os lances são aleatórios e, por isso, cada estado é igualmente

provável. Definindo também $R(\mu \rightarrow \nu)dt$ como a probabilidade de o sistema estar em um estado ν em um tempo dt a partir de um outro μ , sendo $R(\mu \rightarrow \nu)$ definida como a taxa de transição, podemos dizer que o sistema transita de um estado qualquer a outro com uma mesma taxa de transição para este caso. Suponha agora que, em vez de lançá-las, somente se coloque as moedas uma a uma no mesmo plano da forma mais agradável, como por exemplo, todas *cara* ou todas *coroa*. Nesse caso, observa-se que existem estados privilegiados, ou seja, alguns têm mais probabilidade de ocorrer que outros. Em Mecânica Estatística, isso corresponde a um **ensemble canônico**. Supondo também que inicialmente o sistema se encontre em qualquer estado diferente do 1 e 8 da Tabela 1, a dinâmica possuirá diferentes taxas de transição de um estado a outro, e ainda a probabilidade p_μ possuirá diferentes valores para cada estado, que varia no tempo, embora sempre obedeça à condição da Equação 3.6.

$$\sum_{\mu} p_{\mu}(t) = 1 \quad (3.6)$$

Observe que o estado 1 e o 8 são duas configurações igualmente prováveis e quando se alcança qualquer uma destas, o sistema permanece ou muda de tal forma a ficar permutando entre as duas configurações mais agradáveis (note que isso só é possível se não existir uma barreira de energia entre os dois estados mais prováveis). Observe que, dependendo das “interações” do sistema em estudo, a dinâmica interfere nas transições de estado. Então, para essa dinâmica, para tempos longos, $p_1 = p_8 = \frac{1}{2}$ e ainda que $p_{2,3,4,5,6,7} = 0$. Conclui-se, então, que a dinâmica dada ao sistema depende unicamente da natureza do problema.

Contudo, a Mecânica Estatística trata de sistemas mais complexos que esse, com bem mais estados, embora possua boa semelhança. Por isso, para descrever melhor tais sistemas é preciso representá-los através da chamada **Equação Mestra**, Eq. 3.7,

$$\frac{dp_{\mu}(t)}{dt} = \sum_{\nu} [p_{\nu}(t)R(\nu \rightarrow \mu) - p_{\mu}(t)R(\mu \rightarrow \nu)], \quad (3.7)$$

que representa a evolução temporal da distribuição de probabilidade p_{μ} em termos das taxas de transições $R(\mu \rightarrow \nu)$ para cada um dos estados representados por μ . Note que ela é a diferença entre a taxa com que o sistema passa para o estado μ e a taxa com que ele sai do mesmo, para todos os outros estados ν do sistema.

Assim, para se obter as propriedades macroscópicas do sistema, deve-se conhecer toda a distribuição de probabilidade $p_{\mu}(t)$. E, se estamos interessados na medida de uma

grandeza G , por exemplo, seu valor esperado deve ser obtido a partir da equação

$$\langle G \rangle (t) = \sum_{\mu} G_{\mu} p_{\mu}(t), \quad (3.8)$$

sendo G_{μ} o valor da grandeza medido quando o sistema se encontrar no estado μ .

No exemplo anterior das moedas percebe-se que, dependendo do problema, é possível ter um conjunto de estados relevantes pelos quais o sistema transita. Para sistemas mais complexos, como o estudado no presente trabalho, tem-se um conjunto muito grande de estados significantes para a obtenção da medida aproximada de G . Por isso, deve-se atentar para três pontos importantes relativo à interpretação da Equação 3.8 e à forma de como se obtém as propriedades de interesse. O primeiro, é que podese medir o valor da grandeza G para um grande número de cópias do sistema, que transita de um estado para outro, em todo o tempo t e, em seguida, calcular a média da quantidade G , obtendo seu valor instantâneo. Dessa forma, obtém-se um valor de $\langle G \rangle (t)$ tão preciso quanto maior for o número de cópias. Outra forma, mais próxima de um experimento real, é observar somente um sistema, como ocorre na realidade, e obter medidas de G no tempo, fazendo uma média durante um período de tempo da quantidade de interesse. O maior problema desse segundo método é que não temos uma garantia de que esse sistema percorra todos os estados significantes para uma boa estimativa de G se o sistema possuir uma quantidade infinitamente grande de estados. O período de tempo e a dinâmica a qual submetemos o sistema são determinantes para uma estimativa razoável de $\langle G \rangle (t)$. O terceiro e último ponto, de fundamental importância para esse trabalho, é que, como a distribuição de probabilidades $p_{\mu}(t)$ pode variar no tempo, é possível ter duas situações para o sistema dinâmico. Ele pode se encontrar em um estado de equilíbrio ou de não-equilíbrio.

Claramente, percebe-se que existe uma situação de equilíbrio no exemplo das três moedas. Quando o sistema alcança seus estados preferidos ele permanece em um dos estados ou transita entre estes até que seja perturbado para um nível mais energético. Note que, na primeira dinâmica em que as moedas são lançadas aleatoriamente, todos os 8 estados são igualmente prováveis e, portanto, o sistema sempre estará em equilíbrio e a probabilidade de se encontrar o sistema em determinado estado é constante no tempo. Na situação seguinte, na qual se prefere o estado em que as moedas estejam igualmente dispostas, estados 1 e 8 da tabela, o sistema transita por estados intermediários até encontrar os estados preferidos e permanecer neles durante todo o resto do tempo, ou seja, ele entra em equilíbrio assim que encontra os estados preferidos após um determinado período de tempo, denominado o **tempo de relaxação**. Portanto, o que determina o

estado de equilíbrio do sistema é a constância da distribuição de probabilidades, ou seja, quando todos os termos do lado direito da Equação 3.7 se anulam.

Em 1902 Gibbs mostrou que um sistema em equilíbrio em um reservatório térmico a uma temperatura T , possui uma **distribuição de probabilidades de Boltzmann** [1]

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-E_\mu/k_B T}, \quad (3.9)$$

onde E_μ é a energia do estado μ e k_B é a constante de Boltzmann, sendo Z a **função de partição**, dada por

$$Z = \sum_\mu e^{-E_\mu/k_B T} = \sum_\mu e^{-\beta E_\mu}, \quad (3.10)$$

onde $\beta = (k_B T)^{-1}$.

Com isso, pode-se obter o valor da grandeza $\langle G \rangle$ para sistemas em equilíbrio a partir das Equações 3.8 e 3.9, o que resultaria na Equação

$$\langle G \rangle = \frac{1}{Z} \sum_\mu G_\mu e^{-E_\mu/k_B T}. \quad (3.11)$$

A energia interna do sistema também pode ser obtida a partir do valor esperado da energia, $\langle E \rangle$, da seguinte maneira

$$U = \frac{1}{Z} \sum_\mu E_\mu e^{-E_\mu/k_B T} = \frac{1}{Z} \sum_\mu E_\mu e^{-\beta E_\mu}. \quad (3.12)$$

Também que, da Equação 3.10 e 3.12, tem-se

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_\mu e^{-\beta E_\mu} = - \sum_\mu E_\mu e^{-\beta E_\mu} = -ZU, \quad (3.13)$$

ou seja,

$$U = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta}. \quad (3.14)$$

O calor específico é obtido por meio da derivação da energia interna U , assim:

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial U}{\partial \beta} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial \beta}. \quad (3.15)$$

Logo, da Equação 3.14, conclui-se que

$$C = k_B \beta^2 \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2}. \quad (3.16)$$

Sabendo, pela teoria Termodinâmica, que o calor específico se relaciona com a entropia

pela Equação

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = T \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial S}{\partial \beta} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta}. \quad (3.17)$$

Logo, igualando as Equações 3.16 e 3.17 e integrando com respeito a β , tem-se

$$S = -k_B \beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} + k_B \log Z. \quad (3.18)$$

Em fim, pode-se ainda obter a energia livre $F = U - TS = -k_B T \log Z$. Desse modo, obtém-se todas as propriedades termodinâmicas a partir da função de partição, ou melhor, das características microscópicas do sistema em contato com o reservatório térmico. Outro resultado muito importante, é que é possível obter, a partir da energia livre F , outras propriedades interessantes como a magnetização, dada pela derivação da energia livre com respeito ao campo, $\frac{\partial F}{\partial B}$. No entanto, a magnetização pode ser obtida diretamente da simulação como será apresentado nos modelos de Ising e 2DXY nas seções subsequentes.

Uma característica peculiar que merece atenção em sistemas termodinâmicos são as flutuações. Veja, por exemplo, o significado do desvio padrão médio quadrado da energia,

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 &= \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu}^2 e^{-\beta E_{\mu}} - \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right]^2 \\ &= \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right]^2 \\ &= \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Assim, obtém-se a seguinte expressão

$$C = k_B \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (3.20)$$

Observe que este resultado mostra o calor específico como função dos valores esperados da energia e do quadrado dela, os quais mais uma vez, dependem somente dos microestados que a Termodinâmica Clássica não tem informações detalhadas.

Em simulações de Monte Carlo, busca-se sempre a melhor aproximação com a realidade, que possui sistemas físicos muito extensos. Além da dificuldade de simular estes, muitas grandezas, como as que foram obtidas nesta seção, dependem do seu volume ou da quantidade de partículas envolvidas. Portanto, é conveniente utilizar sempre as grandezas extensivas, ou seja, que não dependem do seu volume (ou número de partículas), quando este tende para um valor muito grande ($V \rightarrow \infty$ ou $N \rightarrow \infty$). Estas condições são

comumente chamadas de **limite termodinâmico**, e representam, em geral, os sistemas físicos reais. Outra dificuldade quando se trata de se estimar o valor de uma grandeza G qualquer, como na Equação 3.11, em uma simulação de Monte Carlo de sistemas com muitas partículas, é que levaríamos um tempo muito longo para obter todas as amostras mais relevantes para uma boa estimativa de G . No caso do problema das três moedas, utilizamos somente três partículas totalizando apenas $2^3 = 8$ estados. Se por acaso estudássemos um conjunto de 6.02×10^{23} moedas, teríamos mais de $2^{10^{23}}$ estados. Esse valor é comum quando estudamos sistemas magnéticos, gás em um container, e outros sistemas em Física da Matéria Condensada. Então, uma dinâmica dada a um sistema com essa quantidade de configurações certamente levaria um tempo muito longo para alcançar seus dois estados preferidos. E ainda, se tivéssemos um conjunto de estados preferidos bem maior que dois, como é o caso de sistemas perturbados ou em contato com um reservatório térmico em altas temperaturas, o que garantiria que, na dinâmica escolhida, o sistema passaria por todos esses estados preferidos do sistema para obter uma estimativa razoável da grandeza G através da Equação 3.11? Para resolver esse problema, deve-se primeiro ter a consciência de que apenas é possível obter uma amostragem muito pequena em relação à quantidade de estados envolvida. Com isso, o que tem q ser feito é selecionar as amostras de estados que possuem o maior peso na estimativa da grandeza G e descartar as demais. Então, quais são os estados do sistema mais prováveis com os quais serão obtidas as propriedades de interesse? A resposta está na Equação 3.11. Observe que os estados mais energéticos para uma temperatura finita menos contribuem na soma. Para baixas temperaturas o sistema é pouco perturbado e possui uma pequena quantidade de estados mais prováveis, os quais possuem um peso muito grande em relação aos outros. Logo, é possível considerar apenas os estados mais prováveis segundo o peso de Boltzmann da Equação 3.9, medindo a quantidade de interesse através de uma média em M estados com maior probabilidade. Isso é representado pela Equação a seguir.

$$\langle G \rangle = \frac{1}{M} \sum_{\mu} G_{\mu}. \quad (3.21)$$

Agora, o que necessita-se pensar é em como fazer o sistema transitar entre os estados mais relevantes. Para isso, não se pode simplesmente escolher os estados de forma aleatória aceitando ou rejeitando eles com a probabilidade de Boltzmann. O que é preciso fazer é exatamente utilizar o **Processo de Markov**. Este, consiste em uma ferramenta matemática, na qual pode-se gerar sucessivos estados independentes do estado anterior. Se, por exemplo, o sistema estiver em um estado μ , é possível gerar outro ν diferente e

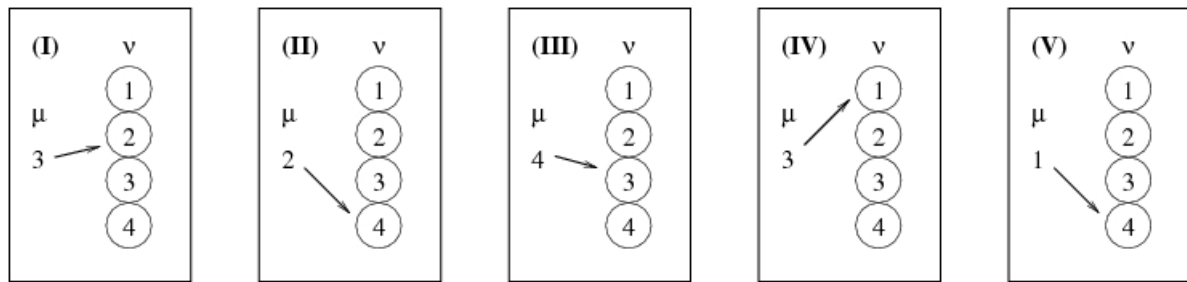


Figura 16: Cinco sucessivos processos de Markov, formando uma Cadeia de Markov de estados. Temos um sistema com apenas quatro estados e inicialmente ele se encontra no estado $\mu = 3$, e a partir deste escolhemos aleatoriamente um novo estado ν seguindo as condições do processo de Markov.

independente de μ , e ainda que a **probabilidade de transição** $P(\mu \rightarrow \nu)$ deve satisfazer

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1. \quad (3.22)$$

Além disso, $P(\mu \rightarrow \nu)$ não muda com o tempo e deve depender somente dos estados μ e ν . A forma pela qual gera-se o novo estado, deve ser, portanto, aleatória. Note que $P(\mu \rightarrow \mu)$, que significa a probabilidade de transição de o sistema permanecer no mesmo estado μ , não pode ser zero.

Em simulação de Monte Carlo usa-se o processo de Markov N_p vezes para gerar uma **Cadeia de Markov**. A Figura 16 mostra um exemplo dessa cadeia de um sistema com apenas quatro estados.

Construir uma cadeia de Markov não é suficiente para encontrar os estados mais relevantes. É preciso impor duas condições importantes para isso. A primeira é a condição de **ergodicidade**. Ela deve garantir que qualquer estado do espaço de fase pode ser alcançado a partir de outro qualquer. Essa condição deve ser satisfeita, pois precisa-se ter certeza de que todos os estados são acessíveis na formação da cadeia de Markov. Para isso, deve-se apenas ser cuidadoso ao usar a distribuição de probabilidade de Boltzmann corretamente. A quantidade p_{ν} , da Equação 3.9, portanto, não pode assumir o valor zero para nenhum estado ν . Contudo, na prática, os algoritmos para simulações de Monte Carlo consideram grande parte das probabilidades de transição iguais a zero, mas mesmo assim não violam a ergodicidade¹. A segunda é a condição de **equilíbrio**. Ela deriva da

¹Os algoritmos selecionam os estados com maior peso de Boltzmann, realiza as medidas da grandeza de interesse e calcula a média aritmética destas, significando que o resultado é uma aproximação, pois descarta muitos estados acessíveis, porém com um peso desprezível.

Equação Mestra 3.7 e é representada matematicamente pela equação [1]

$$p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) = p_\mu P(\mu \rightarrow \nu). \quad (3.23)$$

Assim, como pretende-se que a distribuição de equilíbrio seja a distribuição de Boltzmann, pode-se escrever

$$\frac{p_\nu}{p_\mu} = \frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (3.24)$$

Nessas condições, agora faz-se-á a escolha conveniente para a distribuição de probabilidades $P(\mu \rightarrow \nu)$ que deve satisfazer as Equações 3.22 e 3.24. Feito isso, só nos resta desenvolver um algoritmo que implemente a criação da cadeia de markov de estados, obedecendo a condição de ergodicidade. Em seguida, esperar que o sistema alcance o equilíbrio de forma que a distribuição de probabilidades de estados ω_μ , da Equação 3.7 seja uma distribuição de Boltzmann. Passado esse tempo podemos calcular o valor médio da grandeza G da Equação 3.21.

3.4 O Algoritmo de Metrópolis

Agora a pergunta é: Qual a melhor escolha de $P(\mu \rightarrow \nu)$? Primeiramente, vamos escrever essa probabilidade de transição como o produto de duas outras, $g(\mu \rightarrow \nu)$ que é a probabilidade de gerar um novo estado ν quando o sistema se encontra em μ , e $A(\mu \rightarrow \nu)$ que é a probabilidade de aceitar ou não o novo estado. Essas probabilidades foram denominadas de **probabilidade de seleção** e **taxa de aceitação**, e podem assumir qualquer valor entre zero e um. Se $P(\mu \rightarrow \mu) = 1$ ou $P(\mu \rightarrow \nu) = 0$ para qualquer ν , significa que o sistema sempre estará no estado μ .

Desse ponto de vista, em vez de escolhermos a distribuição $P(\mu \rightarrow \nu)$, agora escolheremos uma probabilidade de seleção $g(\mu \rightarrow \nu)$, uma para cada possível transição de um estado para outro, e em seguida escolheremos a taxa de aceitação $A(\mu \rightarrow \nu)$ que satisfazem a condição de equilíbrio da Equação 3.24. Podemos agora criar um algoritmo que repetidamente escolhe um novo estado ν e o aceita ou rejeita de acordo com a probabilidade de aceitação. Se o estado for aceito o sistema muda para esse novo estado, caso contrário ele permanece no mesmo e o processo se repete em um número suficientemente grande.

Em 1953, Nicolas Metropolis desenvolveu um algoritmo, que ganhou seu nome, no qual a seleção de probabilidades $g(\mu \rightarrow \nu)$ para cada estado possível eram todos iguais e

que a probabilidade de aceitação era tal que

$$A(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, \quad (3.25)$$

se $E_\nu - E_\mu > 0$, caso contrário $A(\mu \rightarrow \nu) = 1$. Isso significa que para $E_\nu < E_\mu$ o novo estado sempre será aceito e se $E_\nu > E_\mu$ existe uma probabilidade dada por $e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$ de estado gerado ser aceito.

4 *Resultados e Discussões*

4.1 Introdução

Neste capítulo vamos apresentar nossos resultados e discussões a respeito das simulações de Monte Carlo de sistemas magnéticos (ferromagnéticos e com interface FM/AFM) bidimensionais. Verificaremos primeiramente os resultados para o modelo de Ising de sistemas ferromagnéticos, com o objetivo de mostrar os detalhes da aplicação do método, como os procedimentos, com os devidos cuidados, as dificuldades e as vantagens e desvantagens. Os resultados podem então ser comparados com outros encontrados na literatura.

Consciente do procedimento geral da simulação de MC, podemos então aplicar em um modelo um pouco mais complexo com espectro contínuo de energia, o Modelo 2DXY. Mostraremos a transição de fase de sistemas ferromagnéticos, bem como a dependência da magnetização com o campo magnético externo. Esses resultados podem ser comparados com os obtidos no modelo de Ising e então fazer uma nova análise em cima do MMC quando aplicados em modelos com mais graus de liberdade.

Por fim, vamos modelar um material com a interface FM/AFM, buscando as condições necessárias para a ocorrência do **exchange bias**. Vamos apresentar os resultados experimentais e teóricos obtidos na literatura, para justificar os parâmetros e condições impostas ao sistema em questão.

4.2 Modelo de Ising

O modelo de Ising é o modelo mais simples e por isso o mais estudado na Mecânica Estatística. Ele representa um magneto no qual os spins σ_i estão fixos nos sítios i de uma determinada rede. Em nosso caso, vamos considerar uma rede quadrada ($L \times L$) em duas dimensões. Cada dipolo dela pode possuir apenas dois valores $+1$ e -1 , representando a

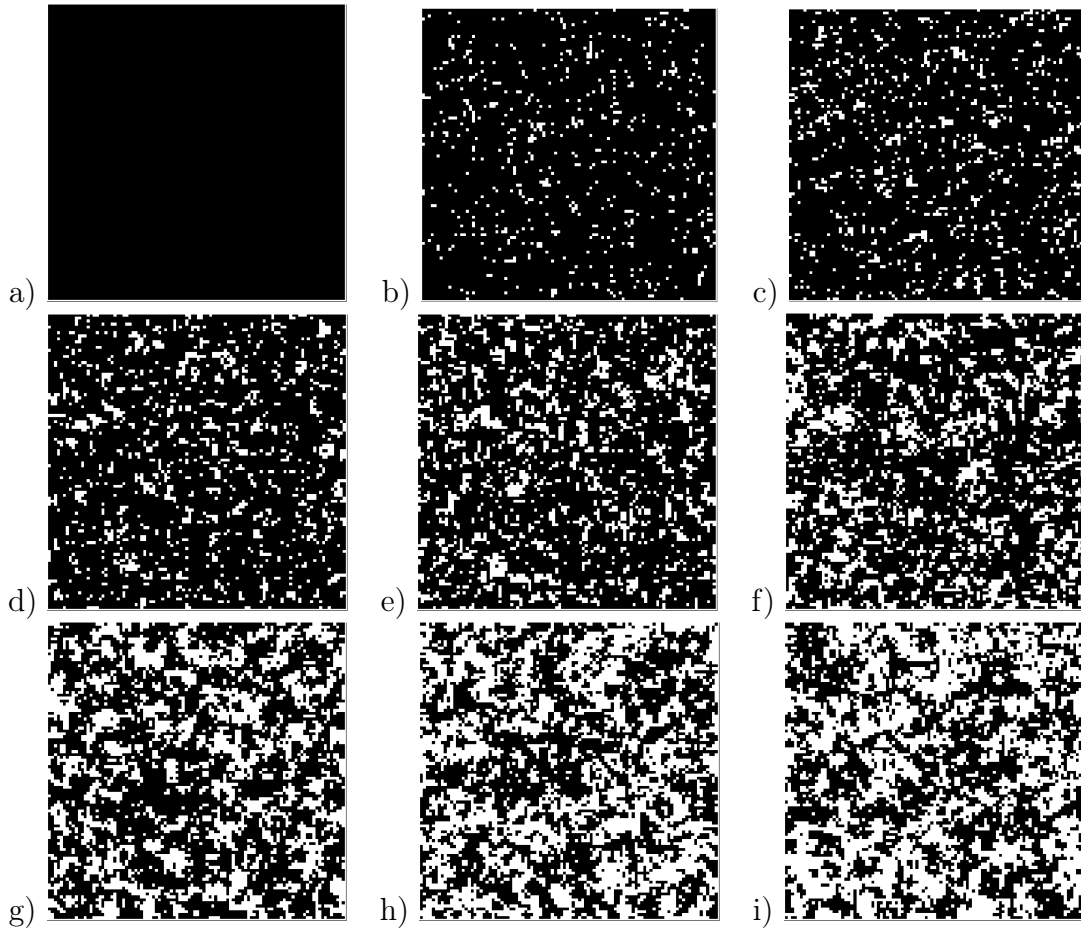


Figura 17: Configurações sucessivas de spins de uma rede quadrada 100 X 100 no modelo de Ising com condições periódicas de contorno para 0, 1, 2, 4, 8, 16, 32 e 64 passos de Monte Carlo em somente uma realização. A constante de troca $J = 1$ e temos um exemplo de relaxamento com $k_B T = 3.0$ onde inicializamos com todos os spins para cima. Os pontos brancos representa os spins com $\sigma_i = -1$ e os pretos $\sigma_i = +1$

componente do momento atômico ou molecular na direção do eixo de fácil magnetização do sistema. Desse modo, este possui 2^N estados, onde N é o número total de sítios. A energia, portanto, de qualquer estado particular destes pode ser extraída diretamente do Hamiltoniano de Ising \mathcal{H} , dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i \quad (4.1)$$

onde J é a energia de troca entre os spins vizinhos mais próximos $\langle i, j \rangle$, e H é a intensidade do campo magnético externo. Para $J > 0$, temos um sistema com ordenamento ferromagnético e antierromagnético para $J < 0$.

Através de simulação numérica com o Algoritmo de Metrópolis, vamos analisar as propriedades de equilíbrio, inicialmente para o caso simples de um único domínio ferromagné-

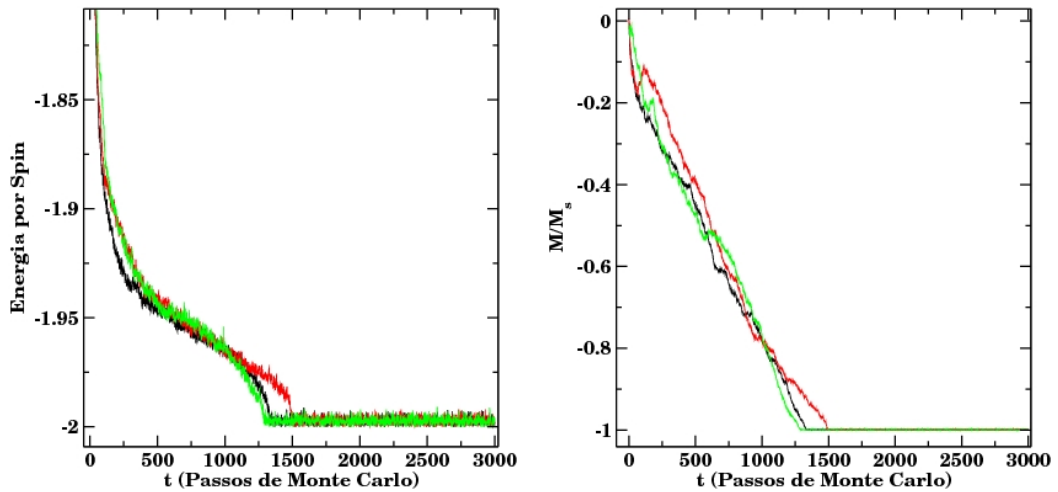


Figura 18: Energia (à esquerda) e magnetização (à direita) por spin no modelo de Ising 2D, com $L = 100$ e $J = 1$. Cada uma das curvas representa uma simulação com semente diferente uma da outra. A simulação iniciou com uma configuração em altas temperaturas e relaxou para até o equilíbrio, com $T = 1.0J/k_B$, depois de aproximadamente 1500 passos de Monte Carlo.

tico na ausência de campo externo. Utilizamos para isso uma dinâmica de *single-spin-flip*, na qual viramos um spin por passo na simulação de Monte Carlo.

Sabemos que o sistema só entra em equilíbrio depois de um determinado número e passos durante a simulação, denominado tempo de relaxamento τ . A Figura 17 mostra a configuração dos spins para o modelo bidimensional de Ising para sucessivos passos de Monte Carlo por sítio. O exemplo mostra o resultado de uma rede 100×100 com $J = 1$ e a uma temperatura fixa, $k_B T = 3.0J$. Observe também que a configuração inicial escolhida para esse caso, foi a que possui todos os spins para cima, ou seja, um estado fundamental em que $k_B T = 0.0J$. No entanto, a partir dessa figura fica impossível verificarmos o tempo de relaxamento. Para isso, devemos verificar a magnetização e a energia com respeito ao tempo de Monte Carlo, exatamente como mostra a Figura 18.

A Figura 18 mostra a energia e a magnetização por spin com respeito ao número de passos de Monte Carlo para três sementes distintas. Podemos observar claramente que o equilíbrio é alcançado depois de aproximadamente 1500 passos de Monte Carlo para a temperatura de $1.0k_B T/J$. No entanto, isso pode mudar de acordo com a semente, configuração inicial que inserimos na simulação e ainda quando a temperatura do sistema muda.

Um outro exemplo é mostrado na Figura 19, onde podemos verificar que o sistema relaxa em quase 5000 passos para $k_B T = 2.0$. É bem verdade que é possível que o sistema

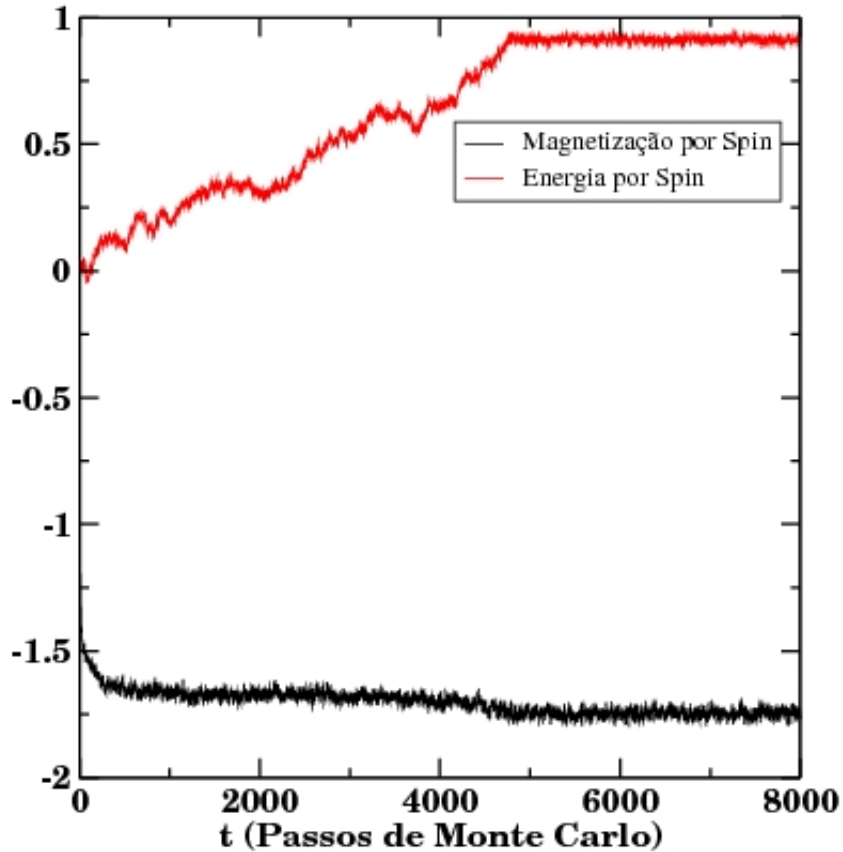


Figura 19: Energia (em preto) e magnetização (em vermelho) por spin no modelo de Ising 2D, com $L = 100$ e $J = 1$. Nesse caso temos uma temperatura de $2.0J/k_B$ e o sistema alcança o equilíbrio depois de aproximadamente 5000 passos.

relaxe para quantidades maiores ou menores, logo é preciso sempre verificar se o sistema alcançou o equilíbrio ou escolher um tempo suficientemente longo de forma que o sistema sempre relaxe para qualquer valor de temperatura. Uma outra alternativa é se o sistema não for muito complexo, e por isso já se tiver uma idéia da configuração de equilíbrio, podemos usá-la como inicialização. Porém, é preciso ter certeza que esta não seja correspondente a um mínimo local. Isso minimiza o tempo de relaxamento para temperaturas longe de T_c , diminuindo o tempo de simulação e ainda garantindo que o sistema alcance o equilíbrio. Quando não temos a mínima noção da configuração de equilíbrio, o ideal é que inicializemos uma configuração escolhida aleatoriamente, correspondendo a $T = \infty$.

Uma outra preocupação que tivemos foi na quantidade de passos que devemos escolher depois do relaxamento. A resposta para isso está na Equação 3.21. Devemos entender que o método é uma aproximação, como foi bem colocado no Capítulo 3 e, por isso, quanto mais passos colocarmos melhor será nosso resultado, pois estaremos fazendo médias da quantidade através de quase todas as configurações relevantes para o correspondente es-

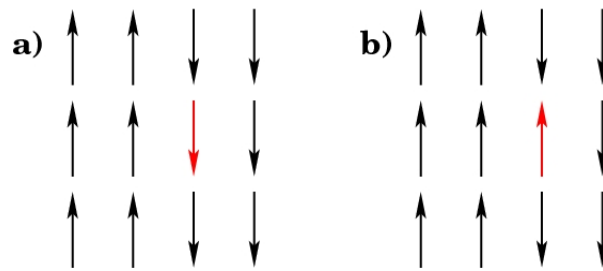


Figura 20: Configuração de spins em estado de domínio. A figura a direita representa uma configuração de equilíbrio enquanto que a outra b) se encontra em um estado mais energético que a primeira, e portanto, não representaria uma configuração de equilíbrio em uma temperatura suficientemente baixa.

tado de equilíbrio. Para o modelo de Ising de sistemas ferromagnéticos simples podemos ter um ótimo resultado com 20000 passos de Monte Carlo. Mas para sistemas com interfaces FM/AFM ou apenas no modelo 2DXY é preciso que utilizemos uma quantidade bem maior de passos devido a complexidade do espectro de energia ou do número de graus de liberdade intrínseco ao modelo.

É importante colocar que cada realização que fazemos para o sistema em questão, estamos em busca de um equilíbrio correspondente a um mínimo global de energia livre. É muito comum nas simulações que o sistema fique por um tempo infinitamente longo em um mínimo local. Estes estados são caracterizados pela presença de paredes de domínio (ver Figura 20 ou mesmo a Figura 2 na página 20 para o modelo 2DXY). No Modelo 2DXY, além dos domínios, podemos encontrar vórtices, que também aumentam a energia de troca do sistema, mantendo-o por algum tempo em um estado metaestável. Veja na Figura 21 o exemplo de um sistema com vórtices e anti-vórtices.

Quando o sistema relaxa para um estado de domínio, temos uma situação na qual é preciso uma perturbação muito grande (um campo forte ou o aumento de temperatura) para conseguir virar todo um domínio, de forma que todos os spins fiquem alinhados. Em baixas temperaturas, ou seja, com perturbações mínimas, se virarmos um único spin, como o spin em vermelho da Figura 20, a energia aumenta e é pouco provável que o sistema não se mantenha na configuração dada pela Figura 20b e volte para a configuração da Figura 20a. Porém, esse é um fenômeno que pode ocorrer em qualquer modelo de spins e terá uma importância quando discutirmos os outros modelos no decorrer deste trabalho.

Sabendo o tempo de relaxamento para cada valor de temperatura podemos então traçar a curva de magnetização e energia média por spin diretamente da configuração de spins, e o calor específico, de acordo com a Equação 3.20. A Figura 22a mostra o

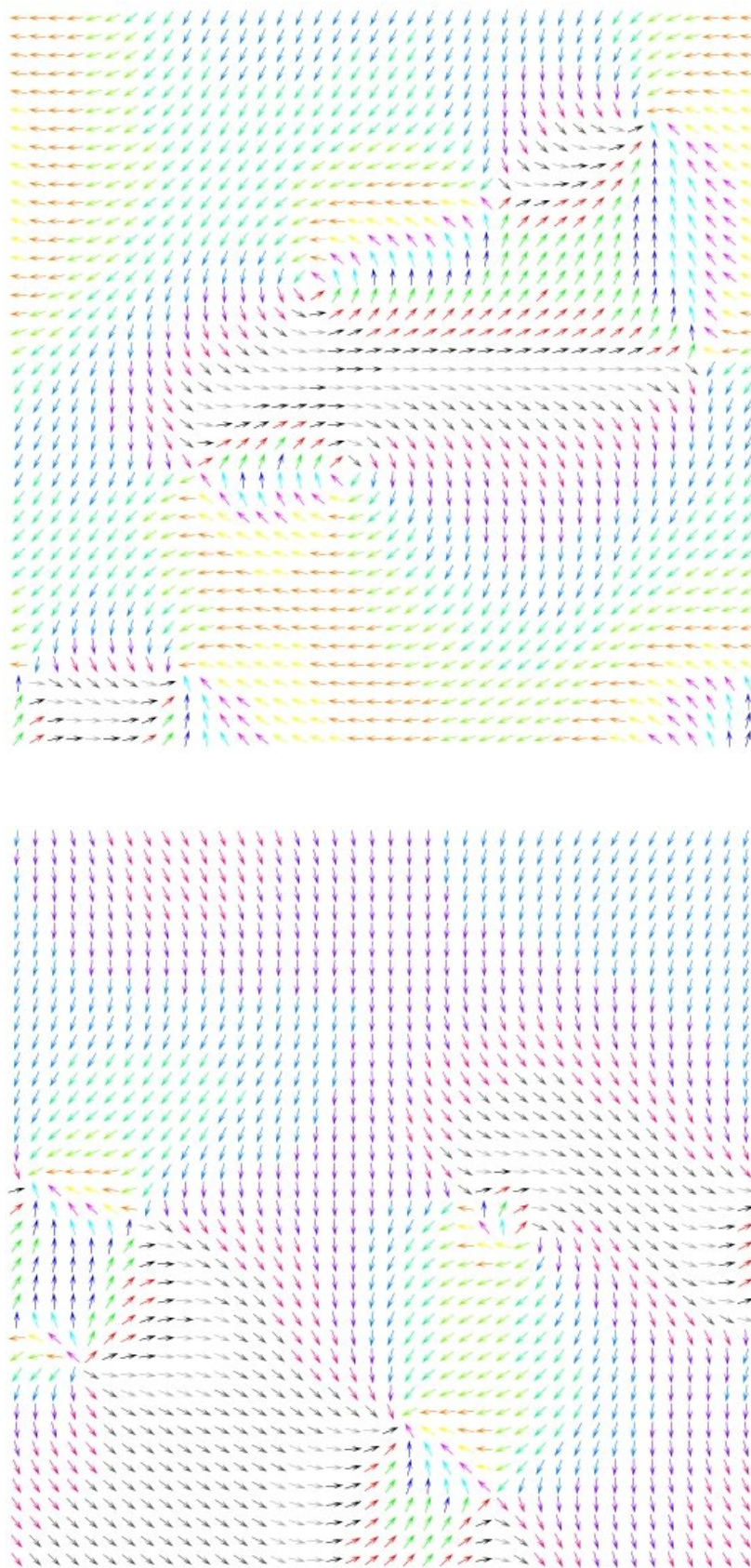


Figura 21: Configuração de spins em estado de domínio com vórtices no Modelo 2DXY.

resultado para uma rede muito pequena com $L = 8$ e condições periódicas de contorno, a qual não representa o limite termodinâmico, e fica evidente o efeito de tamanho finito, pois a magnetização não vai a zero rapidamente. Contudo, as simulações para redes 100×100 , encontramos um resultado razoável, mais próximo do limite termodinâmico. A Figura 22b Mostra esse resultado. Observe que existe uma pequena flutuação na temperatura de transição. Esse comportamento é normal e pode ser minimizado se simularmos redes maiores. Uma outra alternativa é realizar a simulação mais de uma vez e fazer médias das curvas. Esse procedimento foi utilizado na construção da Figura 22a, pois temos uma rede muito pequena, enquanto que para a redes com $L \geq 100$ não foi necessário, pois, com uma única realização, encontramos um resultado satisfatório para estimar T_C e comparar com os resultados da literatura.

Todos esses resultados são facilmente encontrados na literatura. Para o objetivo desse trabalho, a reprodução deles, apenas servem para detalhar a implementação do Método de Monte Carlo com o Algoritmo de Metropolis em uma dinâmica de *single-spin-flip*. Resumindo, é extremamente recomendável tomar todos os cuidados citados, principalmente em sistemas mais complexos. Como comentamos nesta Seção, e veremos na próxima, existem algumas diferenças peculiares quando aplicamos o método ao Modelo 2DXY e em sistemas com um espectro de energia mais complicado como exemplo o que apresenta interface FM/AFM.

4.3 Modelo 2DXY

Na Seção anterior vimos que, sempre ao simular um sistema magnético qualquer, devemos nos preocupar com a dinâmica, a configuração inicial que escolhemos, o tempo de relaxamento e, por fim, o tempo necessário para se medir as grandezas de interesse com boa precisão. No entanto, vimos apenas para o modelo de Ising 2D, muito simples e bastante estudado. Agora, veremos a implementação do método de Monte Carlo no modelo apresentado nesse trabalho como 2DXY.

A sua diferença com o modelo de Ising é que, em vez de termos os momentos como escalares os veremos como vetores de duas componentes de spin. Diferente do modelo de Ising, que representaria sistemas com um certo tipo forte de anisotropia uniaxial, o Modelo 2DXY pode representar sistemas com dois eixos de fácil magnetização. Os spins, portanto, podem ser representados por suas componentes s^x e s^y , onde $s^2 \equiv (s^x)^2 + (s^y)^2$, ou apenas por um ângulo $\theta = \arctan(s^y/s^x)$, onde $0 \leq \theta \leq 2\pi$. O hamiltoniano nesse

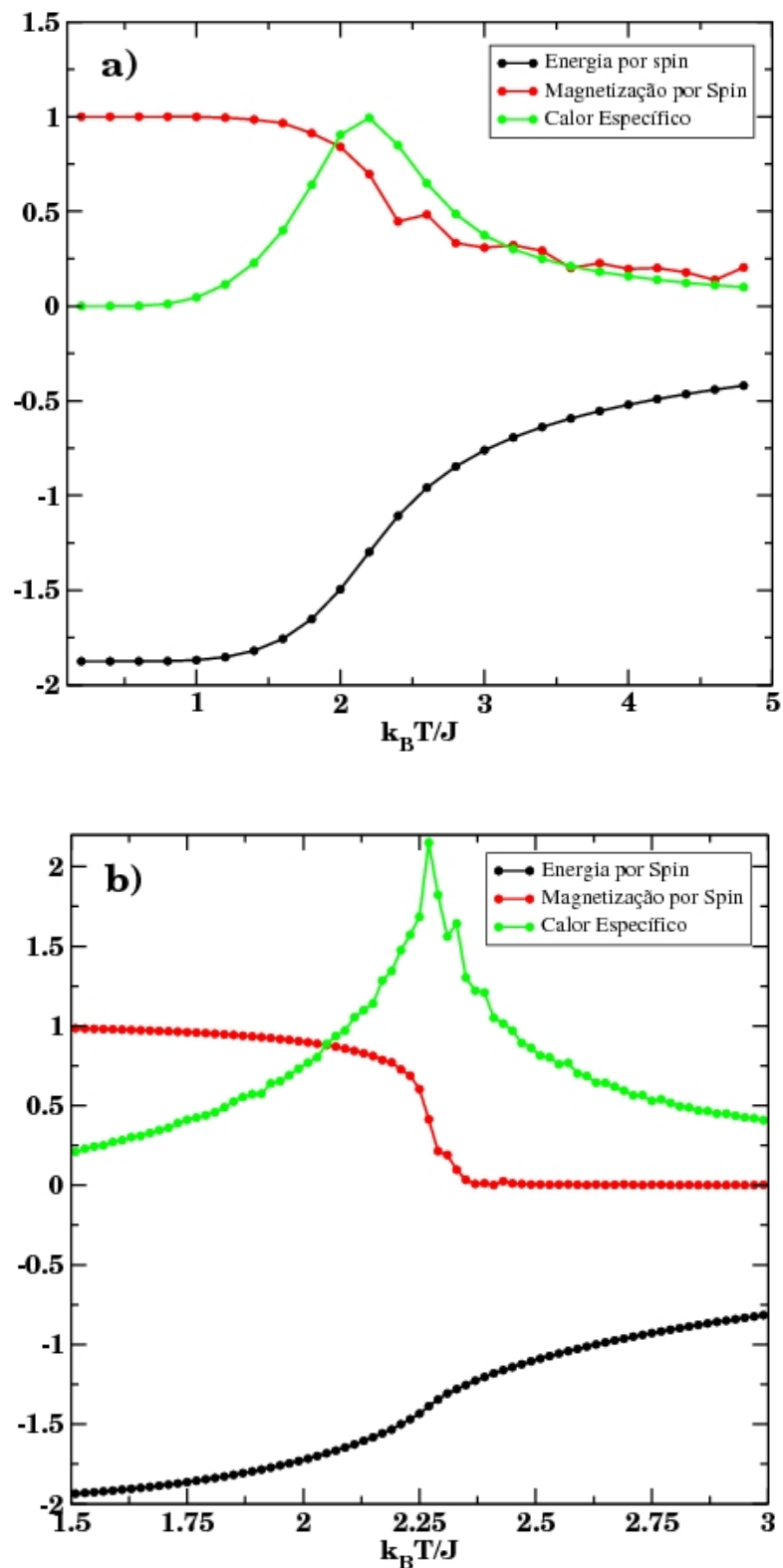


Figura 22: Magnetização e energia por spin, e o calor específico como funções da temperatura, a) para uma rede quadrada de spins 8 X 8 e b) 100 X 100, respectivamente, no Modelo de Ising.

modelo é, portanto, dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - H_x \sum_i s_i^x \quad (4.2)$$

onde J é a constante de troca e H_x é a intensidade da componente do campo magnético na direção do eixo-x. Classicamente, esse hamiltoniano pode ser reescrito da forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - H_x \sum_i \cos(\theta_i) \quad (4.3)$$

Um primeiro comentário a ser feito é que esse modelo tem um espectro contínuo de energia, sendo um valor real entre a energia do estado fundamental e do estado mais excitado. Isso deve-se ao fato de os spins, como foi descrito, serem representados por valores em intervalos contínuos. O ângulo θ pode ser qualquer valor real entre zero e 2π . Isso gera várias implicações. Uma delas é o sistema possuir um número infinito de estados, dificultando o relaxamento para o estado de equilíbrio. Além disso, este também possui um espectro contínuo de estados degenerados. O estado fundamental de um ferromagneto isotrópico em campo nulo, por exemplo, tem os spins todos alinhados em uma direção qualquer, ou seja, todos alinhados para cima, baixo, direita, esquerda ou qualquer outra direção estão em um mesmo estado degenerado de energia.

No modelo de Ising, um estado metaestável, em baixas temperaturas, por exemplo, pode ser causado pelo surgimento de uma parede de domínio horizontal ou vertical, mas no modelo 2DXY para um ferromagneto, além de uma infinidade de possibilidades para as paredes, pode apresentar vórtices quando o sistema é isotrópico e não está sujeito a campos externos (veja as Figuras 2 e 20). Essa é outra dificuldade que devemos enfrentar nas simulações de Monte Carlo aplicado ao modelo 2DXY nessas condições.

Contudo, o procedimento realizado no modelo de Ising não muda quando aplicamos ao 2DXY. Devemos portanto escolher a melhor configuração inicial de spins. Pelo fato da existência de infinitos estados de mais baixa energia e de uma quantidade de estados metaestáveis muito maior que o modelo de Ising, devemos ser mais cautelosos ainda quanto a escolha inicial da configuração do sistema. O critério para a escolha depende do que queremos estudar. Por exemplo, se estamos interessados na transição de fase de um *single-domain* ferromagnético isotrópico na ausência de campo externo para a fase paramagnética, é sim conveniente escolhermos uma inicialização onde todos os spins estão alinhados em uma direção qualquer escolhida aleatoriamente. A Figura 23 mostra o relaxamento nesse caso para dois valores de temperatura, onde podemos perceber que o

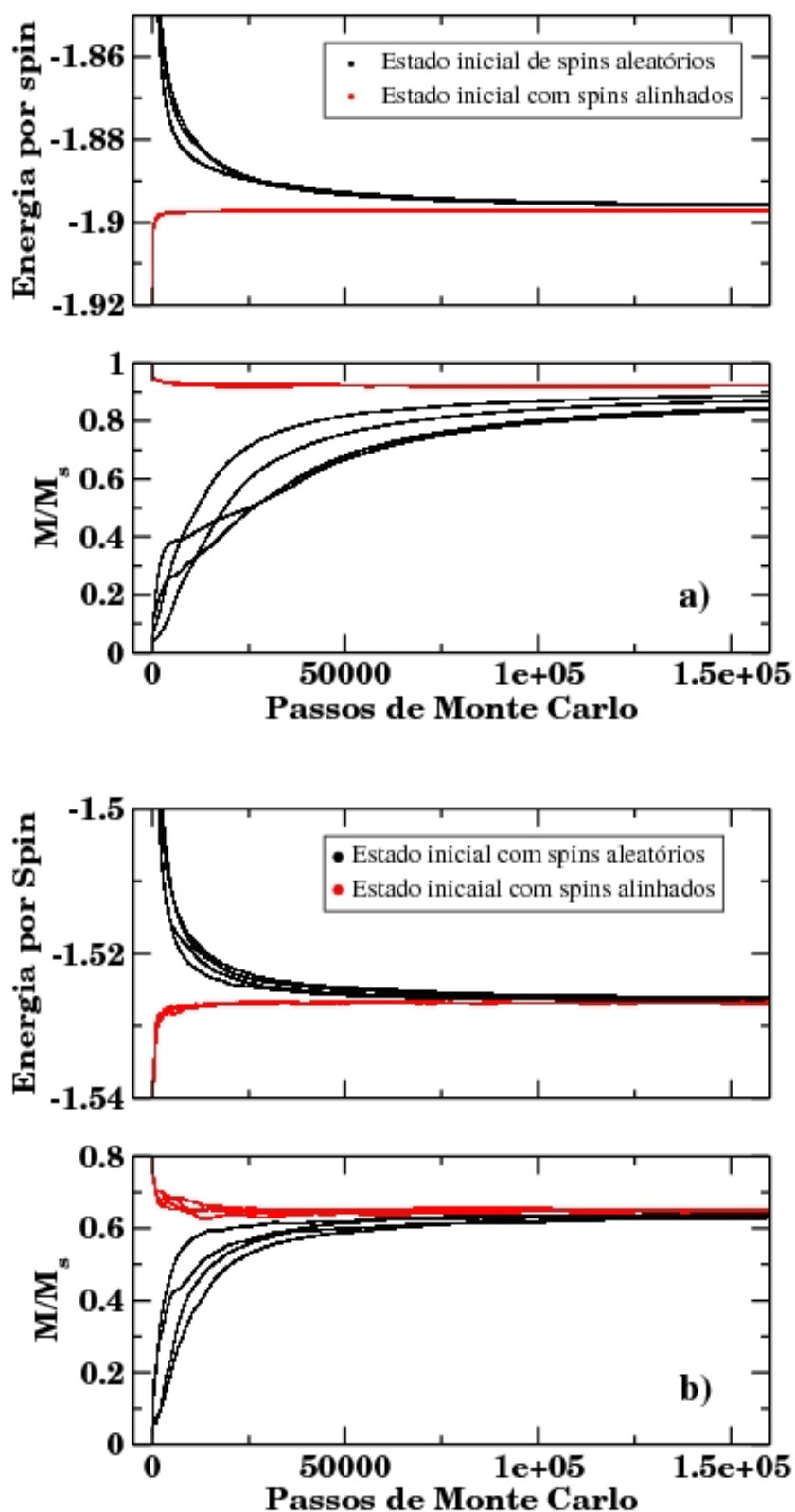


Figura 23: Energia e magnetização por spin para quatro sementes distintas e duas inicializações. Temos um sistema ferromagnético isotrópico em campo nulo. As curvas pretas inicializaram com uma configuração em que os spins têm direções aleatórias e as vermelhas com spins todos alinhados em uma mesma direção. Em a) temos uma temperatura $T = 0.2J/k_B$ e em b) a temperatura é $T = 0.8J/k_B$.

equilíbrio é mais rapidamente alcançado quando iniciamos com uma configuração de spins que possuem uma mesma direção e sentido (curvas vermelhas na Figura 23). Observe também que para $k_B T = 0.2J$ o sistema tem mais dificuldade de alcançar o equilíbrio (ou não alcança) se iniciado com uma configuração aleatória ($T = \infty$) do que quando o sistema relaxa em $k_B T = 0.8J$. Isso pode ser devido a existência de paredes ou mais provavelmente de vórtices pois o meio é isotrópico. Entretanto se esse mesmo sistema for relaxado na presença de um campo magnético externo o tempo de relaxamento diminui consideravelmente como na Figura 24. Observemos que em torno de 10000 passos temos um equilíbrio sem vórtices ou domínios. O campo por menor que seja inibe o surgimento dos vórtices fazendo o sistema alcançar o equilíbrio mais rapidamente.

Se acrescentarmos uma anisotropia, a direção que deveríamos escolher para inicializar esse sistema é a de fácil magnetização ou se a amostra está sujeita a campos podemos colocar os spins paralelo ao mesmo. Entretanto, para temperaturas próxima de T_c , é mais conveniente escolhermos uma inicialização em $T = \infty$, ou seja, onde todos os spins tem direções escolhidas aleatoriamente, pois assim a configuração inicial estaria mais próxima da configuração de equilíbrio.

Fazendo essas escolhas iniciais da configuração dos spins na rede, estamos estudando um sistema sem a presença de vórtices ou paredes de domínio. Contudo, podemos estar interessados em verificar a metaestabilidade do sistema. Como exemplo temos o importante trabalho de J. M. Kosterlitz e D.J. Thouless que mostrou uma transição de fase não-usual para o modelo 2DXY. Abaixo de uma temperatura crítica T_{KT} , o sistema apresentava pares de vórtices (também referenciado por vórtices e antivórtices), os quais estariam livres para se mover em direção à superfície e sumir sobre influência de um leve campo externo somente acima dessa temperatura [45, 46]. Para estudarmos isso, portanto, precisamos relaxar o sistema em torno de estados metaestáveis, ou a nível de simulação temos que inicializar o sistema com vórtices ou mesmo em $T = \infty$.

Além disso, podemos estudar a dinâmica das paredes de domínio sob a variação do campo magnético. A Figura 2, por exemplo, mostra o resultado de uma simulação de uma rede ferromagnética 20X20 com uma anisotropia onde a direção de fácil magnetização é o eixo-x. Nesse caso as paredes foram geradas depois que o sistema relaxou em um estado de equilíbrio metaestável. Paredes de domínios, como vimos no Capítulo 2, podem ser formadas pela competição entre dois tipos de interações. Nesse caso, como não consideramos a energia de demagnetização, as paredes se formaram devido a competição entre dois domínios em sentidos opostos de magnetização. A energia anisotrópica e a energia

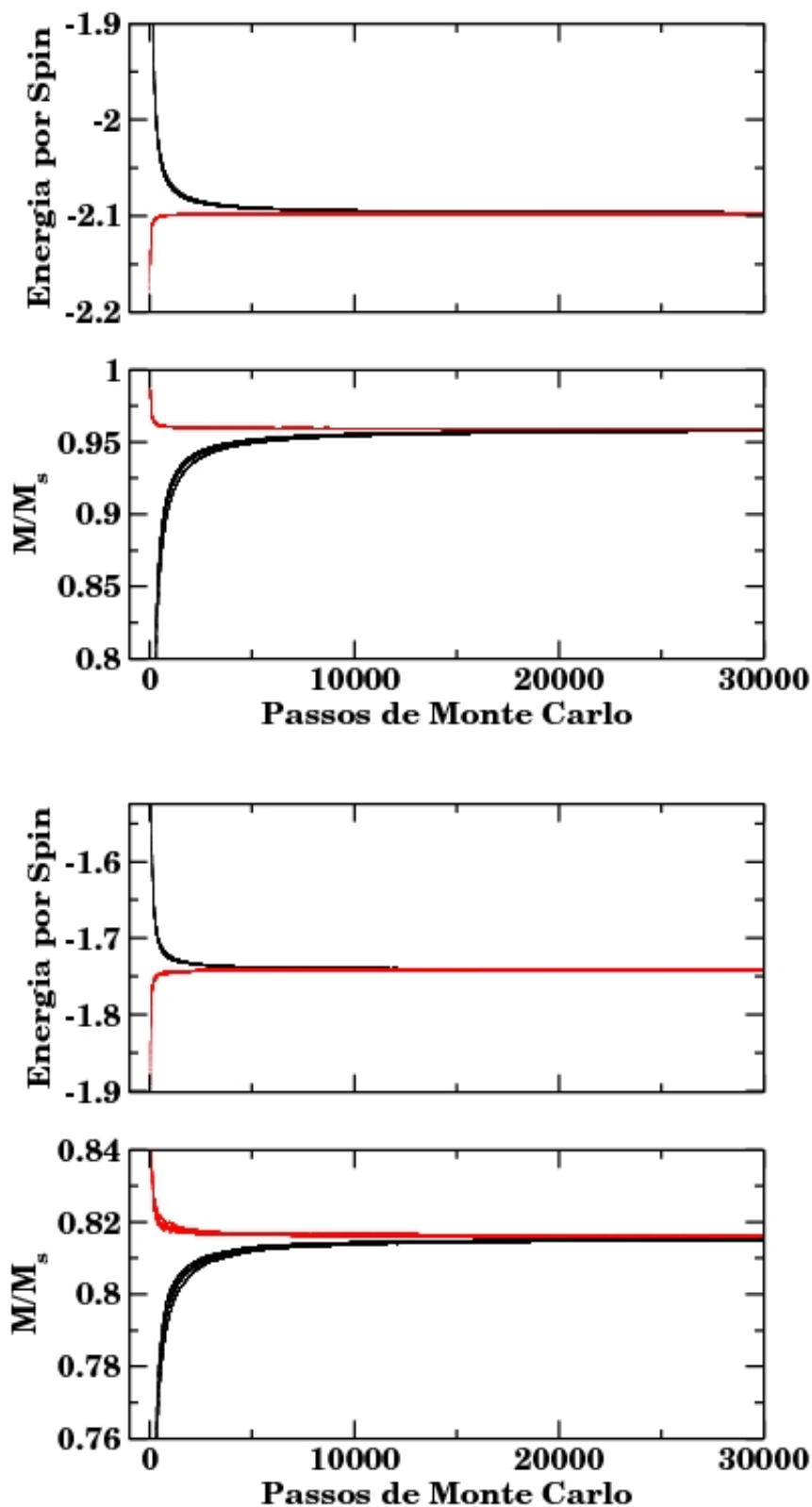


Figura 24: Energia e magnetização por spin para quatro sementes distintas e duas inicializações. Temos um sistema ferromagnético isotrópico em campo $H = 0.2J$. As curvas pretas inicializaram com uma configuração em que os spins têm direções aleatórias e as vermelhas com spins todos alinhados em uma mesma direção. Em a) temos uma temperatura $T = 0.2J/k_B$ e em b) a temperatura é $T = 0.8J/k_B$.

de troca contribuem para que cada domínio se mantenha na mesma configuração e a parede de domínio é formada, mesmo que a configuração da amostra seja energeticamente desfavorável. A aplicação de um campo externo pode tanto movimentar as paredes de domínio quanto virar o sentido da magnetização de um dos domínios.

Em cada um desses exemplos, a inicialização deve ser escolhida de forma a induzir a presença do fenômeno de interesse ou apenas para minimizar o tempo de relaxamento do sistema. Contudo a escolha exige muita cautela, pois escolhendo uma configuração de spins inicial podemos estar verificando um caso particular e excluindo outros os quais também podem ser relevantes para o mesmo estudo. Como exemplo verificamos a usual transição de fase de segunda ordem ferromagnético/paramagnético no modelo 2DXY.

Modelamos um ferromagneto isotrópico como um conjunto de spins dispostos em uma rede bidimensional quadrada de tamanho L , com condições periódicas de contorno. E, para verificar o comportamento da magnetização e outras grandezas termodinâmicas, realizamos os seguintes passos. Como o sistema é isotrópico, não está sujeito a campos externos e queremos verificar o comportamento da magnetização de um único domínio (ou amostra com magnetização saturada) em relação à temperatura, escolhemos duas configurações de spins para iniciar a simulação. A primeira era tal que todos os spins tinham direções aleatórias e a segunda era uma na qual todos os spins estavam alinhados em uma única direção escolhida de forma aleatória. Verificamos que o tempo de relaxamento para uma ou outra escolha ficava em torno de 10000 passos de Monte Carlo. Assim, para obter a magnetização para cada valor de temperatura no intervalo de 0.001 a 2.00 em passos de 0.001, utilizamos 60000 passos de Monte Carlo descartamos os 20000 primeiros para o sistema relaxar. Esse procedimento completo foi realizado mais quatro vezes e tiramos uma média das curvas. A Figura 25, portanto, apresenta a curva de magnetização para vários tamanhos de rede, com o intuito de verificarmos o efeito de tamanho finito. Este fica evidente no gráfico superior, onde podemos fazer uma estimativa, não tão precisa, da temperatura crítica através do cálculo dos expoentes críticos ν , γ , α e z [1]. Contudo, um resultado razoável para a determinação de T_c seria preciso a utilização de algoritmos mais sofisticados que o Algoritmo de Metrópolis como os algoritmos de Swendsen-Wang, Niedermayer, e Wolff. Este último, por exemplo, é mais apropriado para simulações em torno de T_c , mas é bem mais complexo e exige um tempo computacional maior [1].

É importante aqui comentarmos que, apesar de usarmos a magnetização como o parâmetro de ordem, ela deveria se anular em temperaturas finitas e sem campo, no limite termodinâmico. A razão de encontrarmos um valor finito para ela é que seria preciso

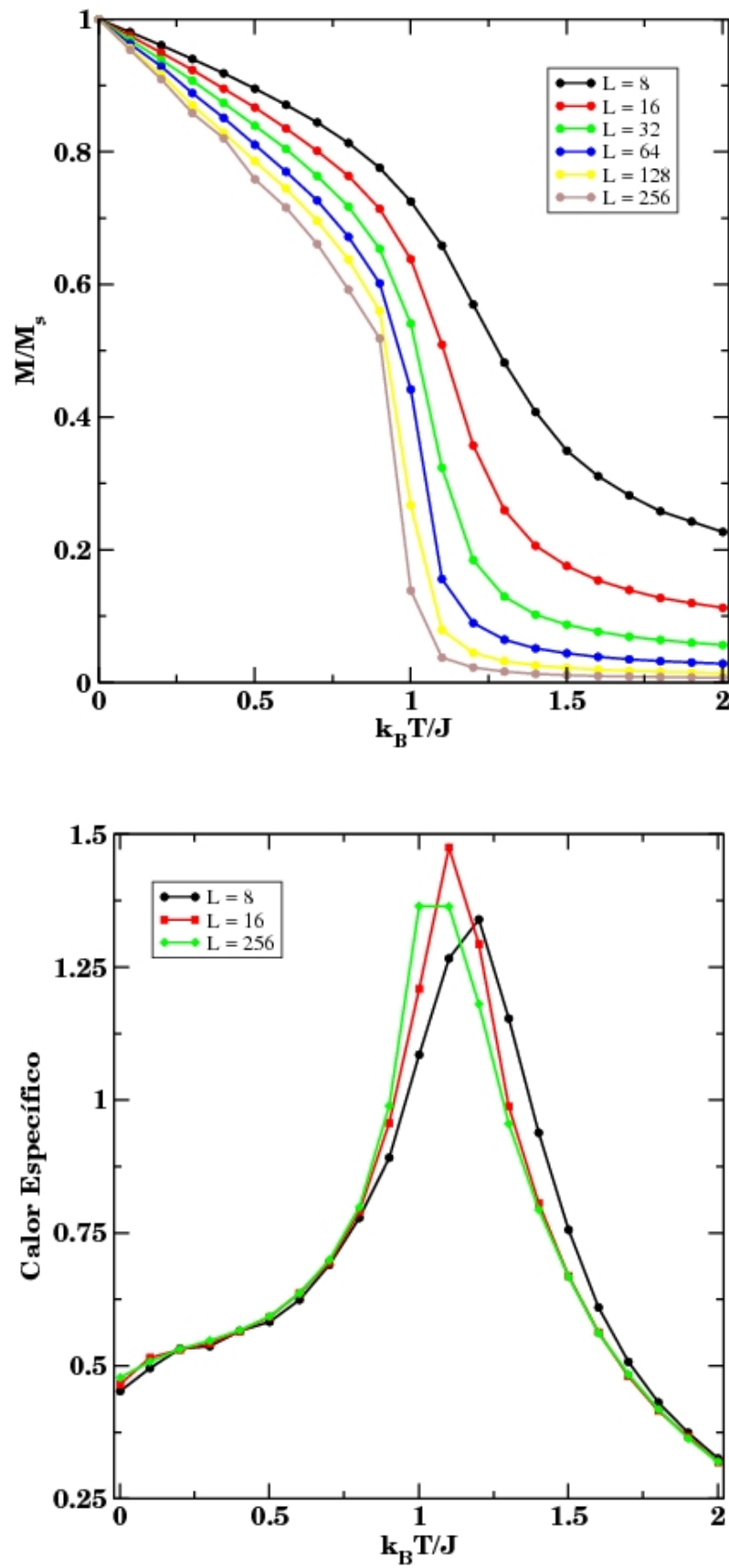


Figura 25: Magnetização e calor específico como função da temperatura para diversos tamanhos de rede.

um sistema da ordem de 10^{16} para que o sistema apresentasse uma magnetização por sítio de aproximadamente 0.1. [2, 6]. Isso por que para sistemas suficientemente grandes um ordenamento de longo alcance fica insustentável e o mesmo apresenta somente uma transição de fase do tipo Kosterlitz-Thouless-Berezinskii. Várias pesquisas foram feitas no sentido de obter as propriedades críticas no modelo 2DXY inclusive através do método de Monte Carlo. O nosso resultado apresentado na Figura 25 para a rede 256×256 foi obtido depois de semanas de simulação e podemos já perceber o quanto a magnetização diminui com o tamanho da rede mesmo para baixas temperaturas.

A dependência da magnetização com o campo externo também foi verificada para o modelo 2DXY. Mas antes temos que mostrar o procedimento básico que utilizamos nas simulações para obter as curvas de histerese. Como mostramos no Capítulo 2, a magnetização de um ferromagneto muda quando um campo é aplicado através de dois processos de magnetização. Este pode se dar tanto pelo movimento das paredes de domínio, quanto pela rotação dos momentos magnéticos dos domínios que não estão no mesmo sentido do campo e sabemos também que pode ser irreversível de acordo com a intensidade do campo ou com a natureza do material. Vimos também que a formação da curva de histerese envolve o entendimento de metaestabilidade, visto que a magnetização não depende somente do campo, mas também do estado no qual o sistema se encontra. Por isso tudo, existem várias dificuldades quanto a obtenção da curva de histerese e a primeira ação que devemos tomar é definir que a histerese que estamos obtendo aqui são de sistemas com um único domínio magnético, ou seja, de partículas pequenas onde a interação de troca é dominante ou amostras em estado de magnetização de saturação. Vamos considerar em nosso trabalho somente a energia de troca, magnetocristalina e a de Zeeman (interação do campo magnético com os spins) de acordo com o hamiltoniano clássico da Equação 4.3 com o acréscimo do termo anisotrópico, que fica

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - H_x \sum_i \cos(\theta_i) - D \sum_i \cos^2(\theta_i), \quad (4.4)$$

onde D é a constante anisotrópica. Quando $D > 0$ temos o eixo-x como a de fácil magnetização e o eixo-y quando $D < 0$.

Vamos considerar o procedimento padrão para o algoritmo de Metropolis como aplicamos para obter a magnetização contra temperatura com uma única diferença. A configuração inicial de spins é aleatória somente para a primeira realização, da qual, obtemos o primeiro ponto na curva de histerese. No final desta realização, teremos as grandezas magnéticas e termodinâmicas que nos interessa e ainda a configuração de spins final. Esta

corresponde a, um dos estados de equilíbrio estável ou metaestável e será utilizada como configuração inicial para a obtenção do ponto seguinte da curva de magnetização com o campo externo. Dessa forma, construiremos várias curvas de histerese e só então faremos médias delas.

A diferença em escolher uma configuração aleatória somente na primeira realização tem algumas consequências que podemos aproveitar. Note que para obtermos o primeiro ponto na curva de histerese inicializamos de uma configuração aleatória de spins e, portanto, precisamos, da mesma forma que fizemos anteriormente, verificar o tempo de relaxamento e, em seguida, obter as grandezas no equilíbrio. Esse tempo é tão grande quanto o apresentado nas Figuras 23 e 24, porém para o segundo ponto na curva aumentamos o campo externo de uma quantidade muito pequena a qual modifica o perfil da energia livre de Landau na mesma proporção, e como inicializamos com um arranjo de spins em um estado de energia muito próxima do equilíbrio o tempo de relaxamento é bem menor. Esse fato foi aproveitado e assim realizamos as simulações com um tempo de relaxamento suficientemente pequeno, exceto para o primeiro ponto da simulação, para assim diminuir também o tempo de execução do algoritmo.

Os resultados a seguir mostram a curva de histerese e a dependência do campo coercivo com a temperatura e anisotropia. Utilizamos 20000 passos de Monte Carlo, descartando os 10000 primeiros, em cada realização. Dessa forma, conseguimos 20 curvas de histerese do mesmo sistema e em seguida fizemos uma média de todas elas. Escolhemos esse último valor também com o objetivo de verificar o quanto uma histerese pode variar quando variamos a semente da função geradora de números aleatórios. No geral, obter de 5 a 10 curvas são suficientes.

A Figura 26 mostra o resultado da dependência da histerese e coercividade com a anisotropia. Observamos que a coercividade aumenta com a constante anisotrópica. Este resultado era esperado visto que a anisotropia aumenta a barreira de energia existente entre o estado metaestável e o estado de mínimo global, e por isso seria preciso um campo bem maior para reverter o sentido da magnetização, quanto maior for a anisotropia.

Quando aumentamos a temperatura, é natural que a coercividade diminua. Pois a barreira de energia, que pode existir entre um estado metaestável e um de mínimo global, pode ser superada com o aumento das flutuações. Observamos isso através do gráfico da Figura 27, na qual também mostramos as sucessivas curvas de histerese para temperaturas diferentes. Contudo a diminuição não parece ser linear.

Para se obter esses resultados foi preciso a realização de muitas simulações com as

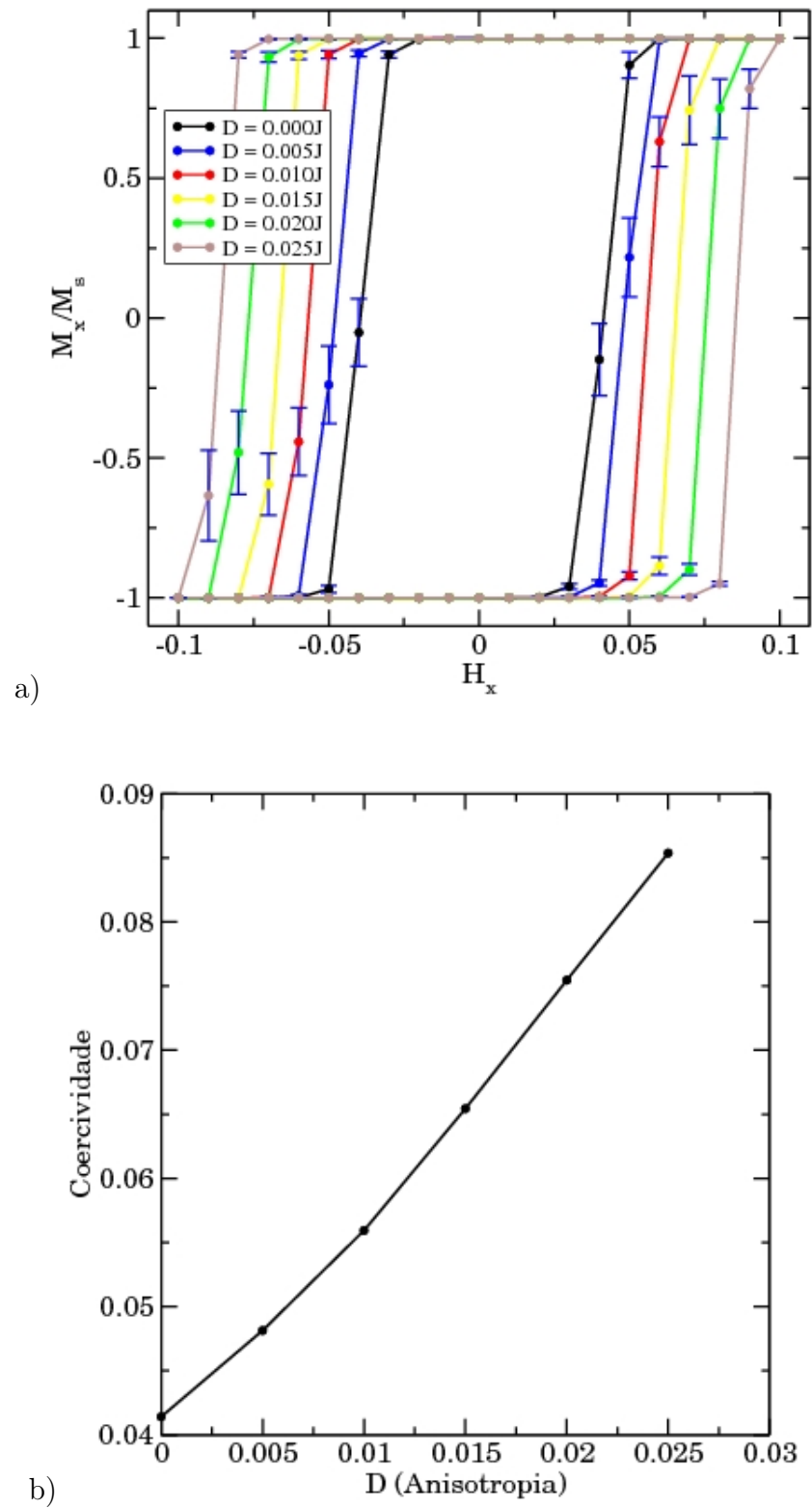


Figura 26: a) Efeito do aumento da anisotropia na histerese magnética. b) Coercividade extraída do resultado da figura a).

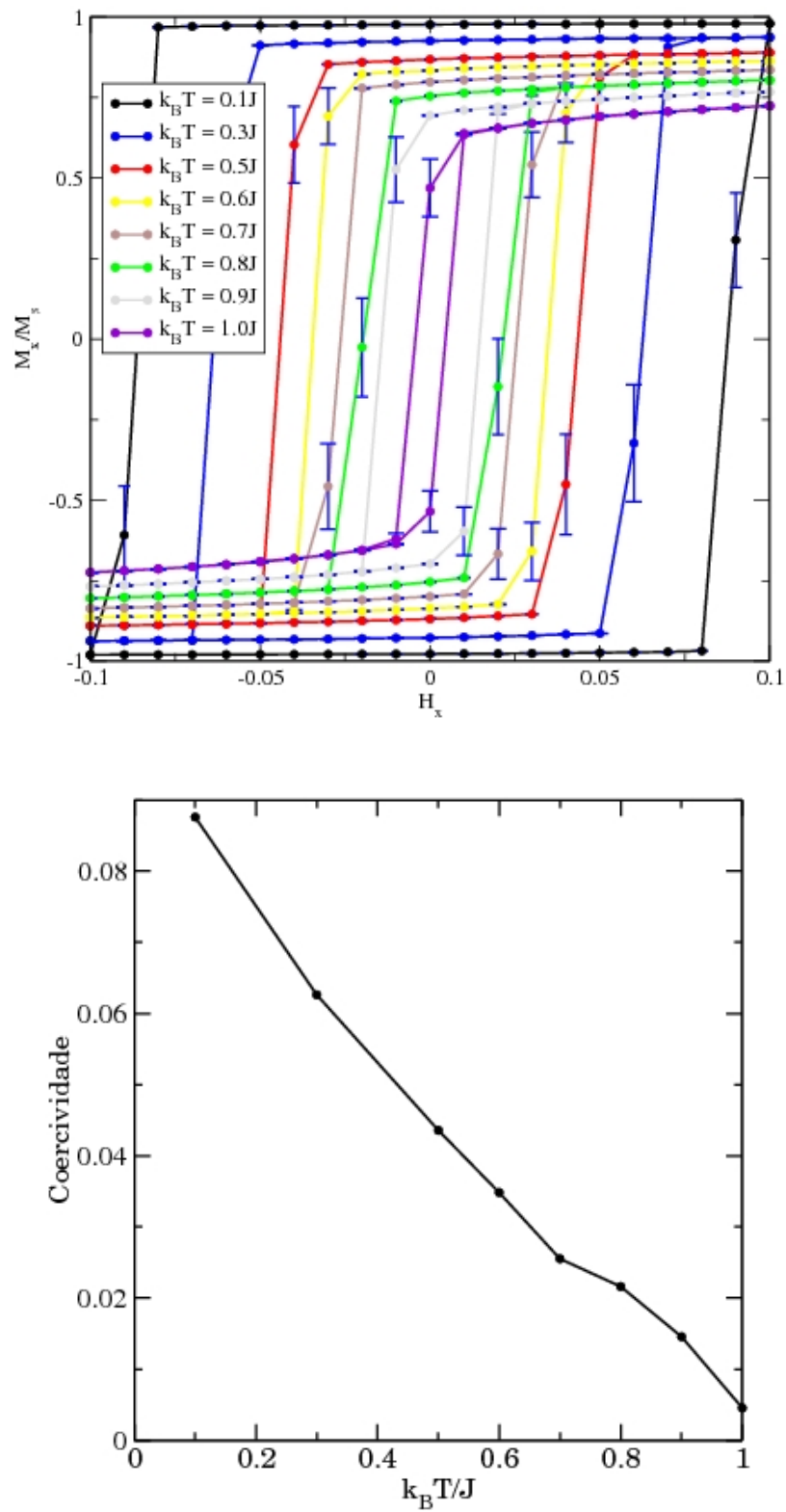


Figura 27: Histerese para diversos valores de temperatura abaixo da temperatura crítica. Temos que $D = 0.05J$ e $k_B T = 0.1J$ em uma rede quadrada 32×32 ferromagnética.

quais poderíamos observar se o sistema realmente relaxava com as quantidades de passos que escolhemos. Uma conclusão que tiramos com isso é que, ao simular para redes com $L > 64$, tínhamos resultados muito imprecisos. Simulando sistemas muito grandes, devemos escolher de forma adequada a configuração de spins inicial no intuito de diminuir o tempo de relaxamento e, ainda, escolher tanto um tempo suficientemente longo, para esperar o sistema relaxar, quanto um número de passos de Monte Carlo grande, para se obter as médias temporais estatisticamente razoáveis em cada uma das simulações. Além de tudo, se estamos obtendo a histerese como resultado, é conveniente obtê-la para várias sementes diferentes e extrair a “histerese média” para que tenhamos um resultado ainda mais preciso. Contudo, para os sistemas que tratamos até agora, a quantidade de passos para o sistema relaxar e o tempo máximo de Monte Carlo foram suficientes.

Um resultado intrigante foi quando observamos a dependência da coercividade com o tamanho da rede. Fizemos três testes para 10000, 20000 e 30000 passos de Monte Carlo. Como vemos no gráfico da Figura 28 temos um comportamento assintótico da coercividade a medida que a rede aumenta. Isso é observado para os três valores de passos de Monte Carlo, e também podemos perceber que quanto maior este, menor é o valor do campo coercivo.

4.4 Bicamadas FM/AFM

Como vimos na Seção 2.7 um ferromagneto pode mudar suas propriedades quando acoplado com um material antiferromagneto. O principal fenômeno que ocorre é o deslocamento da curva de histerese, o qual é estimulado pela presença da interface FM/AFM. Nesta seção, veremos um caso particular no qual ocorre a anisotropia de troca, utilizando o Método de Monte Carlo descrito no Capítulo 3 e empregado nas seções anteriores para um ferromagneto de Ising e no Modelo 2DXY. Para isso, portanto, precisaremos descrever nosso sistema. Este consiste em uma rede bidimensional quadrática de spins com condições periódicas de contorno somente na direção do eixo-x. O modelo é representado pelo hamiltoniano

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_F \sum_{\langle i,j \rangle \in F} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - D_F \sum_{i \in F} (S^x)^2 - J_A \sum_{\langle i,j \rangle \in A} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - D_A \sum_{i \in A} (S^x)^2 \\ & - g\mu_B H_x \sum_i S_i^x - J_{I1} \sum_{\langle i,j \rangle \in F/A1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - J_{I2} \sum_{\langle i,j \rangle \in F/A2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \end{aligned} \quad (4.5)$$

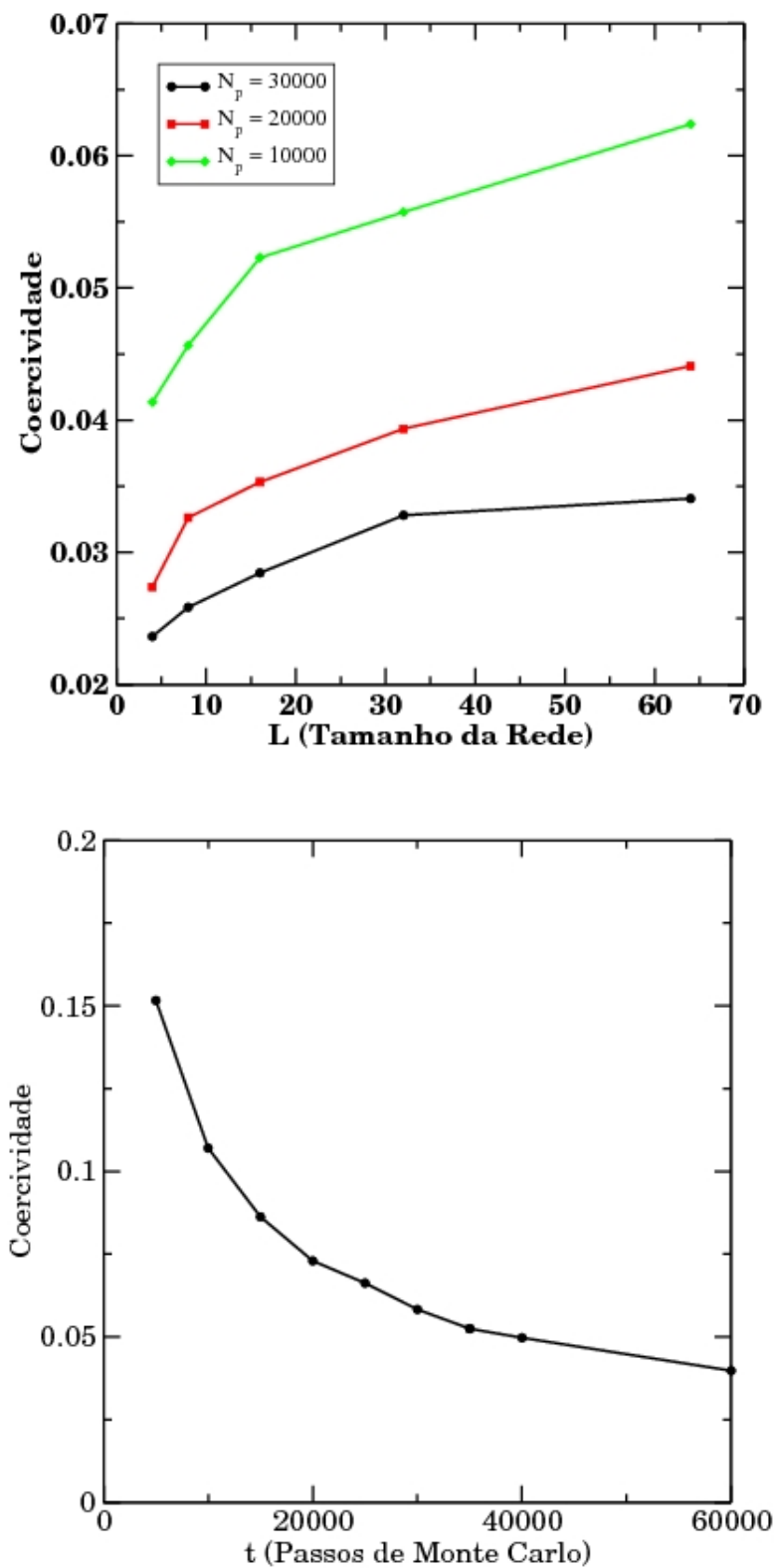


Figura 28: Coercividade como função do tamanho da rede e passos de Monte Carlo.

onde $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y)$ é o spin clássico no modelo 2DXY do i -ésimo sítio da rede, H_x é o campo magnético externo aplicado na direção do eixo-x, $J_F > 0$ e $J_A < 0$ são as constantes de troca interatômica entre os momentos do meio ferromagnético e antiferromagnético, respectivamente, D_F e D_A são nesta ordem as constantes anisotrópicas do ferro e antiferro, g e μ_B são o fator de Landé e o magneton de Bohr, os quais consideraremos iguais a unidade por simplicidade. Em fim, J_{I1} e J_{I2} são, como seguem, as constantes de troca entre spins do meio ferromagnético com outros das subrede $A1$ e $A2$ do meio antiferromagnético. Como estamos considerando os momentos magnéticos de spin vetores clássicos, eles podem ser representados apenas pelo ângulo θ que fazem com o eixo-x. Dessa forma, poderíamos reescrever a Equação 4.5 como função desses ângulos. Logo, teríamos o novo hamiltoniano

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_F \sum_{\langle i,j \rangle \in F} \cos(\theta_i - \theta_j) - D_F \sum_{i \in F} \cos^2(\theta_i) - J_A \sum_{\langle i,j \rangle \in A} \cos(\theta_i - \theta_j) - D_A \sum_{i \in A} \cos^2(\theta_i) \\ & - g\mu_B H_x \sum_i \cos(\theta_i) - J_{I1} \sum_{\langle i,j \rangle \in F/A1} \cos(\theta_i - \theta_j) - J_{I2} \sum_{\langle i,j \rangle \in F/A2} \cos(\theta_i - \theta_j). \end{aligned} \quad (4.6)$$

O hamiltoniano acima se assemelha até certo ponto de um utilizado por David Lederman, em 2004, para simular através do Método de Monte Carlo filmes finos como $F_e F_2(110)$. Seu modelo, contudo, foi aplicado em uma outra geometria em três dimensões.

A simulação de um material descrito pelo hamiltoniano acima exige um grande custo computacional e ainda uma análise minuciosa dos resultados obtidos. Esse sistema possui, por exemplo, um estado fundamental muito difícil de se prever. Isso também depende do perfil da interface FM/AFM. Em geral, se considerarmos uma interface plana, sem rugosidade e sem nenhum defeito, ela pode ser compensada, onde a magnetização média na interface antiferromagnética é nula e tem a forma da Figura 29, ou pode ser classificada como não compensada como mostra a Figura 13b. No primeiro caso ocorre frustração na interface, onde existe uma competição entre os vizinhos de cada sítio da interface no sentido de alinhamento uns com os outros. Este é um dos motivos pelo qual é bem complicado prever o estado fundamental desse sistema. Sabe-se que em ambos os casos ocorre o exchange bias em certas condições, mas observa-se que o campo de exchange bias é bem maior em materiais com superfícies compensadas. Intuitivamente, como o campo efetivo na interface antiferromagnética de superfícies não-compensadas é maior, esperava-se um campo de bias maior. Por esse motivo e muitos outros que o exchange bias tem sido intensamente estudado. Nesse trabalho vamos mostrar resultados com sistemas ferromagnéticos com superfícies não-compensadas, mas com dois tipos de interações de troca na interface como mostram as Equações 4.5 e 4.6.

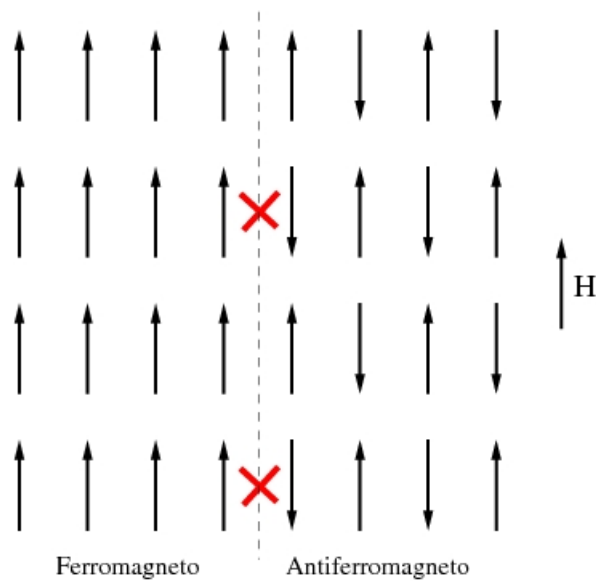


Figura 29: Representação de uma bicamada FM/AFM com uma interface compensada. Os marcas em vermelho está representando a frustração na interface.

Existem várias questões ainda não resolvidas e muitos modelos teóricos com o objetivo de explicá-los. Algumas medidas experimentais do campo de exchange mostraram que ele depende tanto da espessura do material ferromagnético quanto do antiferromagnético (veja Figura 30), mas ainda é um problema a ser resolvido, dentre muitos outros. Por outro lado, temos um vasto desenvolvimento teórico que consegue explicar alguns dos comportamentos visto experimentalmente. Dentre estes se destacam o modelo desenvolvido pelos próprios Meiklejohn e Bean, onde consideram a energia livre como a soma das energias de interação com o campo externo, de anisotropia uniaxial e mais um termo de energia unidirecional responsável por deslocar a curva de histerese; e o modelo descrito no artigo de J. Nógues e Ivan K. Schuller, onde apresentam a dependência do campo de exchange com a interação de troca na interface, magnetização e grossura do meio FM.

Alguns modelos em particular afirmam que a histerese deslocada é consequência de formação de domínios magnéticos no meio antiferromagnético. Isso também é verificado experimentalmente. Uns assumem a formação de domínios perpendiculares ao plano da interface e outros declaram que estes são paralelos à mesma. É sob essa perspectiva que vamos discutir os resultados obtidos nesse trabalho por simulação de Monte Carlo. Nós investigamos a magnetização com respeito ao campo para uma rede pequena segundo o modelo 2DXY com interações dadas pelo hamiltoniano da Equação 4.6.

Seguimos, portanto, o procedimento descrito na seção anterior para gerar a curva de histerese. Depois de vários testes percebemos que para obter um resultado com precisão

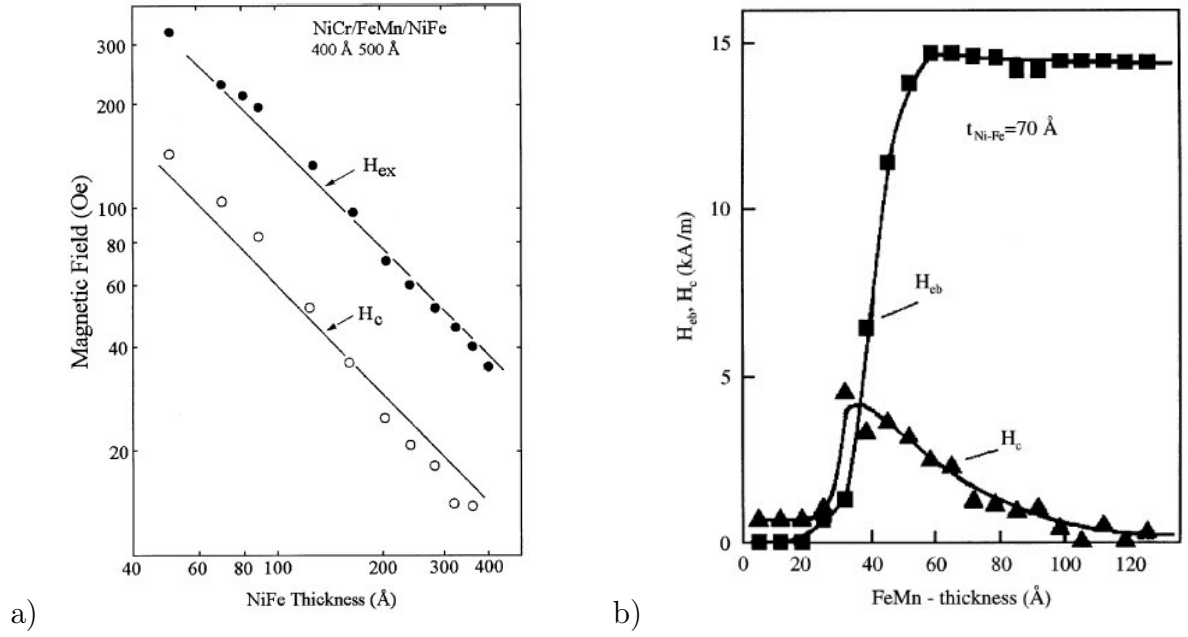


Figura 30: Dependência do campo de exchange bias (círculos fechados em "a") e os quadrados em "b") e coercivo (círculos abertos em "a") e triângulos em "b") com a grossura do meio a) FM e b) AFM para o composto $Fe_{80}Ni_{20}/FeMn$.

razoável nesse sistema mais complexo precisaríamos escolher uma quantidade de passos de Monte Carlo ainda maior que os utilizados para o ferromagneto no modelo 2DXY. Utilizamos, então, 10^5 passos e descartamos os 60000 primeiros para esperar o sistema relaxar. Essa quantidade de passos exigiu um algoritmo otimizado de forma que o tempo real da simulação diminuísse consideravelmente. Fizemos ainda dez realizações e, dessa forma, obtivemos 10 curvas de histerese. Escolhemos inicialmente um sistema pequeno de tamanho $L = 16$ para diminuir ainda mais o tempo de simulação, obter uma quantidade de gráficos suficientes para tirarmos nossas conclusões e traçarmos nossas perspectivas para resultados posteriores. A rede quadrada é composta por dois meios, um ferromagnético de área 16×6 e outro antiferromagnético 16×10 . Os parâmetros que escolhemos foram baseados em dois fatos. O primeiro é que o sistema antiferromagnético deveria ter anisotropia suficientemente forte para manter o sistema em seu estado mesmo com a variação de um campo magnético. Assim escolhemos uma anisotropia uniaxial de $D_A = 5.0J_F$ e, de início, escolhemos a anisotropia do meio ferromagnético para ser nula e $J_A = -J_F$. Inspirado no trabalho de David observamos a curva de histerese para $J_{I1} = J_{I2} = J_F$ e $J_{I1} = -J_{I2} = J_F$. Fizemos as simulações em baixas temperaturas mas termalizamos a partir de uma configuração aleatória de spins o qual representaria um sistema com temperatura infinita. Com essa configuração inicial calculamos a magnetização para um campo megnético inicial nulo, aumentando-o em passos de $0.005J_F$ até um valor máximo

de $0.2J_F$. Em seguida, variamos este de forma a completar a curva de magnetização ou histerese, se houver.

Vejamos primeiramente para o caso $J_{I1} = J_{I2} = J_F$. A Figura 31 mostra a magnetização e energia por spin como função do campo externo, onde encontramos duas curvas diferentes. Fizemos dez curvas de magnetização contra o campo, e destas, quatro tiveram o comportamento da curva representada pelos círculos pretos, com as quais tiramos uma curva média. As demais demonstraram um perfil da outra histerese, e a curva vermelha representa a média delas.

A explicação para isto pode ser explicado por meio da compreensão detalhada do perfil da energia livre de Landau, como na eqção 2.5.1, na qual comentamos a relação entre a histerese e estados metaestáveis. Observe que nas Figura 31b temos o gráfico para a energia, que corresponde aos dois casos da Figura 31a. Temos então que as curvas vermelhas correspondem estados de equilíbrio metaestáveis, com presença de domínios ou com vórtices no material ferromagnético. Uma simples olhada na configuração dos momentos nos mostrou que o meio AFM possui paredes de domínios. Isso deu uma estabilidade ao estado metaestável pois temos uma anisotropia no meio AFM. Contudo, o relaxamento para diversos valores de semente nos permitiu também que o sistema relaxasse para um estado de equilíbrio estável de mínimo global de energia. Assim, conseguimos produzir as duas curvas de histerese, para duas situações de equilíbrio, embora não tenhamos observado o exchange bias. Entretanto, podemos notar uma assimetria na curva da energia por spin. Isso pode estar relacionado com a interface, embora não tenha causado o deslocamento da curva de histerese.

A análise desse resultado tem uma enorme importância no entendimento do exchange bias como mostraremos. Por isso, vamos mostrar como é possível que para duas sementes distintas poderíamos obter duas curvas distintas. Exemplificamos o perfil da energia livre Landau para vários valores de h e dessa forma facilitamos a compreensão da formação de uma histerese. Contudo, a energia livre dos sistemas que estudamos até agora tem um formato bem mais complexo que o nosso exemplo, embora, possa ser uma superposição de de funções como esta. Quando inicializamos o sistema de uma configuração aleatória de spins, este pode relaxar para qualquer um dos mínimos. Quando ele alcança um determinado mínimo na função no qual as flutuações não são suficientes para se superar as barreiras de energia, consideramos que o sistema alcançou o equilíbrio o qual nem sempre corresponde a um mínimo global.

Os sistemas magnéticos como modelamos aqui é infinitamente mais complexo que esse

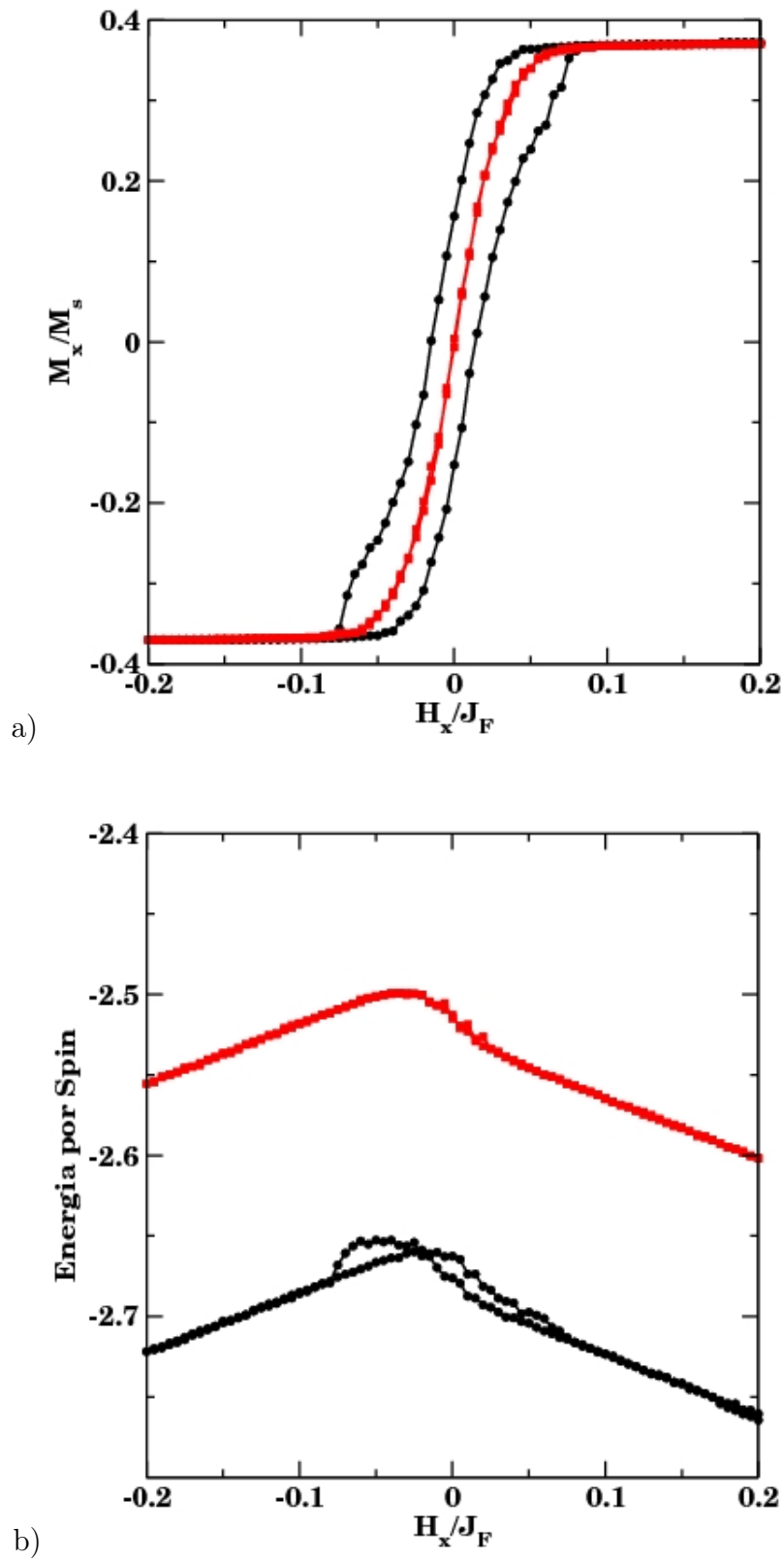


Figura 31: Magnetização e energia por spin versus o campo magnético externo. A interação de troca na interface aqui é dada por $J_{I1} = J_{I2} = J_F$.

simples exemplo, no entanto, dá para se ter uma idéia do que está acontecendo no gráfico da Figura 31.

Finalmente, mostraremos o outro caso particular que escolhemos para a interação de troca na interface, quando $J_{I1} = -J_{I2} = J_F$. Neste, encontramos três curvas distintas. Duas delas apresentaram um campo de exchange bias, embora não tenham campo coercivo e o processo de magnetização foi completamente reversível. A outra, não apresentou o deslocamento da curva, mas temos uma histerese. Notemos que as as curvas existem em níveis de energias diferentes, como mostra a Figura 32b. E o nível de energia mais baixo que encontramos não apresentou o exchange bias. A curva de círculos pretos é uma média de quatro curvas que possuem pequenas diferenças no campo coercivo. Já as outras duas curvas parecem bem definidas. A composta por quadrados em vermelho é uma média de apenas duas curvas com campo coercivo negativo e a a outra é uma média de quatro curvas de magnetização. Ambas possuem um desvio padrão muito baixo¹. Isso mostra a “estabilidade” desse estado metaestável. Em um material real, sabemos que o exchange bias também só aparece em certas condições. Apenas quando resfriamos o material de uma temperatura $T_N < T < T_C$ é que observa-se o efeito. A forma pela qual obtivemos as curvas de histerese possibilitou reproduzirmos duas situações de exchange bias e uma de histerese simétrica em relação à origem, pois iniciamos o sistema de uma configuração aleatória (em altas temperaturas) e relaxamos o sistema (que pode ser encarado como um resfriamento) que encontrou três estados de equilíbrio, um de mais baixa energia, e dois outros metaestáveis com coercividade positiva e negativa.

A partir desse último resultado, verificamos que efeito poderíamos causar a essas curvas que foram deslocadas, se diminuíssemos o tamanho do meio antiferro. A Figura 33 mostra o resultado disso. Podemos notar uma leve diminuição do campo de exchange bias e uma grande variação no valor da magnetização. A curva vermelha é o resultado anterior para $L_{AF} = 10$ e a nova curva, de círculos pretos, escolhemos $L_{AF} = 4$. O aumento na magnetização resulta do aumento da quantidade de spins ferromagnéticos, aumentando assim a magnetização média por spin de toda a rede. O campo coercivo tem uma dependência complicada em relação à grossura, e é inversamente proporcional à grossura do ferromagneto. Em nossa análise tanto a meio ferro aumentou quanto o antiferro diminuiu. Uma análise mais minuciosa deve ser feita para concluir qual a verdadeira dependência com a grossura desses materiais.

¹Não podemos confundir esse desvio entre as curvas com o desvio padrão das médias em cada simulação. Para obtermos cada ponto em um gráfico $M_x/M_s X H_x/J_F$ tiramos médias com seus respectivos desvios em cada histerese. O desvio a que nos referimos é relativo à média das curvas.

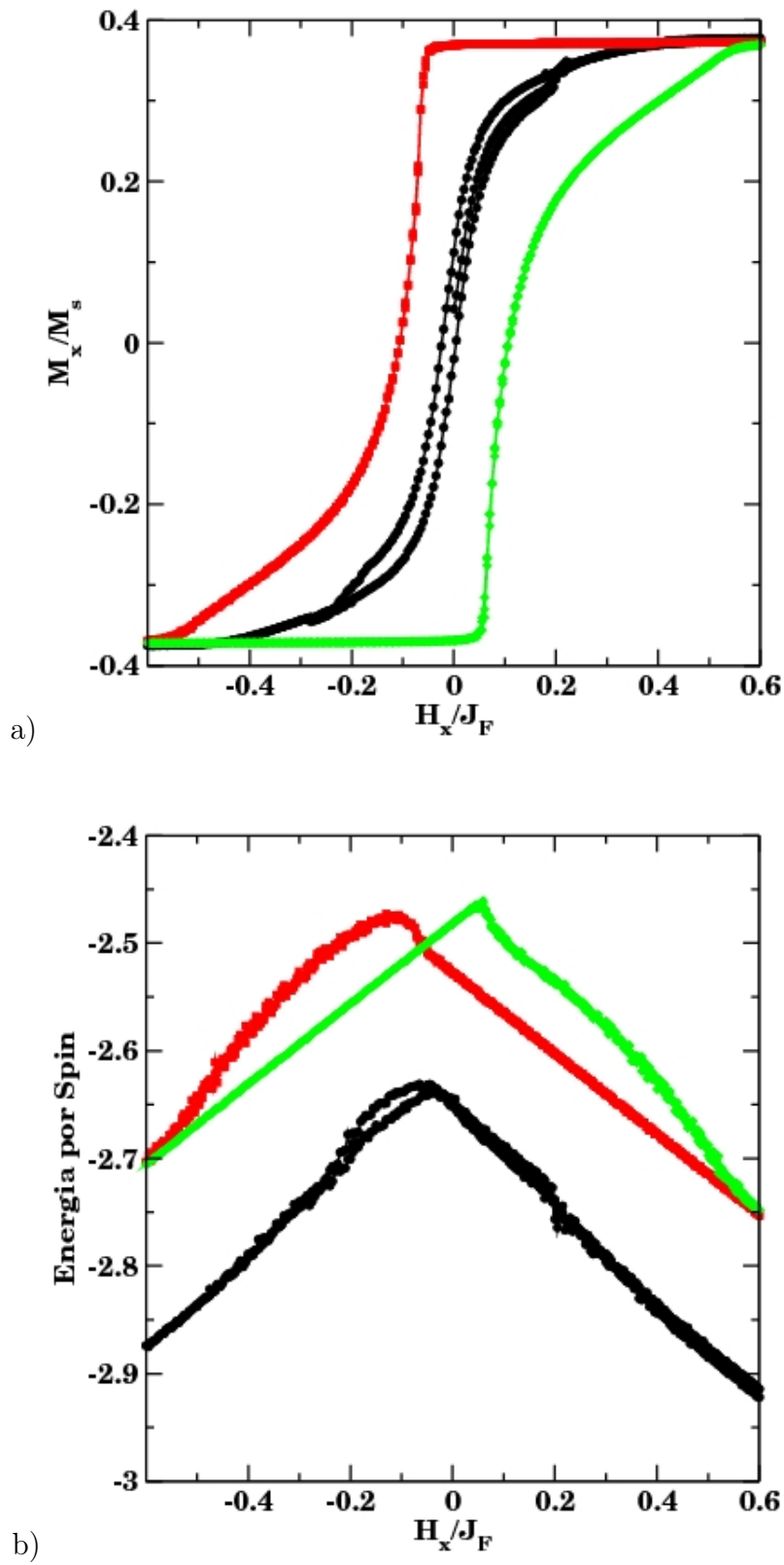


Figura 32: Magnetização e energia por spin versus o campo magnético externo. Já neste caso, temos $J_{I1} = -J_{I2} = J_F$.

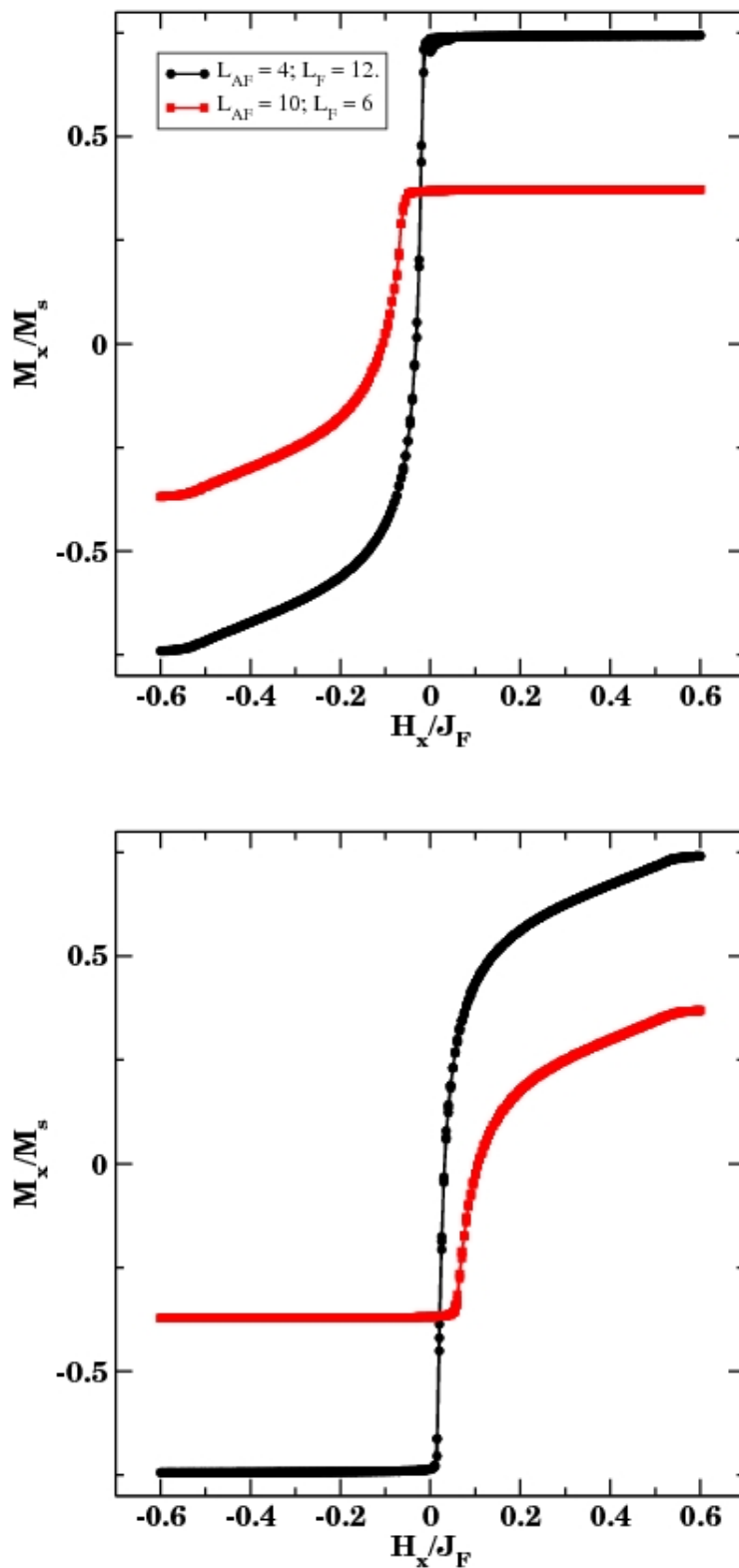


Figura 33: Magnetização versus campo magnético externo para dois casos. O primeiro para $L_{AF} = 4$ e $L_F = 12$ e o segundo para $L_{AF} = 10$ e $L_F = 6$. Os gráficos são resultados para as duas situações de exchange bias.

Para finalizar, averiguamos também o comportamento dessas curvas de acordo com a anisotropia do meio FM. Fizemos as curvas para o mesmo tamanho de rede 16X16 com $L_F = 10$ e $L_{AF} = 6$. Usamos ainda baixas temperaturas, $k_B T = 0.001 J_F$. Os parâmetros de troca foram os mesmos utilizados nas simulações anteriores, onde $J_A = -J_F$.

Observamos as histereses com campo de exchange bias positivo e negativo. A mudança, quando aumentamos a anisotropia, foi igual em ambas, mas em sentidos diferentes. E para os dois casos houve uma mudança brusca no formato da curva de histerese, quando aumentamos para $D_F = 0.04 J_F$. Novamente, precisamos realizar mais simulações no sentido de saber como essa mudança se procede, para entendermos melhor o que realmente está acontecendo.

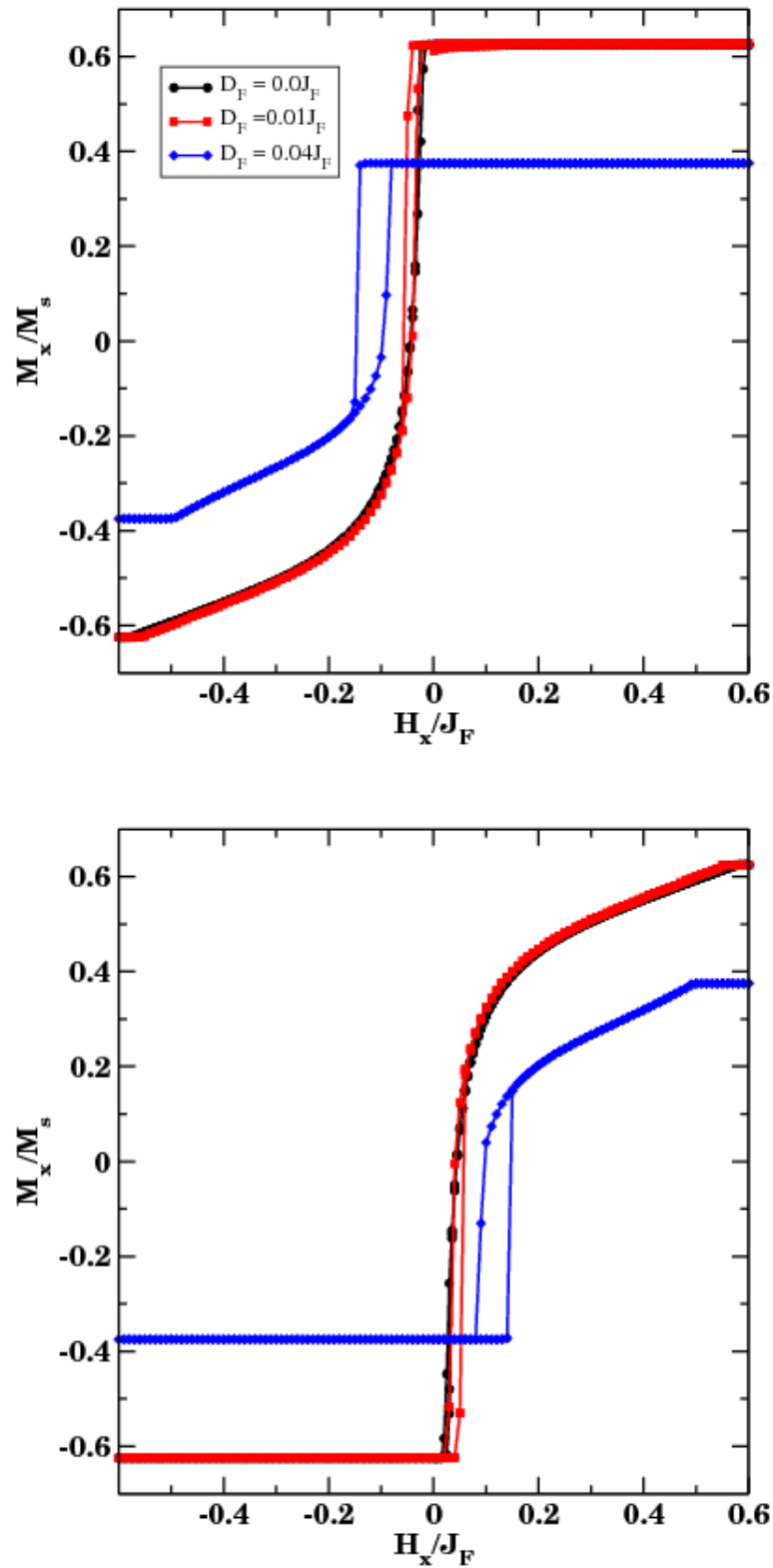


Figura 34: Curva de magnetização contra campo magnético para três valores de anisotropia no meio FM. Em a) temos o exchange bias negativo e em b) o exchange bias positivo. Ambas foram obtidas da mesma simulação descrita no texto para duas sementes distintas.

5 *Conclusões e Perspectivas*

Nesse trabalho mostramos de forma detalhada a aplicação do Método de Monte Carlo no estudo de sistemas ferromagnéticos bidimensionais e com interfaces FM/AFM que apresentam o exchange bias.

Ao apresentarmos os resultados para a transição de fase de um ferromagneto no modelo de Ising, tínhamos o objetivo de mostrar todo o desenvolvimento sistemático utilizado na simulação. Dessa forma, vimos como um sistema magnético pode alcançar o estado de equilíbrio e como podemos identificá-lo nesse estado. Fizemos uma análise em cima do tempo necessário para o sistema relaxar, citando os fatores que podem influenciar na dinâmica. E com estes podemos traçar estratégias para otimizar a simulação e ainda obter resultados mais precisos. Isso, portanto, nos possibilitou determinar a dependência da energia e magnetização por spin, e calor específico em relação a temperatura.

Conscientes das estratégias e dos passos utilizados no modelo de Ising, verificamos a aplicação do MMC em um modelo mais complexo, o 2DXY. Fazendo a mesma análise do estado de equilíbrio do sistema, concluímos que neste modelo o sistema relaxa em um número maior de passos de Monte Carlo. Vimos também que, diferente do modelo de Ising, o ferromagneto no modelo 2DXY apresenta uma transição de fase não usual do tipo Kosterlitz-Thouless-Berezinskii. Reproduzimos então a curva de magnetização e calor específico como função da temperatura, onde podemos perceber a transição em torno de $T = 1.0J/k_B$. Este resultado está de acordo com os que encontramos na literatura [2, 6].

A histerese magnética também foi simulada para o Modelo 2DXY. Mostramos como o campo coercivo muda com o aumento da anisotropia, temperatura, tamanho da rede e número de passos de Monte Carlo. Observamos, portanto, um comportamento linear com a anisotropia, onde temos um aumento da coercividade quando escolhemos a constante anisotrópica cada vez maior. Por outro lado, a coercividade diminui com o aumento da temperatura, como esperávamos, pois as flutuações contribuem com a superação das barreiras de energia entre dois estados de mínimo. Em fim, podemos perceber um com-

portamento assintótico da coercividade em relação tanto ao tamanho da rede L quanto ao número de passos de Monte Carlo N_p .

Investigamos também, o comportamento da magnetização em relação ao campo magnético para bicamadas magnéticas FM/AFM. Usamos interfaces compensadas com dois tipos de interações de troca. A primeira com $J_{I1} = J_{I2}$ e a segunda com $J_{I1} = -J_{I2}$. Apenas nesse segundo caso conseguimos reproduzir o exchange bias. Neste caso, mostramos que relaxando o sistema em campo nulo de uma configuração de spins correspondendo a um estado em que $T = \infty$, podemos encontrar três tipos de curvas. Uma em um nível energético mais baixo com histerese, mas sem campo de exchange bias, e duas curvas de magnetização contra o campo deslocadas em relação à origem, caracterizando a anisotropia de troca descoberta por **W. H. Meiklejohn e C. Bean** [8, 13, 14]. As condições iniciais do sistema na simulação nos permitiu também reproduzir o exchange bias positivo, também observado experimentalmente [7, 19]. Resultados experimentais também mostraram que o exchange bias resulta de um estado de domínio no meio antiferromagnético [25, 28]. Comparando com nossos resultados podemos, notar que de fato o exchange bias somente aconteceu em estado de energia mais alto, que pode está relacionado com a presença de domínios. Apresentamos logo em seguida o comportamento dessas curvas quando variamos a anisotropia do meio ferromagnético, e também quando temos meios FM e AFM diferentes.

Os resultados para o exchange bias positivo e negativo concordam com os resultados experimentais, visto que para um mesmo sistema com interface FM/AFM podemos obter os dois tipos de campo de exchange bias, mudando apenas as condições. Contudo, mais simulações devem ser realizadas no sentido de investigar de, forma mais minuciosa, esses resultados.

Referências

- 1 NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. [S.l.: s.n.], 1999.
- 2 BRAMWELL, S. T.; HOLDSWORTH, P. C. W. Magnetization - a characteristic of the kosterlitz-thouless-berezinskii transition. *Physical Review B*, v. 49, n. 13, p. 8811–8814, 1994. 26 AMERICAN PHYSICAL SOC.
- 3 GUPTA, R.; BAILLIE, C. F. Critical-behavior of the 2-dimensional xy model. *Physical Review B*, v. 45, n. 6, p. 2883–2898, 1992. 18 AMERICAN PHYSICAL SOC.
- 4 GUPTA, R. et al. Phase-transition in the 2d xy model. *Physical Review Letters*, v. 61, n. 17, p. 1996–1999, 1988.
- 5 WEBER, H.; MINNHAGEN, P. Monte-carlo determination of the critical-temperature for the two-dimensional xy model. *Physical Review B*, v. 37, n. 10, p. 5986–5989, 1988. 15 AMERICAN PHYSICAL SOC Part B.
- 6 BRAMWELL, S. T.; HOLDSWORTH, P. C. W. Magnetization and universal subcritical behavior in 2-dimensional xy magnets. *Journal of Physics-Condensed Matter*, v. 5, n. 4, p. L53–L59, 1993.
- 7 NOGUES, J.; SCHULLER, I. K. Exchange bias. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 192, n. 2, p. 203–232, 1999.
- 8 MEIKLEJOHN, W. H.; BEAN, C. P. New magnetic anisotropy. *Physical Review*, v. 102, n. 5, p. 1413–1414, 1956.
- 9 KITTEL, C. *Introduction to Solid State Physics*. [S.l.: s.n.], 1986.
- 10 MORRISH, A. H. *The Physical Principles of Magnetism*. [S.l.: s.n.], 1965.
- 11 ISING, E. *Z. Physik*, v. 31, p. 253, 1925.
- 12 SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. [S.l.: s.n.], 1994.
- 13 MEIKLEJOHN, W. H.; BEAN, C. P. New magnetic anisotropy. *Physical Review*, v. 105, n. 3, p. 904–913, 1957.
- 14 MEIKLEJOHN, W. H. Exchange anisotropy - a review. *Journal of Applied Physics*, v. 33, n. 3, p. 1328, 1962.
- 15 STILES, M. D.; MCMICHAEL, R. D. Coercivity in exchange-bias bilayers. *Physical Review B*, v. 63, n. 6, 2001.

- 16 STILES, M. D.; MCMICHAEL, R. D. Model for exchange bias in polycrystalline ferromagnet-antiferromagnet bilayers. *Physical Review B*, v. 59, n. 5, 1999.
- 17 SCHOLTEN, G.; USADEL, K. D.; NOWAK, U. Coercivity and exchange bias of ferromagnetic/antiferromagnetic multilayers. *Physical Review B*, v. 71, n. 6, 2005.
- 18 MAAT, S. et al. Perpendicular exchange bias of co/pt multilayers. *Physical Review Letters*, v. 87, n. 8, 2001.
- 19 NOGUES, J. et al. Exchange bias in nanostructures. *Physics Reports-Review Section of Physics Letters*, v. 422, n. 3, p. 65–117, 2005.
- 20 KOON, N. C. Calculations of exchange bias in thin films with ferromagnetic/antiferromagnetic interfaces. *Physical Review Letters*, v. 78, n. 25, p. 4865–4868, 1997.
- 21 BINEK, C.; HOCHSTRAT, A.; KLEEMANN, W. Exchange bias in a generalized meiklejohn-bean approach. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 234, n. 2, p. 353–358, 2001.
- 22 MAURI, D. et al. Simple-model for thin ferromagnetic-films exchange coupled to an antiferromagnetic substrate. *Journal of Applied Physics*, v. 62, n. 7, p. 3047–3049, 1987.
- 23 MALOZEMOFF, A. P. Random-field model of exchange-anisotropy at rough ferromagnetic-antiferromagnetic interfaces. *Physical Review B*, v. 35, n. 7, p. 3679–3682, 1987.
- 24 BERKOWITZ, A. E.; TAKANO, K. Exchange anisotropy - a review. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 200, n. 1-3, p. 552–570, 1999.
- 25 NOWAK, U. et al. Domain state model for exchange bias. i. theory. *Physical Review B*, v. 66, n. 1, 2002.
- 26 DENG, D. S.; JIN, X. F.; TAO, R. B. Exchange bias in ferromagnetic/compensated antiferromagnetic bilayers. *Physical Review B*, v. 65, n. 17, 2002.
- 27 LEDERMAN, D.; RAMIREZ, R.; KIWI, M. Monte carlo simulations of exchange bias of ferromagnetic thin films on fe₂(110). *Physical Review B*, v. 70, n. 18, 2004.
- 28 KELLER, J. et al. Domain state model for exchange bias. ii. experiments. *Physical Review B*, v. 66, n. 1, 2002.
- 29 MARROWS, C. H. Three-dimensional exchange bias in Co/Pd(n)/femn. *Physical Review B*, v. 68, n. 1, 2003.
- 30 PORTEMONT, C. et al. Exchange bias between cobalt clusters and oxide thin films. *Journal of Applied Physics*, v. 100, n. 3, 2006.
- 31 LIU, H. P.; SUN, Y. Z.; YI, L. New monte carlo simulations to a generalized xy model. *Chinese Physics Letters*, v. 23, n. 2, p. 316–319, 2006. 20 CHINESE PHYSICAL SOC.
- 32 LIU, K. et al. Tailoring exchange bias with magnetic nanostructures. *Physical Review B*, v. 63, n. 6, 2001.

- 33 JUNGBLUT, R. et al. Orientational dependence of the exchange biasing in molecular-beam-epitaxy-grown ni₈₀fe₂₀/fe₅₀mn₅₀ bilayers. *Journal of Applied Physics*, v. 75, n. 10, p. 6659–6664, 1994. 2B.
- 34 KILIAN, K. A.; VICTORA, R. H. Quantitative micromagnetics simulations of exchange bias in the nife/nimn system. *Ieee Transactions on Magnetism*, v. 38, n. 1, p. 4–9, 2002. 1.
- 35 TSAI, S. H.; LANDAU, D. P.; SCHULTHESS, T. C. Monte carlo simulations of ordering in ferromagnetic-antiferromagnetic bilayers. *Journal of Applied Physics*, v. 91, n. 10, p. 6884–6886, 2002. 2.
- 36 MEIKLEJOHN, W. H.; BEAN, C. P. A new magnetic anisotropy. *Ieee Transactions on Magnetism*, v. 37, n. 6, p. 3866–3876, 2001. 1.
- 37 RODRÍGUEZ, G. J. B. O porque de estudarmos os materiais magnéticos. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 20, n. 4, p. 315, 1998.
- 38 REZENDE, S. M. Magnetismo na terra brasilis. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 22, n. 3, p. 293, 2000.
- 39 BUSCHOW, K. H. J.; BOER, F. R. D. *Physics of Magnetism and Magnetic Materials*. [S.l.: s.n.], 2003.
- 40 BERTOTTI, G. *Hysteresis in Magnetism*. [S.l.: s.n.], 1998.
- 41 LAGE, E. J. S. *Física Estatística*. [S.l.: s.n.], 1995.
- 42 KUNKEL, P. Buffon's needle. <http://whistleralley.com/buffon/buffon.htm>.
- 43 MURTHY, K. P. N. *An Introduction to Monte Carlo Simulation os Statistical Physics Problems*. [S.l.: s.n.], 2003.
- 44 GOLDSTEIN, H. *Classical Mechanics*. [S.l.: s.n.], 1973.
- 45 KOSTERLITZ, J. M.; THOULESS, D. J. Ordering, metastability and phase-transitions in 2 dimensional systems. *Journal of Physics C-Solid State Physics*, v. 6, n. 7, p. 1181–1203, 1973.
- 46 KOSTERLITZ, J. M. Critical properties of 2-dimensional xy-model. *Journal of Physics C-Solid State Physics*, v. 7, n. 6, p. 1046–1060, 1974. 14 IOP PUBLISHING LTD.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)