

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA E EXPERIMENTAL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE NANOPARTÍCULAS DE FERRO EM SUBSTRATOS ANTIFERROMAGNÉTICOS

André Stuwart Wayland Torres Silva

Orientador: Prof. Dr. Artur da Silva Carriço

Co-orientadora: Profa. Dra. Ana Lúcia Dantas

Tese apresentada à Universidade
Federal do Rio Grande do Norte como
preenchimento parcial dos requisitos
à obtenção do grau de
Doutor em Física.

Natal, Dezembro de 2007.

Livros Grátis

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

Milhares de livros grátis para download.

Agradecimentos

- A Deus.
- Ao Prof^o. Dr. Artur da Silva Carriço, por sua orientação segura, apoio na realização deste trabalho e por todos os votos de confiança que fazem com que eu zele pelo sentimento de amizade que o tenho.
- À Prof^a. Dra. Ana Lúcia Dantas, pela orientação e esforço realizado no desenvolvimento deste trabalho, assim como seu entusiasmo que tanto me serviram de incentivo.
- A todos os Professores do DFTE, que contribuíram de alguma forma para que este trabalho fosse concretizado.
- Aos meus amigos Calistrato Câmara, Armando Araújo, Francisco Edcarlos e demais colegas com quem partilhei e ainda partilharei de vários momentos acadêmicos, meus agradecimentos.
- Aos meus pais Emídio Francisco da Silva e Fernanda Wayland Torres Silva, por serem os responsáveis por tudo o que hoje sou.
- À minha esposa Mônica Kaline Santiago e Maciel Silva, pela compreensão e pelo apoio nos momentos de incertezas.
- Ao meu filho Gabriel Wayland e Maciel Silva, por simplesmente existir.

- Aos meus irmãos Leonardo Wayland Torres Silva e Emídio Wayland Torres Silva.
- Aos funcionários do CCET-DFTE-PPGF cujo apoio e os serviços prestados foram de grande valia.
- Ao Senhor Walker Costa Diretor da Escola Estadual Antônio Pinto de Medeiros.
- A Srta. Mauriléia Colega de trabalho pelo apoio profissional.
- À CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro.

Resumo

O efeito de tamanho finito nas propriedades magnéticas de sistemas de partículas ferromagnéticas é um tema recorrente. Um dos aspectos largamente investigados é o limite superparamagnético em que a temperatura desestabiliza a ordem magnética de partículas ferromagnéticas pequenas. Acima da temperatura de bloqueio o valor médio térmico do momento magnético da partícula se torna nulo, devido a flutuações térmicas. A temperatura de bloqueio diminui quando o tamanho da partícula é reduzido, refletindo a queda na barreira de energia de anisotropia entre os estados de magnetização uniforme ao longo do eixo uniaxial. A demanda crescente por meios de gravação magnética de alta densidade tem atualmente despertado grande interesse de pesquisa em arranjos periódicos de partículas ferromagnéticas de dimensões nanométricas, beirando o limite superparamagnético. Uma conjectura interessante, levantada experimentalmente, se refere à possibilidade de estabilização da ordem magnética de partículas ferromagnéticas (F) via o acoplamento de interface com substratos antiferromagnéticos (AF) com temperatura de Néel acima da temperatura ambiente. “Esses sistemas se prestam igualmente para elucidar alguns detalhes do efeito de “Exchange bias”, dado que, o efeito de rugosidade de interface e o papel de paredes de domínio, seja no substrato ou na partícula, são reduzidos. Investigamos as fases magnéticas de uma pequena partícula ferromagnética, com diversas geometrias e disposições de deposição sobre um substrato antiferromagnético. Usamos um método de campo local auto-consistente, incorporando o campo de interface e a interação dipolar entre os spins da partícula ferromagnética. Nossos resultados indicam que aumentando a área da interface favorece a formação do estado uniforme. Porém se a altura da partícula é superior a um valor crítico surge um estado não-uniforme em que os spins se

orientam de modo a minimizar a carga magnética superficial. Discutimos o impacto que a competição entre esses efeitos tem na carga magnética líquida, que controla o campo de fuga da partícula e no formato das curvas de histerese. Nossos resultados indicam que a carga líquida não é uma função monotonicamente crescente da altura da partícula e que o deslocamento da histerese pode sofrer alterações relevantes, induzidas pelo campo dipolar, fugindo do padrão esperado normalmente em sistemas F/AF extensos.

Abstract

The effect of finite size on the magnetic properties of ferromagnetic particles systems is a recurrent subject. One of the aspects wide investigated is the superparamagnetic limit where the temperature destroys the magnetic order of ferromagnetic small particles. Above the block temperature the thermal value of the magnetic moment of the particle vanishes, due to thermal fluctuations. The value of the blocking temperature diminishes when the size of the particle is reduced, reflecting the reduction of the anisotropy energy barrier between the uniform states along the uniaxial axis. The increasing demand for high density magnetic media has recently attracted great research interest in periodic arrangements of nanometric ferromagnetic particles, approach in the superparamagnetic limit. An interesting conjecture is the possibility of stabilization of the magnetic order of small ferromagnetic particles (F) by interface coupling with antiferromagnetic (AF) substrate. These F/AF systems may also help to elucidate some details of the effect of exchange bias, because the effect of interface roughness and the presence of domain walls, either in the substrate or the particle, are significantly reduced. We investigate the magnetic phases of small ferromagnetic particles on a antiferromagnetic substrate. We use a self-consistent local field method, incorporating the interface field and the dipole interaction between the spins of the ferromagnetic particle. Our results indicate that increasing the area of the interface favors the formation of the uniform state. However above a critical height value appears a state non-uniform is formed where the spins of in the particle's free surface are rotated with respect to the interface spins direction. We discuss the impact of the competition between the dipolar and interface field on the magnetic charge, that controls the field of flux leakage of the particle, and on the format of the hysteresis curves. Our

results indicate that the liquid magnetic charge is not a monotonically increasing function of the height of the particle. The exchange bias may display anomalous features, induced for the dipolar field of the spins near the F/AF interface.

Lista de Figuras

1.1	Ramac 350, primeiro registro de disco rígido, produzido pela IBM.	2
1.2	Exemplos das técnicas Nanolitográficas: (a) electron beam; (b) laser interference; (c) diblock copolymer; and (d) alumina nanopores. Imagens fornecidas por A. Hoffmann, C. Ross, K. Liu, C.P. Li, e I.V. Roshchin. Publicadas no MRS BULLETIN/JULY 2003	4
1.3	Nanofabricação das partículas magnéticas. (a) Esquematização do processo de fabricação. (b) máscara que recebe o material magnético. (c) Matriz de nanodots depois de fabricada.	5
1.4	Matriz de dots.	6
1.5	Representação da estrutura de multidomínio.	7
1.6	Representação da estrutura de monodomínio.	8
1.7	Tamanho Crítico para os materiais ferromagnéticos para a existência de monodomínios.	9
1.8	Relação entre o tamanho da partícula e o comprimento de troca.	9
1.9	Flutuação da magnetização no estado superparamagnético.	10
1.10	Variação da coercividade com o diâmetro das partículas.	11
1.11	Avanços dos discos rígidos em 40 anos.	12
1.12	Representação esquemática da gravação magnética longitudinal.	14
1.13	Representação esquemática da gravação magnética perpendicular	14
1.14	Representação esquemática das possíveis fases magnéticas em uma partícula de baixa espessura.	15
1.15	Simulação magnética para um filme de base quadradas de permalloy com ($a = 20\mu m$) e espessura de $20nm$ resultando no estado “C-state”.	17

1.16	Simulação magnética para um filme de base quadradas de permalloy com ($a = 20\mu m$) e espessura de $20nm$ resultando no estado “S-state”.	17
1.17	Simulação magnética para um filme de base quadradas de permalloy com ($a = 20\mu m$) e espessura de $20nm$ resultando no estado “vortex01”.	18
1.18	Simulação magnética para um filme de base quadradas de Cobalto com ($a = 20\mu m$) e espessura de $20nm$ resultando no estado “flower-state”.	18
1.19	Dois tipos de estados iniciais encontrados na simulação estocástica. Topo: “C-State”. Fundo: “S-State”.	19
1.20	Amostra da discretização em (a) monocamadas e (b) bicamadas.	20
1.21	Diferentes distribuições de magnetização em (a) monocamada e (b) bicamada de dots magnéticos de base quadrada.	21
1.22	Padrão de equilíbrio da magnetização para um cubo de ferro com $100 nm$ de lado que mostram que os dois estados “vortex-state” da magnetização não são equivalentes.	23
1.23	A criação de um par de singularidades ao longo do eixo central durante a aproximação dinâmica para um estado de baixa energia depois que um forte campo, $1.6T$, é repentinamente afastado. O cubo de ferro $100 \times 100 \times 100 nm^3$ é dividido em 125000 células.	23
2.1	Energia magnética $E(\Phi_B)$ em unidades de K/spins no bloco em função da direção Φ_B (em graus) do campo magnético externo.	26
2.2	Barreira de energia ΔE (JFM-AFM) em unidades de K/spins no bloco em função do acoplamento de troca J_{FM-AFM} . Quatro valores diferentes de interação de troca do substrato AFM são supostos: (a) $J_{AFM} = -50K$, (b) $J_{AFM} = -100K$, (c) $J_{AFM} = -130K$ e (d) $J_{AFM} = -200K$.	26

2.3	Ultrapassando o limite superparamagnético para nanopartículas magnéticas. (a) Para as partículas (FM) ferromagnéticas muito pequenas a energia magnética de anisotropia (responsável para manter a magnetização orientada em determinadas direções) é comparável à energia térmica (kT). Quando isto acontece, as partículas tornam-se superparamagnéticas; As flutuações térmicas tornam aleatórias as direções da magnetização entre as orientações paralela e antiparalela. (b) Quando a nanopartícula ferromagnética é depositada sobre uma superfície antiferromagnética (Anti-FM) a interação de “exchange bias” na relação FM/Anti-FM fornece uma energia de anisotropia adicional, que estabiliza a magnetização em uma direção e impede o superparamagnetismo.	29
2.4	Modelo utilizado para representação de uma partícula ferromagnética com geometria retangular	30
2.5	Número de interações feitas em função do número de spins de ferro em um dot de 100 nm × 100 nm × 100 nm.	32
2.6	Divisão de uma partícula FM cúbica em células cúbicas com aresta menor que o comprimento de troca do Material FM.	33
2.7	Comportamento das energias E_{mm} (azul) e E_{MM} (vermelho).	35
2.8	Erro percentual cometido na aproximação.	35
2.9	Orientação dos eixos coordenados e representação da configuração de equilíbrio $\delta E \simeq 0$	38
2.10	Comparação do tamanho das células simulações feitas para uma partícula magnética com anisotropia magnética uniaxial (eixo x) e campo dipolar sobre todas as células dentro do raio de corte (6 células). As células têm dimensões laterais l : (a) $l = 10$ nm, (b) $l = 5$ nm e (c) $l = 2.5$ nm.	42
2.11	Fuga de Fluxo magnético de uma partícula que tem seus momentos magnéticos da interface alinhados na direção x pelo campo de interface.	43
2.12	Comportamento da densidade superficial de carga magnética média das partículas, com geometrias retangulares e quadradas, variando com o número de planos de células que constituem a partícula. As geometrias escolhidas foram: (A) Base Quadrada; (B) Base Retangular.	44

2.13	“S-state” encontrado para partícula com base de geometria quadrada, $N_x = 10$, $N_y = 10$ e $N_z = 10$, na ausência de campo de interface.	47
2.14	Interface estabilizada com giro de aproximadamente 90° da magnetização entre cada plano. Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 10$ e $N_z = 10$ e campo de interface igual ao campo dipolar.	48
2.15	Interface estabilizada com giro na magnetização de aproximadamente 180° entre os planos da interface (Fundo), do meio e do topo da partícula. Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 10$ e $N_z = 10$ e campo de interface 5 vezes maior que o campo dipolar.	48
2.16	Estado Remanente. Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 10$ e $N_z = 10$ e campo de interface 10 vezes maior que o campo dipolar.	49
2.17	“S-state”. Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 20$ e $N_z = 10$ sem campo de interface.	50
2.18	Estado não remanente (ENR). Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 20$ e $N_z = 10$ e campo de interface com o mesmo valor do campo dipolar.	51
2.19	Interface estabilizada com giro de 90° . Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 20$ e $N_z = 10$ e campo de interface 5 vezes maior que o campo dipolar.	52
2.20	Estado Remanente. Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 20$ e $N_z = 10$ e campo de interface 10 vezes maior que o campo dipolar.	52
2.21	Estado remanente (ER) “Uniform”.	56
2.22	Estado quase remanente (EQR) “Twist-I”.	57
2.23	Estado não remanente (ENR) “C-flower”.	58
2.24	Estado não remanente (ENR) “Z-flower”.	59
2.25	Estado não remanente (ENR) “Twist-II”.	59
2.26	Estado não remanente (ENR) “Vortex”.	60
2.27	Diagrama de fases para campo de interface nulo.	61
2.28	Diagrama de fases para campo de interface muito forte $H_J = 16.3$ kOe.	62
3.1	Curva de histerese idealizada de um material ferromagnético.	65
3.2	Curva de histerese com EB.	67

3.3	Diagrama esquemático da configuração dos momentos magnéticos da bicamada FM/AFM. (a) Diferentes estágios das configurações dos momentos magnéticos de um laço de histerese com “exchange biased”(b).	68
3.4	Laço de histerese para FeF_2 200Å/networked– $Fe(150\text{Å})/Al(40\text{Å})$ a 10K, apresentando “exchange bias” e assimetria no ramo de subida do laço.	69
3.5	Representação esquemática de uma partícula ferromagnética em um substrato antiferromagnético (FM/AFM).	71
3.6	Variação da altura t de uma partícula ferromagnética fina quadrada de lado d disposta sobre um substrato antiferromagnético (FM/AFM). A interação entre os materiais (FM/AFM) existe nos momentos magnéticos da interface do FM.	73
3.7	Laços de Histerese para partículas com dimensões de 21 nm × 21 nm × 12 nm . Os valores do campo de interface estão indicados na escala ao lado, variando no intervalo de 0 – 4.89 kG.	74
3.8	Laços de Histerese para partículas com dimensões de 21 nm × 21 nm × 15nm . Os valores do campo de interface estão indicados na escala ao lado, variando no intervalo de 0 – 3.26 kG.	75
3.9	Dependência de H_{EB} vs. H_{INT} para partículas com dimensões de 21 nm × 21 nm × 15 nm . Os valores do campo de interface estão indicados na escala ao lado, variando no intervalo de 0 – 3.26 kG.	76
3.10	Laço de Histerese para partículas com dimensões de 21 nm × 21 nm × 12 nm com campo de interface igual a 6.52 kG.	78
3.11	Laço de Histerese para partículas com dimensões de 21 nm × 21 nm × 12 nm com campo de interface igual a 9.78 kG.	78
3.12	Laço de Histerese para partículas com dimensões de 21 nm × 21 nm × 15 nm com campo de interface igual a 6.52 kG.	78
3.13	Laço de Histerese para partículas com dimensões de 21 nm × 21 nm × 15 nm com campo de interface igual a 9.78 kG.	78

3.14	Mapas para os momentos magnéticos calculados nos pontos a, b e c selecionados na histerese da partícula $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 15 \text{ nm}$, submetida a um campo de interface de 6.52 kG	79
3.15	Mapas para o campo de dipolar calculados nos pontos a, b e c selecionados na histerese magnética da partícula $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 15 \text{ nm}$, em um campo de interface de 6.52 kG	80
3.16	Campo dipolar dependendo apenas da carga magnética superficial σ	81
3.17	Campo dipolar dependendo da carga magnética superficial σ e volumétrica ρ	81
3.18	Coercividade em partículas FM finas, $h = 12 \text{ nm}$, com base quadrada, $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm}$, $30 \text{ nm} \times 30 \text{ nm}$, $36 \text{ nm} \times 36 \text{ nm}$ e $60 \text{ nm} \times 60 \text{ nm}$	82
3.19	Representação esquemática: (a) do campo dipolar sobreposto a um mapa de cor representando a densidade de carga magnética de volume ρ , (b) da configuração de momentos magnéticos, na camada do meio ($I_z = 5$) de uma partícula quadrada de ferro com $h = 12 \text{ nm}$ e $l = 12 \text{ nm}$, (c) densidade volumétrica média de carga dentro de uma faixa com valor fixo de I_x e (d) campo dipolar ao longo de um laço de histerese. O código de barra de cor no painel (a) indica o valor de ρ , e no painel (b) indica o ângulo com o eixo z	84
3.20	Remanência de partículas com bases quadrada $30 \times 30 \text{ nm}^2$, campo de interface $H_{int} = 6.5 \text{ kG}$ e espessura de $t = 15$ (círculo cheio) and 24 nm (círculo vazado). Do lado direito: a fase magnética de uma partícula fina (a), $t = 15 \text{ nm}$, e para uma partícula espessa (b), $t = 24 \text{ nm}$ for $H = 0$	87
3.21	Partícula de Fe para três valores diferentes de campo de interface. A magnetização remanente é iniciada na saturação, com $H = 2.2 \text{ kG}$, e o campo externo é reduzido até zero. As imagens no lado direito indicam os arranjos dos momentos magnéticos para a partícula FM para as curvas $H = 0$ (quadrados azuis), $H_{INT} = 1.63 \text{ kG}$ (círculo branco) e $H_{INT} = 16.3 \text{ kG}$ (círculo azul).	88
3.22	Partícula com geometria retangular com maior lateral l , perpendicular ao eixo x (eixo fácil).	89
3.23	Ciclos de histerese para campos de interface variando entre 0 e 9.78 kG para partículas com bases de $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm}$ (a), $21 \text{ nm} \times 24 \text{ nm}$ (b), $21 \text{ nm} \times 27 \text{ nm}$ (c) e $21 \text{ nm} \times 30 \text{ nm}$ (d), todos com 12 nm de espessura.	90

3.24	Partículas com geometria retangular $l = 24$ nm (a), $l = 27$ nm (b) e $l = 30$ nm (c). . . .	91
3.25	Partículas com geometria retangular $l = 24$ nm (a), $l = 27$ nm (b) e $l = 30$ nm (c). . . .	92
3.26	Partículas com geometria retangular $l = 24$ nm (a), $l = 27$ nm (b) e $l = 30$ nm (c). . . .	93
3.27	Partícula com geometria retangular com maior lateral l , paralela ao eixo x (eixo fácil). . .	95
3.28	Ciclos de histerese para campos de interface variando entre 0 e 9.78 kG para partículas com bases de 21 nm \times 21 nm (a), 24 nm \times 21 nm (b), 27 nm \times 21 nm (c) e 30 nm \times 21 nm (d), todos com 12 nm de espessura.	96
3.29	Perfis de magnetização para campo externo de -1.5 kG para partículas com bases de 21 nm \times 21 nm (a), 24 nm \times 21 nm (b), 27 nm \times 21 nm (c) e 30 nm \times 21 nm (d), todos com 12 nm de espessura.	99
3.30	Perfis de magnetização para campo externo de -1.5 kG para partículas com bases de 21 nm \times 21 nm (a), 24 nm \times 21 nm (b), 27 nm \times 21 nm (c) e 30 nm \times 21 nm (d), todos com 12 nm de espessura.	100
3.31	Campo coercivo em função do campo de interface para partículas com bases de 21 nm \times 21 nm (a), 24 nm \times 21 nm (b), 27 nm \times 21 nm (c) e 30 nm \times 21 nm (d), todos com 12 nm de espessura.	101
3.32	Campo coercivo em função do campo de “exchange bias” para partículas com bases de 21 nm \times 21 nm (a), 24 nm \times 21 nm (b), 27 nm \times 21 nm (c) e 30 nm \times 21 nm (d), todos com 12 nm de espessura.	102
4.1	Aparato para gravação magnética termicamente auxiliada.	104
4.2	Modificação da coercividade dos sistema com a gravação magnética termicamente assistida.	105
4.3	Modificação da barreira de energia por efeitos de aumento de temperatura.	106
4.4	Representação esquemática do comportamento do momento magnético da camada de interface do AFM com a temperatura.	107
4.5	Histerese térmica da partícula de Fe(30nm \times 15 nm \times 15nm)/NiO. Ciclo Térmico com campo externo oposto o campo de interface. Aquecimento ao longo de caminho (a) e resfriamento ao longo de caminho (b).	110

4.6	Mapas dos momentos magnéticos das células, a temperatura ambiente, das camadas de superfície e de interface, correspondendo aos pontos (a) e (b) indicados na Figura 4.5. As cores do fundo indicam o ângulo entre os momentos magnéticos e o eixo de z.	111
4.7	Partículas magnéticas mais alongadas na direção do eixo de anisotropia. L corresponde ao valor do lado da face quadrada perpendicular ao eixo de anisotropia da partícula (eixo- x) e D ao lado mais alongado paralelo ao eixo de anisotropia.	112
4.8	Histerese térmica para $H = 3$ kOe de partículas de Fe com dimensões $30 \text{ nm} \times L(\text{nm}) \times L(\text{nm})$. Onde a escala na figura indica os valores de L	113
4.9	Partículas com base de geometria retangular e faces perpendiculares ao eixo de anisotropia quadrada, (a) $30 \text{ nm} \times 18 \text{ nm} \times 18 \text{ nm}$ e (b) $30 \text{ nm} \times 12 \text{ nm} \times 12 \text{ nm}$, com seus respectivos laços de histerese. A partícula de face $12 \text{ nm} \times 12 \text{ nm}$ apresenta uma maior coercividade.	114
4.10	Componentes da magnetização nas direções x e z e os respectivos mapas de momentos magnéticos para uma partícula de $120\text{nm} \times 60\text{nm} \times 12\text{nm}$ de Fe em um substrato de NiO na presença de um campo externo de 4 kOe.	115
A.1	Duas células c_1 e c_2 , com seus respectivos momentos magnéticos.	121
A.2	Estrutura BCC do ferro.	121
A.3	Interação de troca entre duas células vizinhas c_1 e c_2	122
B.1	Representação de spins vizinhos separados por uma distância r_{ij}	133

Sumário

Agradecimentos	i
Resumo	iii
Abstract	v
Lista de Figuras	vii
1 Introdução	1
1.1 Gravação Magnética	1
1.1.1 Nanopartículas Magnéticas (DOT's)	3
1.1.2 Superparamagnetismo	6
1.2 Fases Magnéticas em Nanopartículas	13
1.2.1 Observação das Fases Magnéticas em Nanopartículas na literatura	15
2 Estabilização de Partículas Ferromagnéticas	24
2.1 Modelo Inicial	30
2.1.1 Resultados	41
2.1.2 Estudo da densidade de carga magnética média	43
2.1.3 Fases Magnéticas para uma Partícula Magnética	46
2.2 Modelo otimizado	53
2.2.1 Alteração na energia de troca	53
2.2.2 Resultados	54
3 Histerese magnética em partículas nanométricas	64
3.1 Histerese magnética	64
3.2 Resultados experimentais	66

3.3	Resultados para partículas finas de Fe	70
3.3.1	“Exchange Bias” (EB)	73
3.3.2	Assimetria na histerese magnética	77
3.3.3	Coercividade	81
3.4	Partículas espessas de Fe	86
3.4.1	Carga magnética e Remanência	86
4	Histerese térmica em partículas nanométricas	103
4.1	Estabilidade térmica	103
4.2	Histerese térmica	108
5	Conclusões	116
A	Aproximação com Células	120
A.1	Definição de célula	120
A.2	Cálculo das energias	122
A.2.1	Energia de Troca	122
A.2.2	Energia de Anisotropia	123
A.2.3	Energia de Interface	124
A.2.4	Energia Dipolar	124
A.2.5	Energia Total	125
A.2.6	Cálculo do Campo Efetivo	126
A.2.7	No programa	127
B	Modificação no Parâmetro de Troca	132
B.1	A interação da troca	132

Capítulo 1

Introdução

1.1 Gravação Magnética

Materiais magnéticos têm sido usados em amplas variedades de aplicações tecnológicas entre elas se destaca a produção de meios para gravação magnética de dados. Apresentaremos um relato sucinto deste fenômeno físico e como esta aplicação tecnológica tem evoluído no decorrer dos anos.

A Gravação magnética é um método de se preservar informação (sons, imagens e dados) através da magnetização seletiva de regiões de um meio magnético. Ela está baseada na Lei da Indução de Faraday^{1,2}, onde a variação de fluxo magnético pode induzir uma corrente elétrica num circuito. A utilização desse fenômeno eletromagnético proporcionou inúmeras aplicações tecnológicas, entre elas, em especial, na área de informática.

Os primeiros registros da gravação magnética datam de 1898 quando o engenheiro dinamarquês Valdemar Poulsen apresentou o princípio da gravação magnética e o patenteou, na Dinamarca. O primeiro gravador magnético foi denominado “telegraphone”. Poulsen exibiu seu dispositivo na exposição de Paris em 1900, em 1903 fundou a American Telegraphone Co., logo depois que o congresso americano validou sua patente americana número 661.619³. Este fato é um marco inicial na história da gravação magnética pois, todas as aplicações que conhecemos hoje, som, vídeo e computador, eram inexistentes até então⁴.

Outro grande passo na gravação magnética foi dado em 1956, quando a IBM introduziu o primeiro disco rígido magnético do mundo para o armazenamento de dados. O



Figura 1.1: Ramac 350, primeiro registro de disco rígido, produzido pela IBM.

RAMAC (Random Access Method of Accounting and Control), que tinha a capacidade de armazenamento de dados da ordem de 10^{-3}Mb/in^2 , Figura 1.1⁵, e tinha dimensões de 13 polegadas (aproximadamente 33 *cm*) de diâmetro e 20 polegadas (aproximadamente 50 *cm*) de altura. Só para efeito de comparação, um disquete 3^{1/4}, já ultrapassado atualmente, tem densidade de armazenamento de 0,33 Mb/in².

Desde o RAMAC até os dias de hoje, a quantidade de dados que podem ser gravados em discos rígidos tem evoluído de forma espantosa, Figura 1.11⁶. Hoje já se alcança a densidade de 10^{-3}Gb/in^2 . O crescimento na densidade de armazenamento de dados foi

acelerado na década passada, ela praticamente dobrou a cada três anos; com a introdução das cabeças de leitura magnetoresistivas em 1991 a frequência com que a densidade de armazenamento dobra foi reduzida para dois anos com o fenômeno da magnetoresistência gigante (MRG)⁷, que chegou ao mercado em 1997, a densidade tem dobrado a cada ano (Figura 1.11).

1.1.1 Nanopartículas Magnéticas (DOT's)

Um fator relevante neste aumento da capacidade de armazenar dados é o avanço tecnológico das técnicas de construção de estruturas magnéticas cada vez menores, conduzindo a um significativo esforço de pesquisa em materiais magnéticos nanoestruturados, enfocando as pesquisas no seu comportamento, face a mudança de geometrias, campo de interface (estabilizante) entre outros fatores importantes. Essa evolução tecnológica conduziu à descoberta dos filmes finos, por exemplo, estruturas que são preparadas por diversos métodos, dependendo da aplicação, composição do material, bem como de sua espessura. Esses filmes são feitos depositando-se gradualmente camadas de átomos ou moléculas de um material magnético sobre a superfície de outro material, o substrato, que pode ser magnético ou não. Atualmente os filmes podem ser construídos com espessuras nanométricas, as chamadas nanoestruturas magnéticas.

A fabricação de nanopartículas pode ser feita utilizando diversas técnicas, uma das mais usadas no processo de nanofabricação é a litografia, termo coletivo para diversos processos, incluindo todo o processo de fabricação, desde o revestimento do substrato até a deposição. Existe uma vasta literatura sobre os processos básicos de litografia⁸. As técnicas nanolitográficas de deposição e escrita são várias, dentre elas, podemos citar a “Electron beam lithography”^{8,9}, “interference lithography”¹⁰, “X-ray lithography”¹¹, “Sputtering”¹² e “Electron Beam”¹³ que tem como princípio básico o uso de feixes de partículas como elétrons para gerar padrões em uma superfície determinada a partir da qual, vai ser construída a matriz magnética onde serão gravadas as informações. A Figura 1.2, ilustra como estas técnicas estão cada vez mais avançadas e como podem modelar meios em escalas cada vez menores¹⁴.

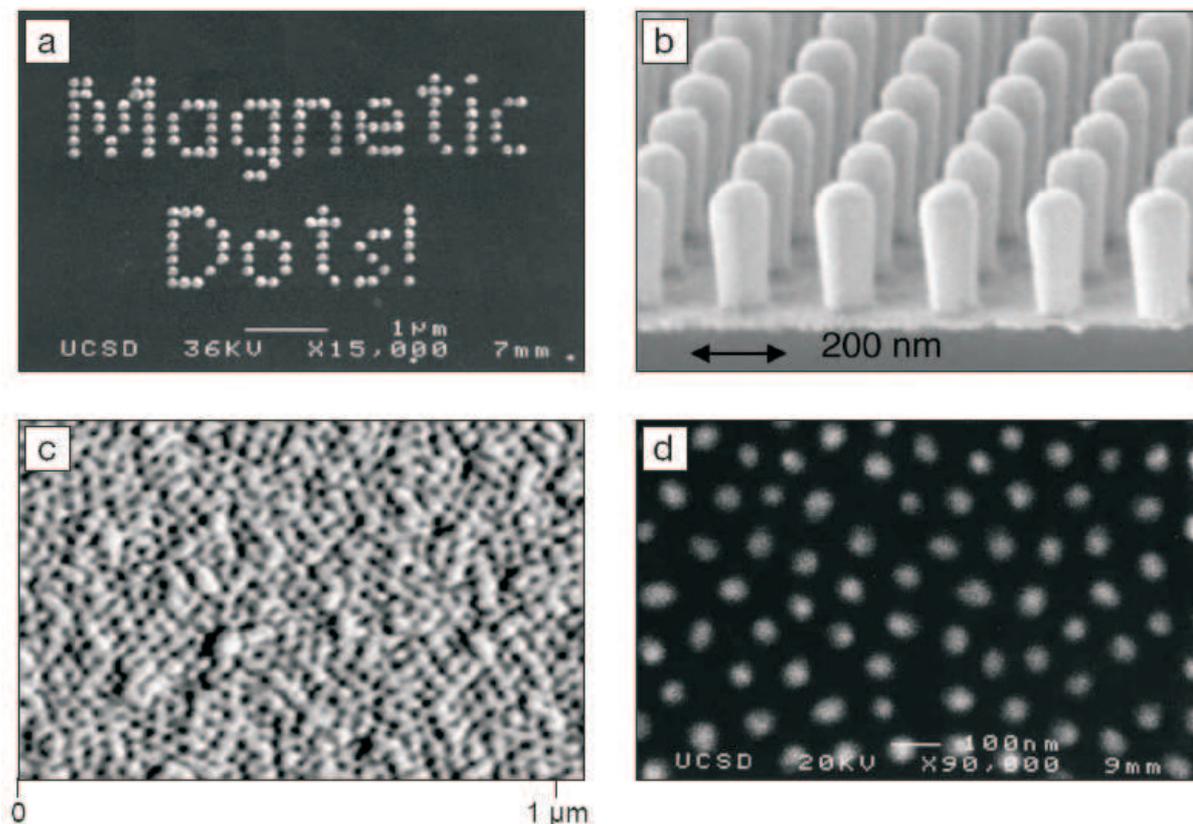


Figura 1.2: Exemplos das técnicas Nanolitográficas: (a) electron beam; (b) laser interference; (c) diblock copolymer; and (d) alumina nanopores. Imagens fornecidas por A. Hoffmann, C. Ross, K. Liu, C.P. Li, e I.V. Roshchin. Publicadas no MRS BULLETIN/JULY 2003

Uma técnica que tem sido usada para construção de nanoestruturas é baseada em máscaras, de alumínio por exemplo, com poros de diâmetros inferiores a $100 - nm$. O material magnético é então depositado nesses poros pelo método de eletrodeposição¹⁵, Figura 1.3¹⁶.

A fabricação de máscaras porosas de alumínio com diâmetros reduzidos são relevantes para viabilizar a densidade de gravação magnética da ordem de $Tbits/in^2$. Com estas máscaras nanopartículas de materiais ferromagnéticos são fabricadas pelo método “Electron beam lithography” e depois a mascara é removida, processo denominado “lift-off¹⁷”.

Conforme aproxima-se do limite superparamagnético¹⁸, devido ao avanço das técnicas de construção de objetos nanomagnéticos, anteriormente citadas, tais objetos, usados para armazenamento de dados (Data Storage^{19,20}) são denominados como meios modelados

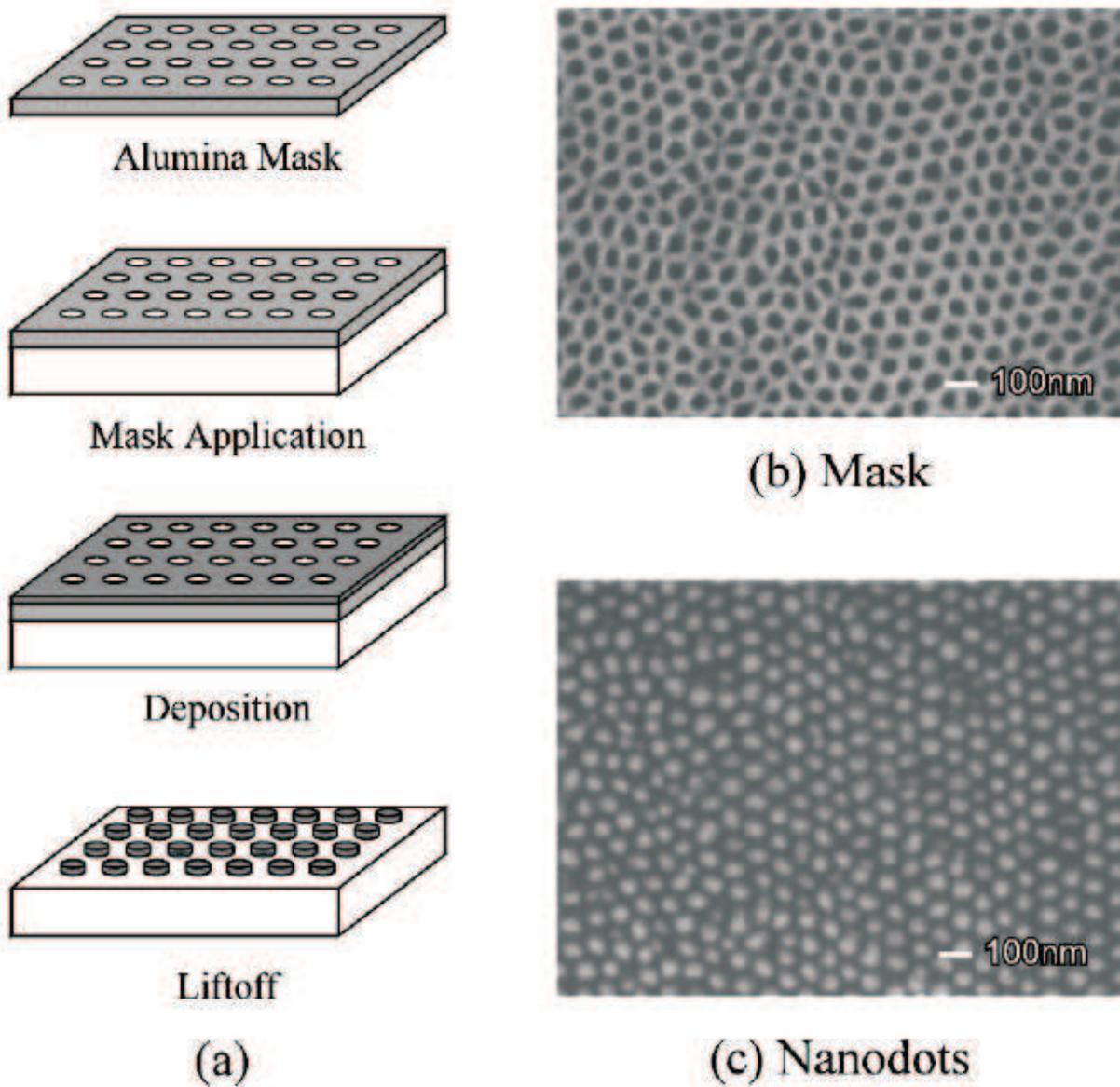


Figura 1.3: Nanofabricação das partículas magnéticas. (a) Esquemática do processo de fabricação. (b) máscara que recebe o material magnético. (c) Matriz de nanodots depois de fabricada.

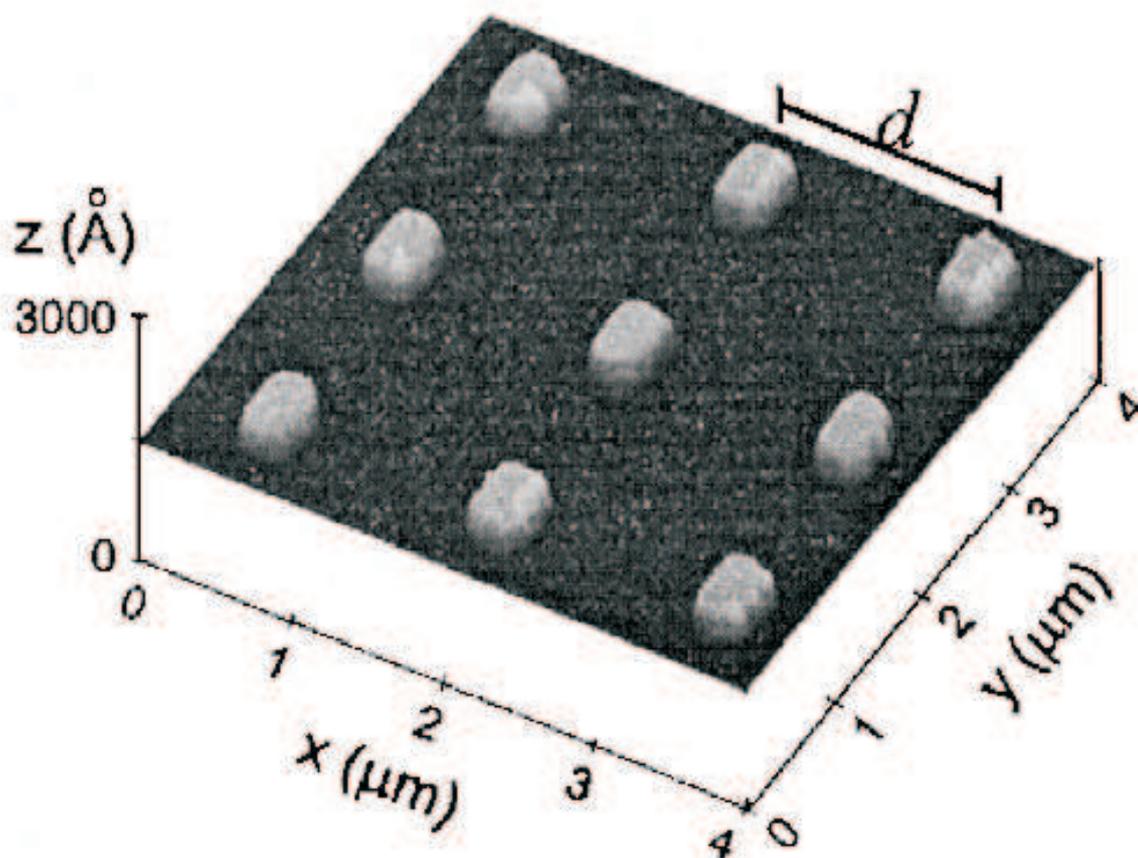


Figura 1.4: Matriz de dots.

(Patterned Media^{21,22}), e os avanços na densidade de armazenamento de dados em meios modelados têm acontecido principalmente com a construção de matrizes, Figura 1.4²³, de partículas em escala nanométrica, denominadas “dots”.

1.1.2 Superparamagnetismo

A natureza tende sempre a procurar um mínimo de energia para tudo que existe^{24,25,26}, quando alguma mudança ocorre, a quantidade de energia necessária para essa mudança é a menor possível, este fato é conhecido como Princípio da Mínima Ação^{27,28}. Em um sólido magnético, que tem um grande número de momentos magnéticos, determinadas geometrias criam cargas magnéticas na superfície e isso conduz a um aumento da energia

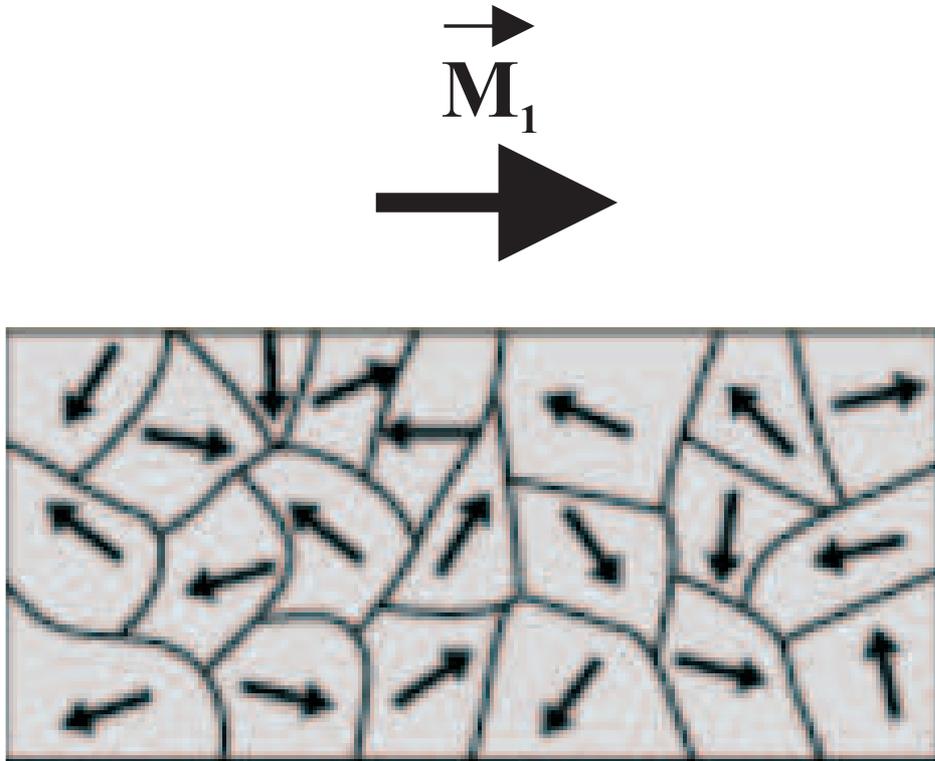


Figura 1.5: Representação da estrutura de multidomínio.

total no material²⁹. Este aumento na energia é reduzido com o aparecimento de estruturas denominadas, domínios magnéticos³⁰⁻³².

As Figuras 1.5 e 1.6 mostram estas configurações dos momentos magnéticos de cada situação, onde os vetores \vec{M}_1 e \vec{M}_2 , em cada caso, representa a magnetização do material, no caso \vec{M}_2 tem uma energia magnetostática maior que \vec{M}_1 , . Sendo as dimensões do material magnético são bastante reduzidas, algumas dezenas nanômetros, estes domínios se concentram em um volume reduzido formando um único domínio, partícula monodomínio, Figura 1.6.

O tamanho para o qual um material passa de multidomínio para monodomínio depende de cada material³³, sendo conhecido como Tamanho Crítico. Esse tamanho tem que ser menor que o comprimento de troca do material³⁴. O comprimento de troca do material depende de sua configuração estrutural e ele pode ser entendido como o espaço para que não haja liberdade para que os momentos magnéticos do material constituam uma parede

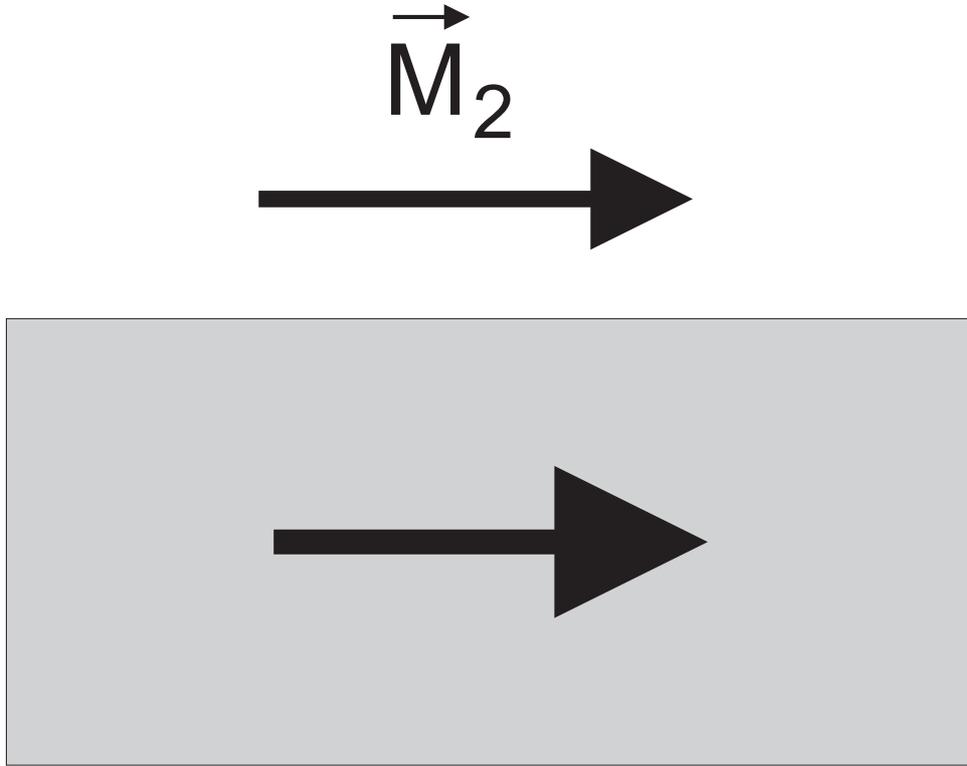


Figura 1.6: Representação da estrutura de monodomínio.

de domínio³⁵, ver Figura 1.8. Ele pode ser calculado para qualquer material magnético de acordo com a expressão:

$$l_{Tr} = \left(\frac{A}{2\pi M_S} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.1)$$

onde, M_S é a magnetização de saturação, A é a constante de troca e μ_0 é a permeabilidade magnética no vácuo.

Partículas magnéticas nessa escala têm um comportamento complexo em que a magnetização acomoda-se entre um eixo preferencial, denominado “*eixo fácil*”^{32,36}, originado da anisotropia do material. Por outro lado, um fator que interfere na modificação da direção da magnetização é a denominada energia térmica³⁷, $E_T = k_B T$, onde k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura, cuja tendência é a de desordenar os momentos,

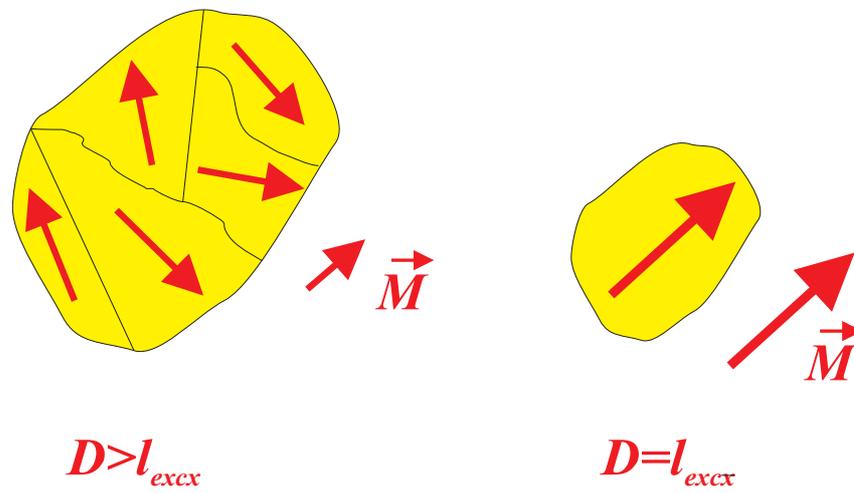


Figura 1.7: Tamanho Crítico para os materiais ferromagnéticos para a existência de monodomínios.

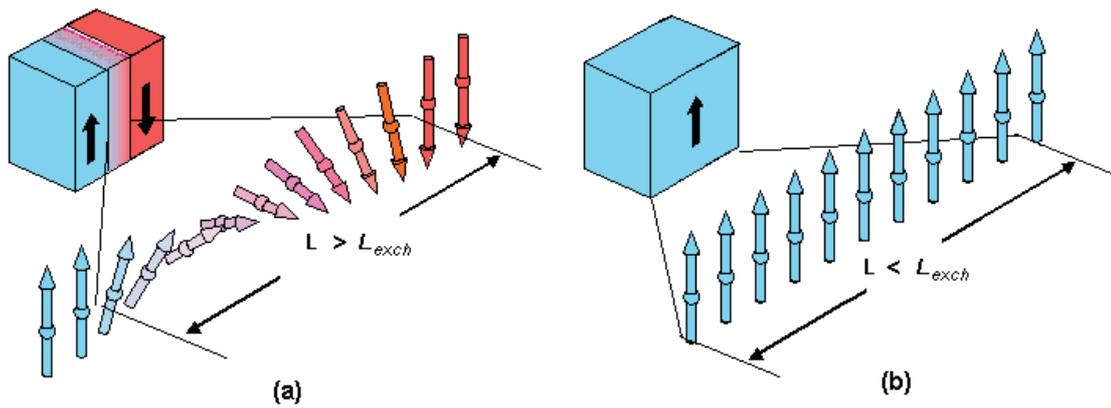


Figura 1.8: Relação entre o tamanho da partícula e o comprimento de troca.

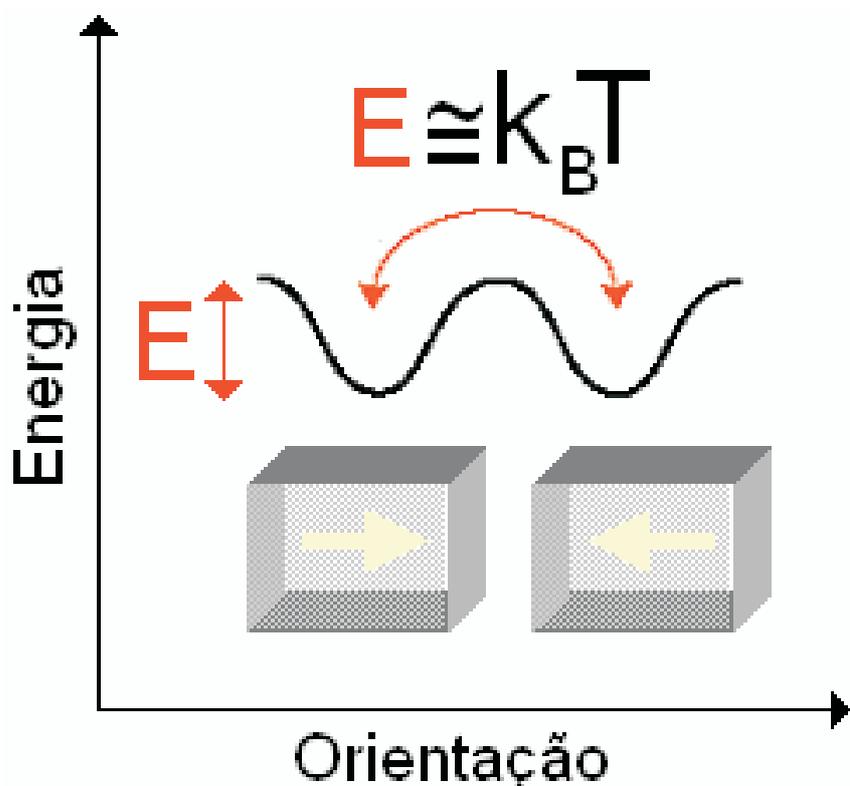


Figura 1.9: Flutuação da magnetização no estado superparamagnético.

fazendo com que os momentos não fiquem em uma direção fixa, oscilando em todas as direções, denominada flutuação térmica, tratada, pioneiramente, pelo Néel/Brown Model of Thermally Activated Magnetization Reversal³⁸.

Na medida em que os tamanhos destas estruturas magnéticas vão diminuindo a ativação térmica³⁹ vai se tornando um fator mais relevante, desde que a ativação térmica reduz a estabilidade do estado magnético e fornece um limite para a densidade de armazenamento de dados, este é o limite superparamagnético⁴⁰. Neste caso, em campo nulo estas estruturas magnéticas nanoscópicas, com anisotropia uniaxial K e volume V , podem assumir somente dois estados “up” ou “down”, como mostra a Figura 1.9.

Quando a energia térmica torna-se grande, $k_B T > KV$, onde k_B é a constante de Boltzmann, os spins constituintes da estrutura podem assumir qualquer um dos dois estados, ou seja, agitação térmica faz com que o sistema magnético perca a estabilidade,

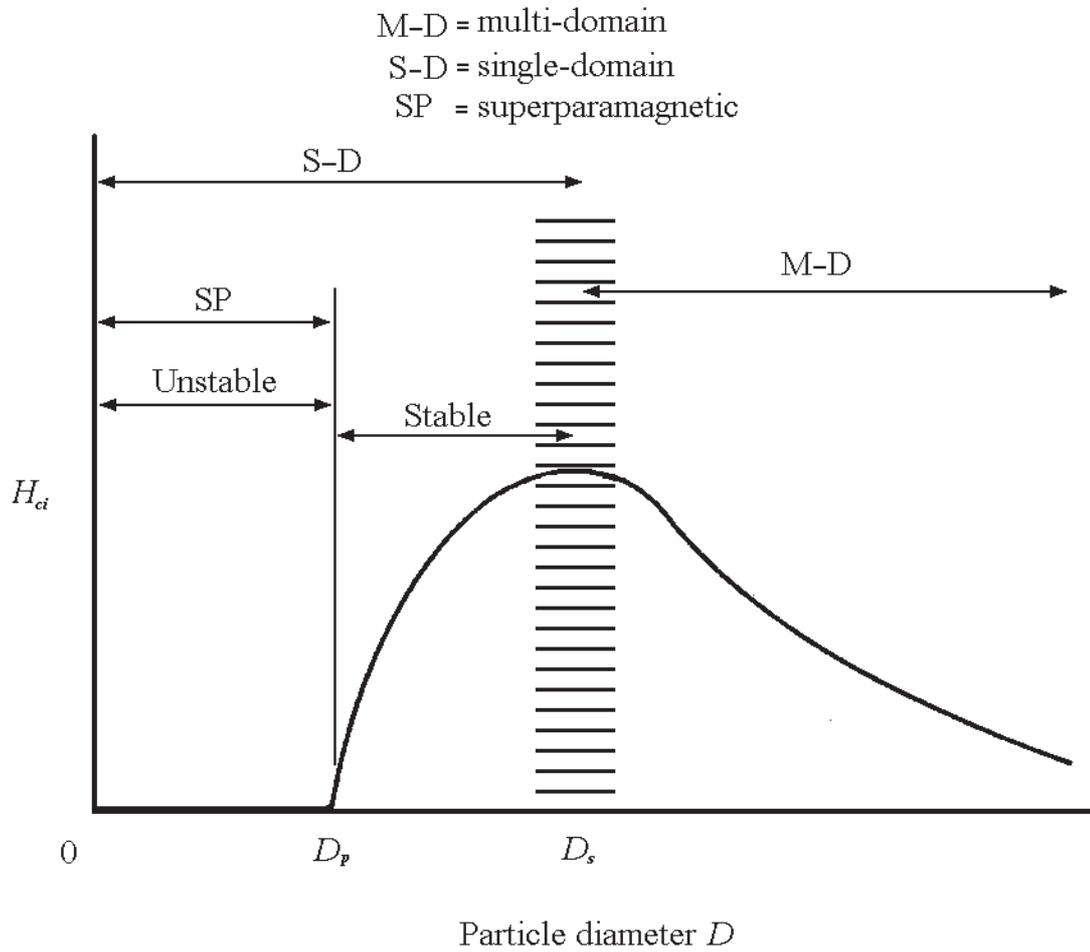


Figura 1.10: Variação da coercividade com o diâmetro das partículas.

sendo a energia térmica suficiente para ultrapassar a barreira de energia de anisotropia fazendo a magnetização flutuar entre os mínimos de energia muito rapidamente o que faz com que o momento magnético observado da partícula seja muito pequeno. Esta passagem entre os dois estados ocorre a uma temperatura T_B denominada “blocking temperature³⁹” que é determinada experimentalmente pelo cancelamento da remanência. Esse fenômeno é denominado Superparamagnetismo¹⁸ e a partícula está em um estado Superparamagnético.

A Figura 1.10⁴¹ mostra o comportamento da coercividade de minúsculas partículas magnéticas com o seu diâmetro D . Acima do diâmetro D_s , regime denominado de mul-

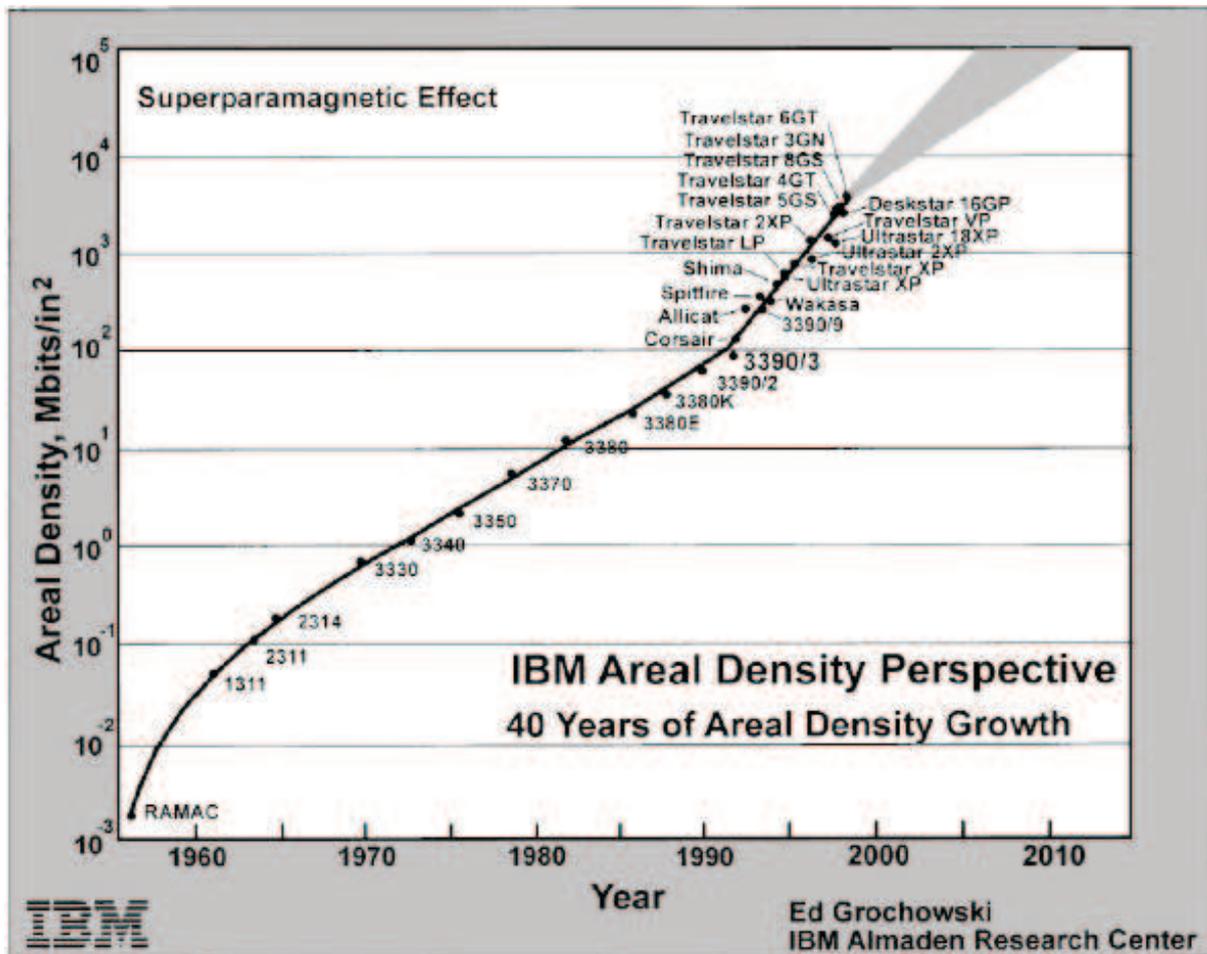


Figura 1.11: Avanços dos discos rígidos em 40 anos.

tidomínio a magnetização muda por movimento de parede de domínio exibindo uma coercividade que diminui à medida que o diâmetro da partícula aumenta. Abaixo do diâmetro crítico D_S , não precisamente definido, as partículas tornam-se monodomínios e a coercividade é máxima, nestas partículas pequenas a magnetização muda por mecanismos de rotação de spins. Finalmente abaixo do diâmetro crítico D_P a coercividade é nula por causa dos efeitos térmicos. Nesta região ocorre o limite superparamagnético que é um fator importante a ser levado em conta, pois fornece um limiar para a densidade de armazenamento de dados, a Figura 1.11 mostra o avanço da capacidade deste armazenamento⁴².

1.2 Fases Magnéticas em Nanopartículas

As nanopartículas magnéticas podem exibir diversas fases magnéticas quando submetidas a campos magnéticos externos, por meio de sua própria construção, disposição da geometria, por exemplo, que podem levar estados de energia que não são favoráveis à sua aplicabilidade tecnológica devido ao efeito de cargas magnéticas em algumas superfícies das partículas. Nesta seção, vamos mostrar e identificar algumas destas fases levando em conta aspectos com interesse científico e aplicabilidade tecnológica.

Inicialmente é necessária uma distinção entre o problema que vamos estudar e as fases que apresentaremos aqui. As fases apresentadas são encontradas em nanopartículas de diversas geometrias (base retangular, base quadrada, base circular) e com diversas dimensões, todas em escala nanométrica. O problema que iremos abordar, nesta tese, leva em conta uma partícula com geometria bem definida, retangular, que está sobre um substrato antiferromagnético que tem por objetivo a estabilização magnética desta partícula, quando suas dimensões são reduzidas até que a energia térmica desta seja suficiente para desestabilizá-la.

Um fator importante a ser observado é a homogeneidade na magnetização destas nanopartículas magnéticas. Esta homogeneidade é função do tamanho, da anisotropia do material que constitui a partícula, bem como, do efeito dipolar que age sobre os spins do material ferromagnético.

O principal interesse da indústria de armazenamento de dados ⁴³⁻⁴⁶ são fases magnéticas (ou estados magnéticos) da magnetização, de uma nanopartícula magnética, que possam ser associados aos estados lógicos de armazenamento como o bit (0 ou 1) definindo um sistema binário⁴⁷. As maneiras convencionais possíveis de arquivar informação lógica é usando a gravação magnética longitudinal, Figura 1.12, ou a gravação magnética perpendicular^{6,48,49} Figura 1.13. Na gravação magnética longitudinal^{50,51}, o conjunto de momentos magnéticos que guardam a informação ficam paralelos ao plano de deposição do material, já na gravação longitudinal estes momentos ficam perpendiculares ao plano de deposição.

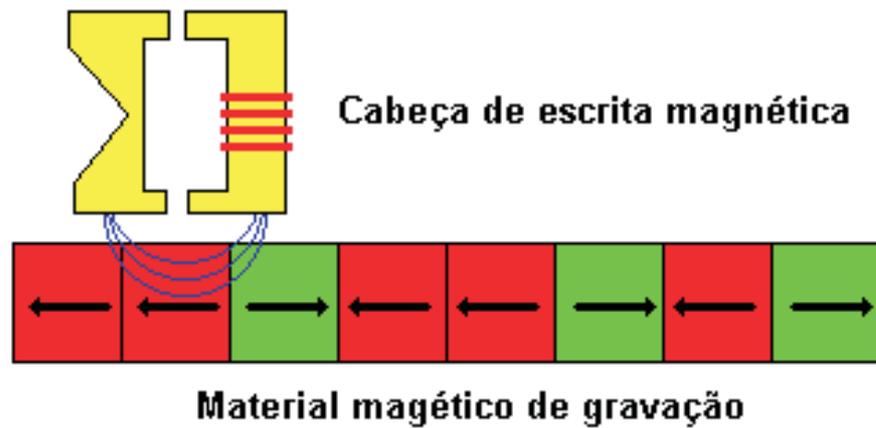


Figura 1.12: Representação esquemática da gravação magnética longitudinal.

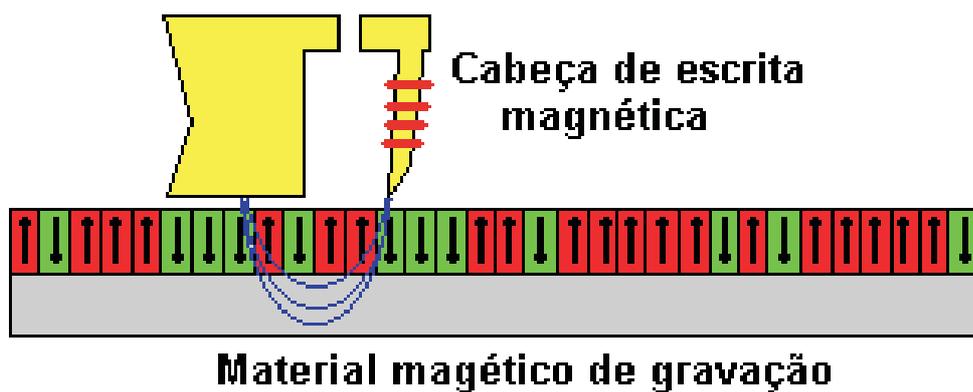


Figura 1.13: Representação esquemática da gravação magnética perpendicular .

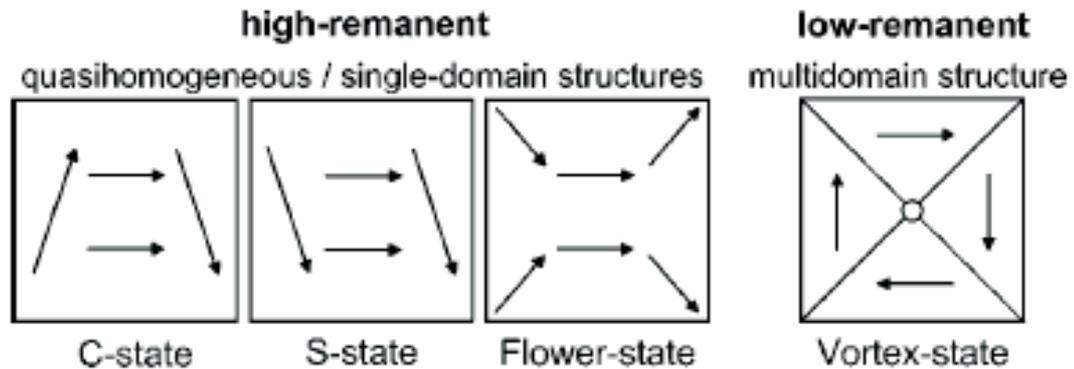


Figura 1.14: Representação esquemática das possíveis fases magnéticas em uma partícula de baixa espessura.

Simulações numéricas^{47,52} relatam diferentes fases magnéticas para filmes finos com base de geometria quadrada, em campo externo nulo. Estas fases são representadas esquematicamente na Figura 1.14⁴⁷. É de interesse industrial o aumento da densidade de armazenamento em meios magnéticos, isso é alcançado quando o tamanho das nanopartículas diminui, em dimensões da ordem de algumas dezenas nanômetros o efeito do campo dipolar sobre os spins da partícula, bem como, a energia térmica passam a ter efeito significativo sobre ela. A magnetização passa a se acomodar à geometria e as dimensões do material, e com isso, vários estados magnéticos podem aparecer.

Como citamos anteriormente, é de interesse industrial o aumento na densidade de armazenamento, bem como, a confiabilidade da informação guardada, Na figura 1.14 são demonstrados, em quadrados de baixa altura, fases magnéticas que são denominadas “high-remnant”, estruturas de interesse como o “C-State”, “S-State” e o “Flower-State” que tem uma magnetização líquida em uma direção bem definida. E a fase denominada “low-remnant”, estruturas que apresentam magnetização resultante nula “Vortex-State”.

1.2.1 Observação das Fases Magnéticas em Nanopartículas na literatura

Nesta seção faremos uma breve apresentação de alguns trabalhos nos quais foram feitas simulações micromagnéticas em nanoestruturas de diversas formas, geometrias, e

materiais como o Ferro, permalloy, cobalto, etc., e com diferentes técnicas de simulação micromagnética, nas quais aparece o conceito de célula de simulação enfatizando sempre as semelhanças entre as estruturas encontradas nas simulações e as de interesse citadas na secção 1.2. Esta secção conduz à escolha do modelo adotado em nossas simulações, que está baseado no uso de células como unidade de simulação.

D. goll et. al. no próprio trabalho⁴⁷ que traz as definições “low-remanent” e “high-remanent” executa cálculos micromagnéticos com Modelo de Elementos Finitos (MEF), a campo nulo, para filmes finos de geometria retangular. Sua simulação tem por base a variação da geometria do filme (comprimento e espessura) como também dos parâmetros intrínsecos do material. Seu MEF está baseado em uma malha tridimensional de tetraedros irregulares. A configuração de equilíbrio da magnetização é obtida através da energia livre de Gibbs composta pelos seguintes termos: G_A energia de troca, G_K energia magnetocristalina, G_S energia do “stray field”. A equação de energia é dada por:

$$G = G_A + G_K + G_S = \int [A \sum_i [\nabla \gamma_i(\vartheta, \varphi)]^2 + K_1 \sin^2 \alpha(\vartheta, \varphi) - \frac{1}{2} \mathbf{H}_S \cdot \mathbf{J}_S] dV, \quad (1.2)$$

onde A denota a constante de troca, K_1 a constante de anisotropia, γ_i , está relacionado com os co-senos diretores de \mathbf{J}_S . ϑ e φ são os ângulos polar e azimutal de \mathbf{J}_S em um sistema de coordenadas esféricas e α descreve o ângulo entre a polarização \mathbf{J}_S e o eixo fácil da camada. O “stray field” \mathbf{H}_S é o campo magnético que resulta dos momentos magnéticos do material.

Quatro estruturas “C-state”, “S-state”, “flower” e o estado “vortex” foram encontradas em quadrados finos a campo magnético nulo. Essas fases, como a transição entre elas, dependem do comprimento e espessura do filme, bem como, de seus parâmetros materiais, como já citamos. Estes estados são mostrados nas Figuras 1.15 e 1.16 para um filme de base quadradas de permalloy com ($a = 20\mu m$) e espessura de $20nm$. Estas duas fases foram encontradas através da variação na espessura do filme de $2nm$, onde o sistema

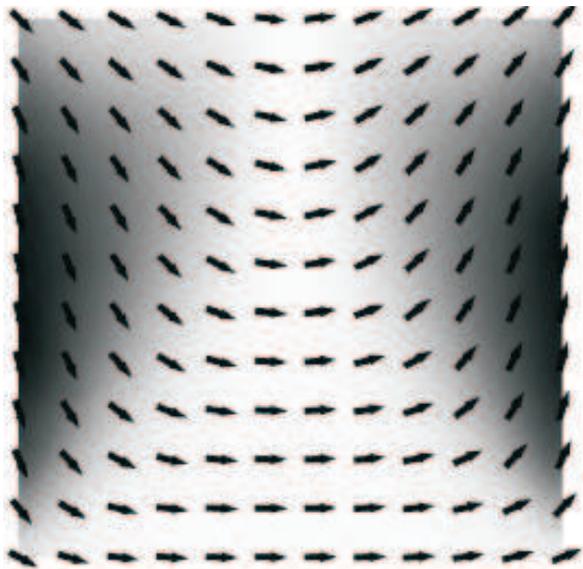


Figura 1.15: Simulação magnética para um filme de base quadradas de permalloy com ($a = 20\mu m$) e espessura de $20nm$ resultando no estado “C-state”.

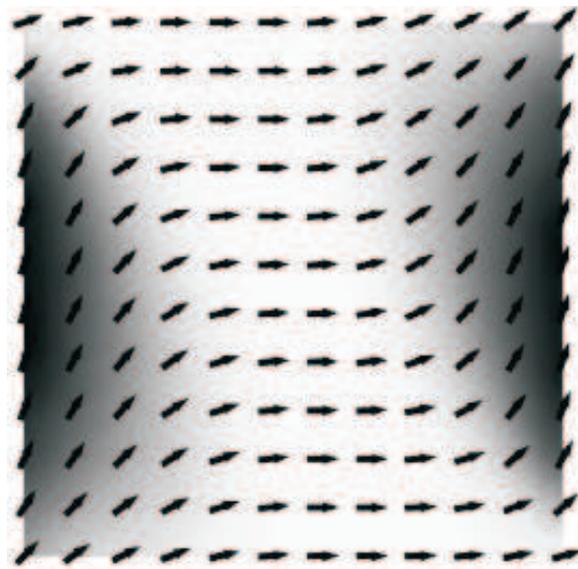


Figura 1.16: Simulação magnética para um filme de base quadradas de permalloy com ($a = 20\mu m$) e espessura de $20nm$ resultando no estado “S-state”.

se encontra basicamente no estado de monodomínio sem alterações nos vetores momentos magnéticos, até a espessura de $20nm$ encontradas nas Figuras 1.15 e 1.16. É importante ressaltar que estes estados, mesmo tendo diferentes conformações na magnetização eles também são denominados pelos autores como estados “high-remanent”, que poderiam ter alguma aplicação tecnológica.

D. goll et. al. também observaram que a espessura crítica para que a mudança entre as configurações dependem da dureza magnética do material. Na figura 1.17 é apresentado um estado de alta simetria denominado de “Vortex” é desenvolvido somente para materiais magnéticos muito moles como o permalloy. Outro comportamento observado foi o estado “flower”, ilustrado na Figura 1.18 o permalloy e o Cobalto. Com o aumento da dureza magnética as regiões não homogêneas de rotação nos cantos são reduzidas significativamente, devido a redução do comprimento da troca e aumento da anisotropia do magnetocristalina.

L. Torres⁵³ e colaboradores fizeram uma estudo de partículas magnéticas retangulares com tamanhos de 10 a 3.1 vezes o comprimento de troca modelados em um filme com

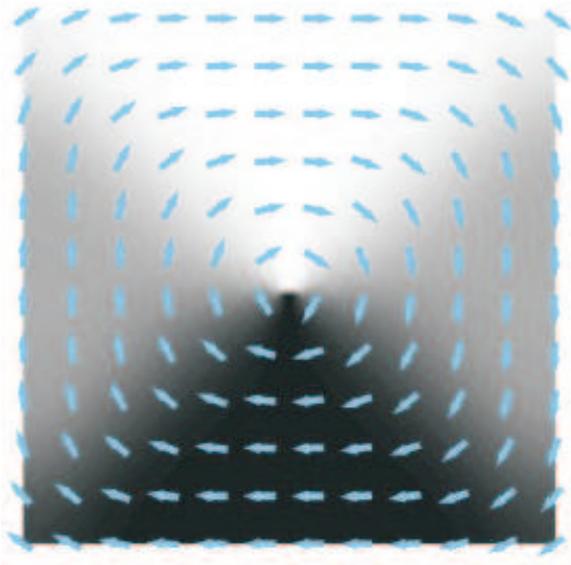


Figura 1.17: Simulação magnética para um filme de base quadradas de permalloy com ($a = 20\mu m$) e espessura de $20nm$ resultando no estado “vortex01”.

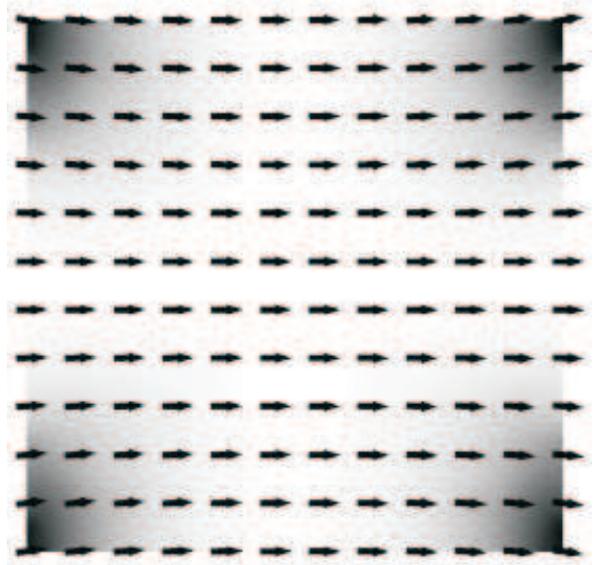


Figura 1.18: Simulação magnética para um filme de base quadradas de Cobalto com ($a = 20\mu m$) e espessura de $20nm$ resultando no estado “flower-state”.

uma espessura de 5 vezes o comprimento de troca, mostrado na Equação 1.1 . O modelo consiste de um campo introduzido na equação de Landau Lifschitz Gilbert e a equação correspondente de Langevin são resolvidas numericamente. Malhas regulares bidimensionais de 32×10 e 64×20 células são usadas, em cada célula a magnetização pode girar nas três dimensões.

Foram encontrados dois tipos de estados não uniformes para a magnetização nos dots em estudo, como mostrado em 1.19, o “C-state” e o “S-state”. Estes estados são obtidos imediatamente antes que o “switching” magnético ao longo do eixo x .

Em ambos os casos um campo próximo ao campo de “switching”, temperatura nula, é aplicado e então a ativação térmica “switching” é observada. A dependência do tempo de “switching” com a temperatura é analisado. Observaram que para o estado “C-state” um comportamento tipo “Arrhenius-like” é obtido em grandes intervalos de temperatura, fato não observado para o estado “S-state”.

M. Maicas et. al.⁵⁴ motivados pelo aumento na densidade de gravação estudaram estruturas magnéticas com dimensões nanométricas. O seu trabalho está focalizado em

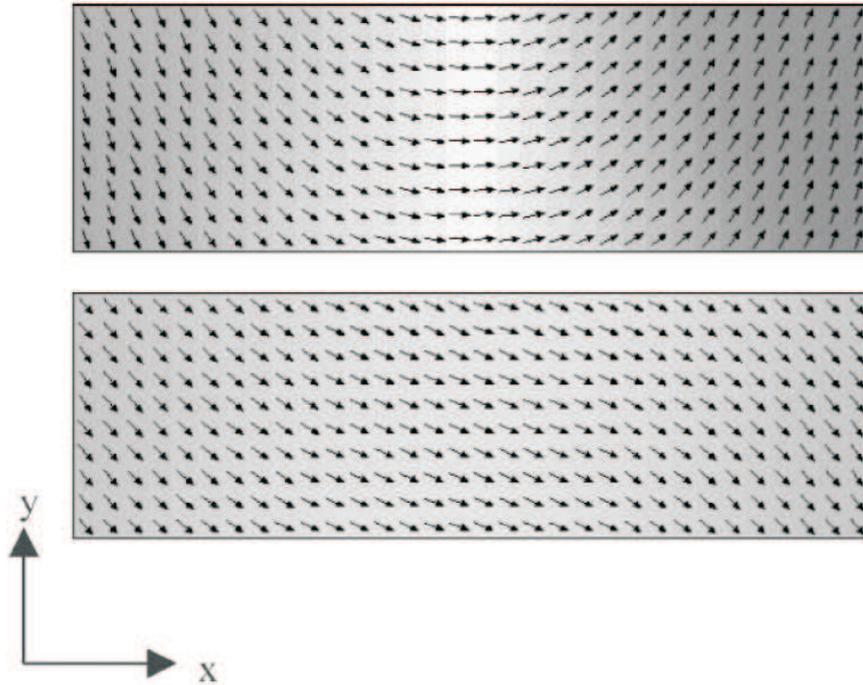


Figura 1.19: Dois tipos de estados iniciais encontrados na simulação estocástica. Topo: “C-State”. Fundo: “S-State”.

nanopartículas magnéticas quadradas e sua instabilidade devido ao impacto de suas dimensões na energia de magnetostática, conduzindo a distribuições de magnetização circulares, o denominadas de “Vortex-State”. Neste artigo são estudadas as configurações estáveis diferentes para dots magnéticos de base quadrada em materiais com duas camadas magnéticas com dimensões suficientes para um bom acoplamento magnetostático entre eles. São comparados resultados com dots de diferentes materiais com uma única camada magnética com dimensões semelhantes.

O modelo micromagnético usado está baseado na minimização da energia magnética usado por A. E. Labonte⁵⁵. O dot quadrado é discretizado como mostrado na Figura 1.20 em uma malha com células retangulares, todas com as mesmas dimensões nas quais a magnetização é constante. O estudo foi feito tanto para monocamadas como para bicamadas, sendo t a altura do dot e l o seu comprimento. A energia total do dot leva em conta contribuições principais, energia de troca, energia de anisotropia e as energias magnetostática e Zeeman.

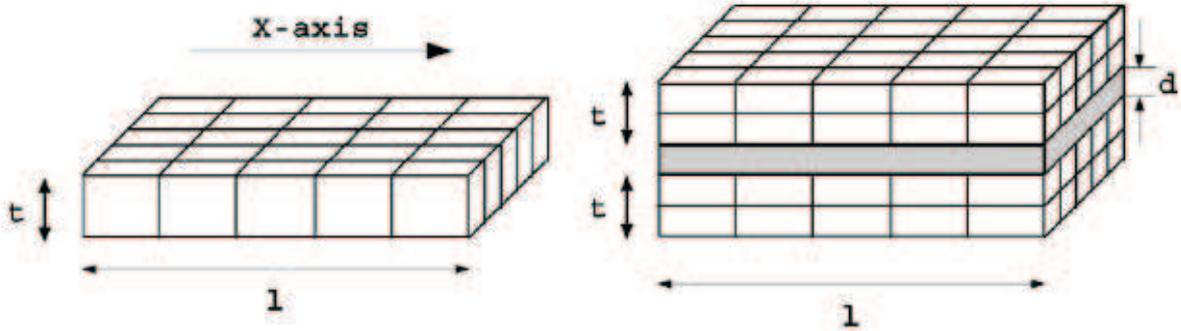


Figura 1.20: Amostra da discretização em (a) monocamadas e (b) bicamadas.

Os resultados da minimização da energia conduzem a três distribuições de magnetização diferentes. Estas distribuições são mostradas na Figura 1.21. A contribuição da anisotropia apresentou-se pequena para partículas magnéticas com dimensões da ordem de algumas dezenas de nanômetros, e os estados finais são principalmente dependentes das energias de troca e magnetostática. Em monocamadas magnéticas foram encontradas três tipos diferentes de estados magnéticos, um com a magnetização quase paralelo a um eixo da partícula magnética, “Flower-State”. Outro estado apresenta magnetização paralela a uma diagonal da partícula, e foi denominado de “leaf”⁵⁶. Uma terceira configuração aparece para partículas magnéticas maiores, conhecido como “Vortex-State”, minimizando os pólos magnéticos na superfície.

Em partículas magnéticas de bicamadas são também encontradas os mesmos três estados. Os estados “Flower-State” e “leaf”⁵⁶ com um forte acoplamento magnetostático enquanto o “Vortex-State” possui um fraco acoplamento devido à inexistência de pólos magnéticos nas bordas da partícula.

No seu trabalho, “The past, the present and the future of soft magnetic materials”, A. S. Arrott⁵⁷ cita no seu resumo que o passado foi caracterizado por *J.A. Ewing*, o principal guru em ferromagnetismo, um século atrás, e o seu livro “*Magnetic Induction*”⁵⁸. O livro “*Magnetic Domain*”⁵⁹ de *Alex Hubert* e *Rudolf Schäfer* proveram o presente. Visualizações de padrões tridimensionais de magnetização em um cubo de ferro indicaram uma direção futura e a necessidade comunicação por webpages para tais resultados complexos.

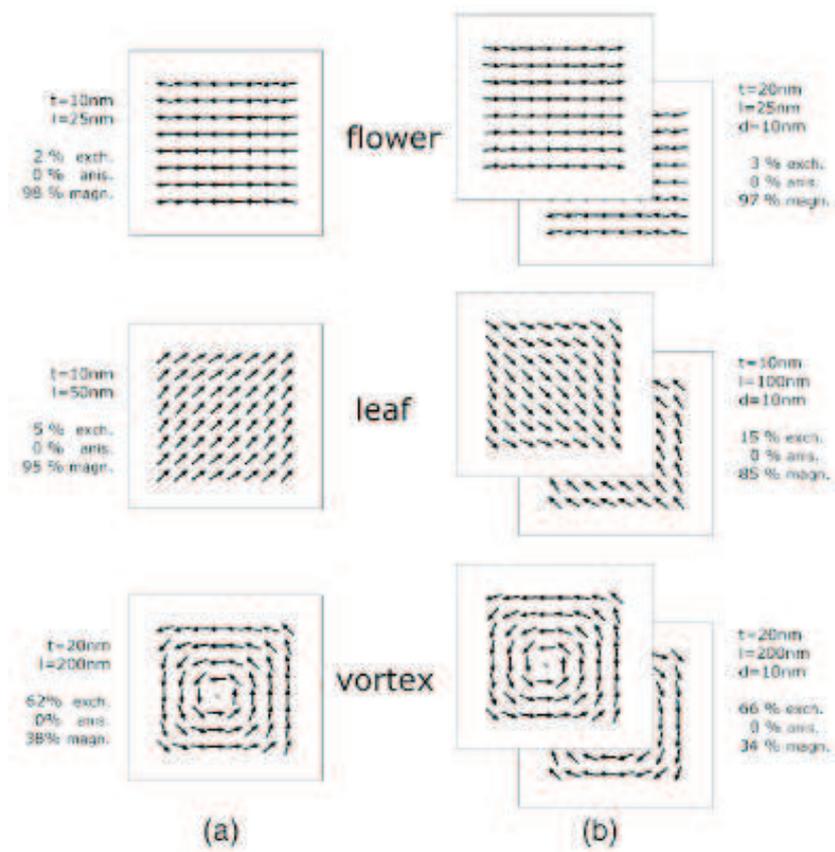


Figura 1.21: Diferentes distribuições de magnetização em (a) monocamada e (b) bicamada de dots magnéticos de base quadrada .

É mostrado um cálculo moderno de um material magnético macio na forma de um cubo de ferro, com dimensões de $100 \times 100 \times 100 \text{ nm}^3$ e uma malha que não excede $2 \times 2 \times 2 \text{ nm}^3$ de tamanho. O programa usado é o “LLG micromagnetic simulador” do Prof. Michael Scheinfein⁶⁰ que está comercialmente disponível. O simulador magnético LLG de Scheinfein apresenta imagens tridimensionais permitindo ao usuário estudá-las com detalhes, o que é dificilmente feito pelos métodos atuais de publicação de resultados científicos. No futuro isto logo mudará por intermédio do uso da internet em “websites” pessoais. Atualmente já é possível encontrar algumas desses na internet, são exemplos disso:

- <http://math.nist.gov/oommf/>
- <http://math.nist.gov/oommf/contrib/simulmag/>
- <http://www.micromagus.de/> <http://www.euxine.com/>
- <http://magnet.atp.tuwien.ac.at/scholz/projects/diss/html/node84.html>

É um desafio transportar para o papel, nas publicações científicas, tais visualizações como o rompimento de simetria em uma configuração de equilíbrio que tem simetria axial. Os padrões em duas faces opostas perpendicular àquele eixo diferem como mostrado na Figura 1.22.

A outra visualização, Figura 1.23, mostra “frames” do filme para a dinâmica de reversão da magnetização ao longo do eixo de simetria. A reversão acontece porque pode haver uma concentração extremamente grande de torque de troca para criar um par de singularidades de ponto em três dimensões no topo e no fundo do cubo. Quando o cubo quase é saturado na direção de z , o estado “flower state” persiste com a magnetização nos quatro cantos superiores que apontam ligeiramente para as diagonais externas do cubo, já nos quatro vértices do fundo a magnetização aponta ligeiramente para as diagonais de dentro.

Norteados por essas idéias acima expostas, nos próximos Capítulos apresentaremos o nosso modelo para o estudo de nanopartículas magnéticas estabilizadas por um substrato

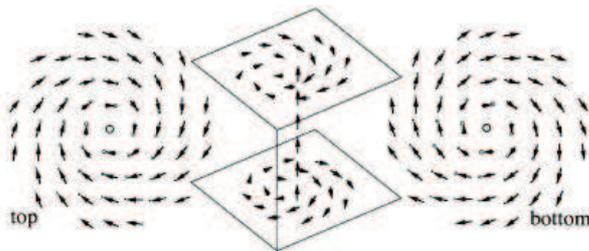


Figura 1.22: Padrão de equilíbrio da magnetização para um cubo de ferro com 100 nm de lado que mostram que os dois estados “vortex-state” da magnetização não são equivalentes.

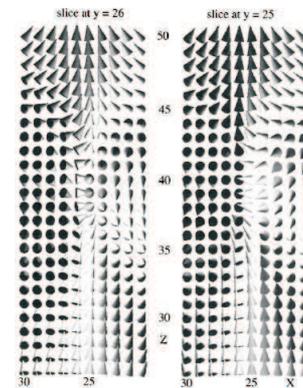


Figura 1.23: A criação de um par de singularidades ao longo do eixo central durante a aproximação dinâmica para um estado de baixa energia depois que um forte campo, $1.6T$, é repentinamente afastado. O cubo de ferro $100 \times 100 \times 100 \text{ nm}^3$ é dividido em 125000 células.

AFM, assim como os resultados obtidos para as fases magnéticas destas partículas e anomalias na histerese magnética de tais partículas por causa da presença do substrato antiferromagnético (AFM) .

Capítulo 2

Estabilização de Partículas Ferromagnéticas

Partículas Ferromagnéticas (FM) usadas na gravação magnética podem ter diversas geometrias, dependendo da forma e/ou técnica com as quais são construídas. Cada partícula (unidade nanomagnética) deve representar exatamente um bit (unidade de armazenamento de dados), com estado definido como 0 ou 1 (up ou down)⁶¹. Outras estruturas utilizadas para armazenamento de dados são os “nanowires” que são estruturas que tem uma de suas dimensões alongadas⁶². Recentemente trabalhos experimentais Kai Liu et. al.⁶³ e P. J. Jensen⁶⁴, tratam da estabilização da ordem magnética de partículas FM pelo acoplamento de interface da partícula com um substrato antiferromagnético (AFM). Este acoplamento de troca com o substrato AFM pode resultar em uma estabilização significativa da ordem ferromagnética nos spins concentrados na interface FM/AF e em uma fração significativa dos spins constituintes da partícula.

Em seu trabalho P.J. Jensen⁶⁴ faz uma investigação sobre a instabilidade temporal que existe na informação armazenada nos meios magnéticos de alta densidade de armazenamento. Isto baseado no fato de que a competição entre a energia armazenada pela partícula magnética e a energia térmica que podem conduzir a processos magnéticos de reversão espontâneos.

Uma alternativa é a deposição das partículas magnéticas sobre um substrato AFM que aumentará a barreira da energia entre estados magnéticos distintos devido ao acoplamento de troca entre os dois subsistemas. O modelo de P.J. Jensen é constituído por um bloco

ferromagnético (FM) depositado sobre substrato AFM, os subsistemas FM e AFM são acoplados por uma interação da troca de curto alcance. Então, a barreira de energia do conjunto FM aumenta entre seus dois estados possíveis, e uma estabilidade temporal alcançada para a informação armazenada. O Hamiltoniano do sistema para uma rede de fcc (001) é dado por:

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mu_i \cdot \mu_j - B \sum_i \mu_i - \sum_i K_i \cos \Phi_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j(i \neq j)} \frac{1}{r^5} [\mu_i \cdot \mu_j r^2 - 3(r\mu_i)(r\mu_j)]$$

Os momentos magnéticos são sujeitos à interação de troca J_{ij} entre os vizinhos mais próximos, a anisotropia é dada por K_i , campo magnético externo B (energia de Zeeman) e o acoplamento dipolar de longo alcance. A barreira de energia ΔE é calculada da reversão magnética do FM. Um campo magnético externo B , com força suficiente é aplicado, forçando a magnetização do FM desviar de seu eixo fácil, Figura 2.1. O ângulo Φ_B entre o campo magnético e os spins Φ_i do bloco FM e a região perturbada do AFM são variados até que a energia total do sistema acoplado, representada pela Equação 2.1, torne-se um mínimo de energia, não necessariamente sendo o mínimo global da função. A barreira correspondente ΔE da energia é determinada da diferença entre o mínimo e o máximo da energia E do bloco FM, de que a energia de Zeeman tem que ser subtraída.

Na Figura 2.2 a barreira de energia resultante ΔE em função do acoplamento troca entre o bloco FM e o substrato AFM (J_{FM-AFM}). Quatro valores diferentes para a interação de troca do substrato AFM (J_{AFM}) são supostos, devido aos tipos de materiais diferentes do substrato. δE aumenta do quase quadraticamente com J_{FM-AFM} e para o mesmo valor de J_{FM-AFM} a barreira de energia é maior quanto mais fraco for J_{AFM} .

O aumento na barreira de energia devido à J_{FM-AFM} é um efeito de interface, desde que somente spins do bloco FM perto do substrato AFM experimentam o acoplamento

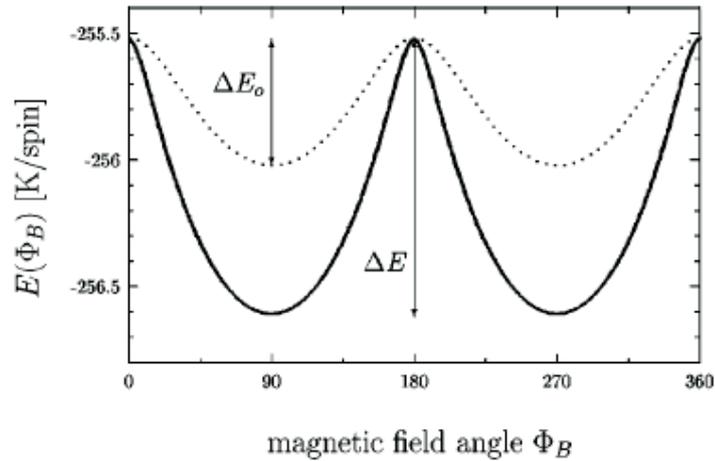


Figura 2.1: Energia magnética $E(\Phi_B)$ em unidades de K/spins no bloco em função da direção Φ_B (em graus) do campo magnético externo.

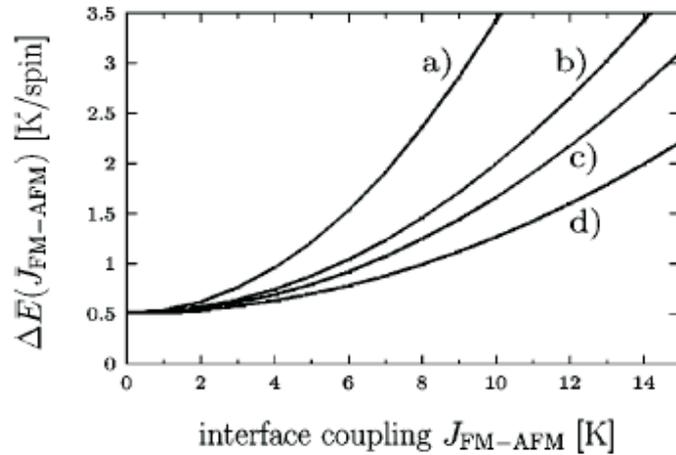


Figura 2.2: Barreira de energia ΔE (JFM-AFM) em unidades de K/spins no bloco em função do acoplamento de troca J_{FM-AFM} . Quatro valores diferentes de interação de troca do substrato AFM são supostos: (a) $J_{AFM} = -50K$, (b) $J_{AFM} = -100K$, (c) $J_{AFM} = -130K$ e (d) $J_{AFM} = -200K$.

entre camadas. Os spins do bloco FM não situados perto da interface FM/AFM estão sujeitas somente a anisotropia da rede e ao acoplamento magnético dipolar, como para um bloco situado em um substrato não magnético. Assim, supondo o mesmo número de spins no bloco FM, a contribuição do acoplamento de interface à barreira de energia é menor para um bloco compacto (área de interface menor) do que para um bloco fino (área de interface maior). Jensen estuda esta barreira de energia ΔE do bloco FM com a idéia

de que ΔE deve ser grande o bastante para garantir a estabilidade temporal requerida e deve permitir uma reversão magnética controlada por um campo magnético externo dentro de um tempo curto, implicando em um limite superior para ΔE , como também para o acoplamento de interface. Ele sugere o campo de escrita pode ser facilitado por um aquecimento local. Essa idéia baseia-se na hipótese da temperatura de Néel do AFM ser menor do que a temperatura crítica T_C do bloco de FM ($|J_{AFM}|, J_{FM}$), a magnetização do substrato AFM diminuirá mais rapidamente com o aumento da temperatura do que a do bloco FM. Então, a contribuição de interface a ΔE também diminui, mais rapidamente do que a contribuição intrínseca da anisotropia (ΔE_0) do bloco FM, facilitando sua reversão magnética por um campo da escrita.

É importante ressaltar a característica bidimensional do modelo de Jensen, já que ele trata o problema observando aspectos do acoplamento de interface . Johannes Eisenmenger e Ivan K. Schuller publicaram o artigo “Overcoming thermal fluctuations”⁶⁵ em que tratam do aumento da densidade de armazenamento em discos rígidos de computador e mostram que o custo desses meios magnéticos de gravação tem decaído muito com o avanço tecnológico. Eles discutem limitações, nesta tecnologia, quando diminuem o tamanho dos “bits” magnéticos e eles tornam-se termicamente instáveis. Este artigo, embora em sua essência, trate também da idéia de estabilização de um material ferromagnético através de um acoplamento de interface , este traz um aspecto bastante motivador para o nosso trabalho que é um estudo feito em objetos magnéticos na escala de poucas dezenas, ou centenas de nanômetros.

Um efeito na histerese da partícula ferromagnética causado por esse acoplamento de interface é o deslocamento do laço, denominado “exchange bias”⁶⁶, e o aumento substancial da coercividade . Sugeriu-se então que o efeito superparamagnético em nanopartículas magnéticas seria afetado pela interação de troca com um substrato antiferromagnético, como mostrado em na Figura 2.3. O ponto fundamental neste sistema está na relação entre a energia magnética armazenada em uma nanopartícula magnética e sua energia térmica. Como já citamos na seção 1.1.2 esta nanopartícula pode tornar-se não magnética (superparamagnética) em uma determinada temperatura denominada “blocking temperature”.

Eisenmenger e Ivan K. Schuller buscam, na escala nanométrica, uma forma de evitar o superparamagnetismo . Esta possibilidade é investigada partindo do acoplamento entre a partícula ferromagnética com o substrato antiferromagnético que fornece um fator a mais para a estabilização da partícula, uma espécie de anisotropia magnética adicional que ajuda a alinhar os momentos ferromagnéticos em um determinado sentido. Como o substrato AFM não tem magnetização líquida em nenhuma direção a magnetização total do sistema não é aumentada.

Eisenmenger e Schuller citam o trabalho experimental de Skumryev⁶⁷ et al. em que estudam as propriedades magnéticas das nanopartículas de Cobalto depositadas em matrizes paramagnéticas (Al_2O_3) ou antiferromagnéticas (CoO). Para partículas de Co na matriz paramagnética do Al_2O_3 , elas têm uma temperatura de bloqueio (blocking temperature) de 10 K, acima da qual as partículas são superparamagnéticas. Entretanto, partículas de Co depositadas na matriz antiferromagnética de CoO tem os momentos magnéticos estáveis e não se tornam superparamagnéticas à 290 K, que correspondem aproximadamente à temperatura Néel do CoO. Este é um aumento de quase 30 vezes na temperatura de bloqueio. Skumryev⁶⁷ et al. interpretam esta estabilidade como resultado do aumento do momento magnético causado pela matriz antiferromagnética. Estas experiências mostram que a idéia de usar um substrato antiferromagnético para vencer o superparamagnetismo é válida, mas muito mais trabalho ainda deve ser feito para compreender os fenômenos associados e conseguir sua aplicação na indústria de armazenamento de dados (Data Storage) . Estes estudos nos motivaram a estudar a contribuição de um substrato antiferromagnético na estabilização de partículas com dimensões de alguns nanômetros. Apresentaremos ao longo deste trabalho, propriedades magnéticas de tais partículas ferromagnéticas relacionadas com a estabilização fornecida por este acoplamento de interface. Este sistema pode ser utilizado para diminuir os efeitos do limite superparamagnético, que é um dos principais problemas encontrados no armazenamento de dados.

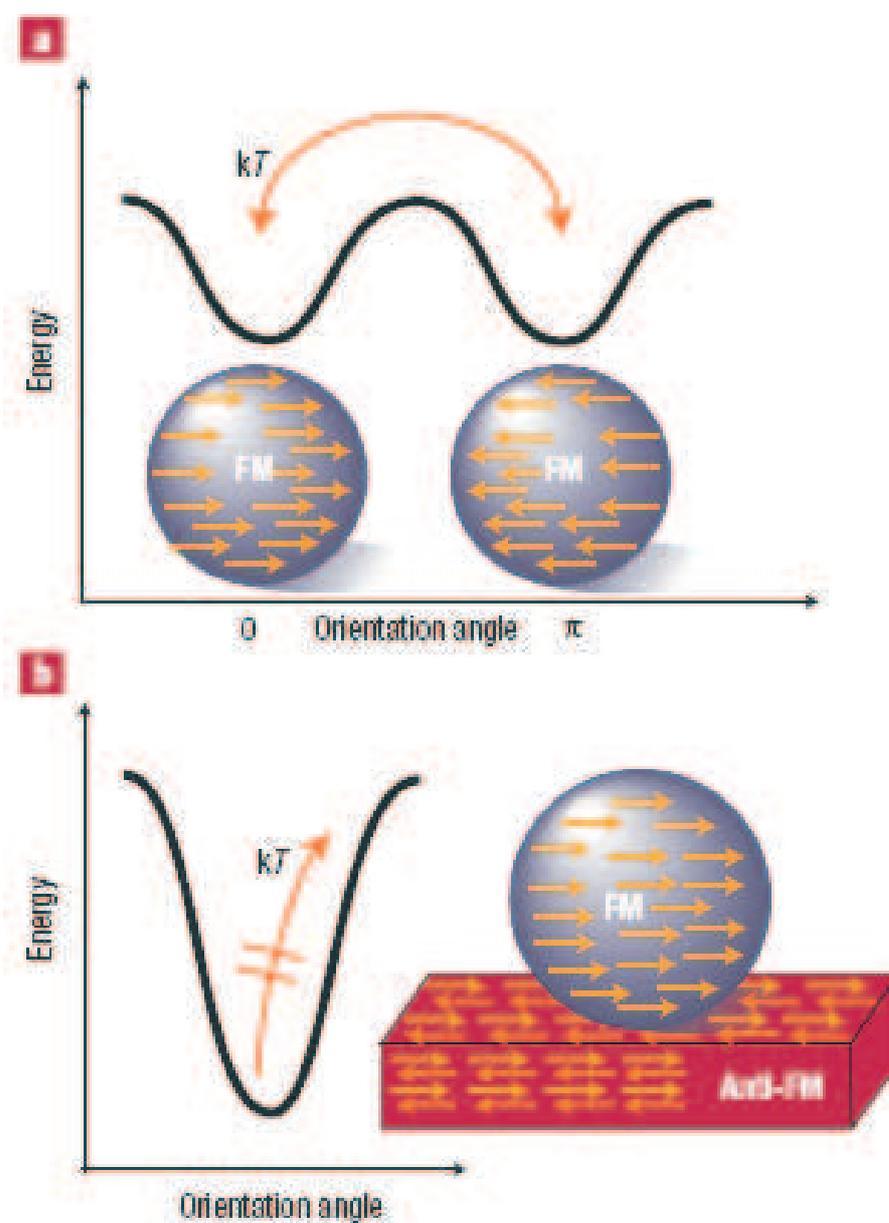


Figura 2.3: Ultrapassando o limite superparamagnético para nanopartículas magnéticas. (a) Para as partículas (FM) ferromagnéticas muito pequenas a energia magnética de anisotropia (responsável para manter a magnetização orientada em determinadas direções) é comparável à energia térmica (kT). Quando isto acontece, as partículas tornam-se superparamagnéticas; As flutuações térmicas tornam aleatórias as direções da magnetização entre as orientações paralela e antiparalela. (b) Quando a nanopartícula ferromagnética é depositada sobre uma superfície antiferromagnética (Anti-FM) a interação de “exchange bias” na relação FM/Anti-FM fornece uma energia de anisotropia adicional, que estabiliza a magnetização em uma direção e impede o superparamagnetismo.

2.1 Modelo Inicial

Para investigar os processos de estabilização, bem como as fases magnéticas de partículas Ferromagnéticas (FM) retangulares, não interagentes entre si, sobre um substrato AF, enfocaremos nossos esforços no entendimento de uma única partícula FM com anisotropia uniaxial ao longo do eixo x . Este eixo é paralelo ao eixo fácil de um substrato AF, responsável pela estabilização dos momentos magnéticos dos primeiros planos da partícula FM. O empilhamento destes planos é feito ao longo do eixo z , como mostrado na Figura 2.4.

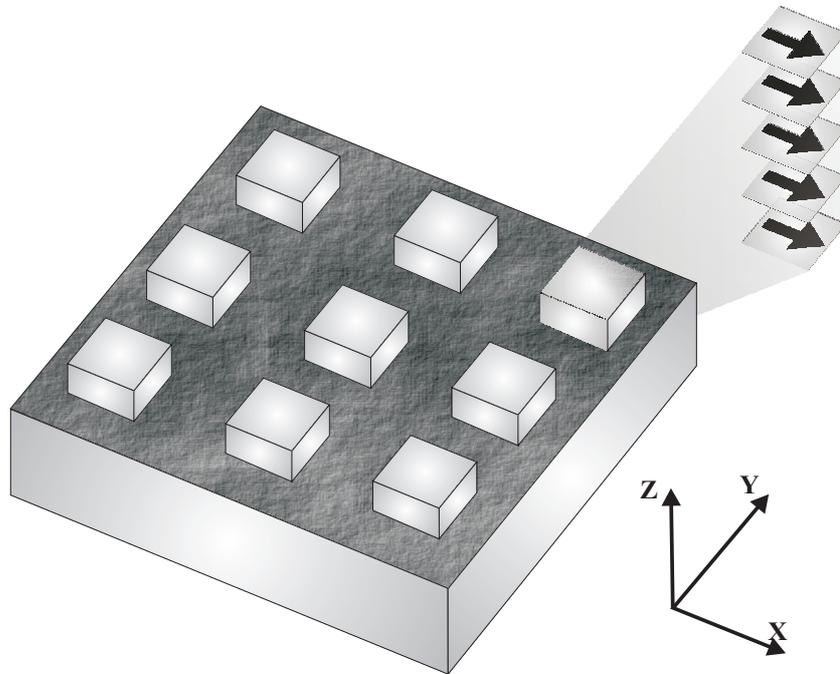


Figura 2.4: Modelo utilizado para representação de uma partícula ferromagnética com geometria retangular .

Desde a descoberta do fenômeno de magnetoresistência gigante (GMR) em multicamadas⁷, o acoplamento entre camadas magnéticas tem sido amplamente estudado. A motivação para o enfoque em tais sistemas é o número de aplicações tecnológicas como sensores de leitura e armazenamento de dados.

No nosso modelo, o plano de interface consiste de uma superfície de momentos

magnéticos alinhados na direção do eixo de anisotropia do AF. Não consideraremos interações entre partículas FM vizinhas, ou qualquer reorientação dos spins do substrato antiferromagnético. Focalizamos nossos esforços no entendimento da competição entre as tendências impostas pelo campo de interface e pela interação dipolar dos momentos da Partícula FM. O campo de interface tende a produzir um estado magnético uniforme nos momentos magnéticos da partícula FM, orientando-os ao longo do seu eixo de anisotropia, enquanto que, a interação dipolar tende a produzir arranjos magnéticos para que a carga magnética de superfície seja mínima. O balanço entre estas duas tendências depende da forma da partícula, especialmente da relação entre suas dimensões ao longo dos eixos x e y , como também da intensidade do campo de interface produzido pelo substrato AF. A espessura da partícula torna-se um fator também importante na medida em que quanto menos espessa for a partícula maior será a influência estabilizante do campo de interface sobre ela.

Calcular numericamente a configuração de equilíbrio, spin a spin, de uma estrutura como essas requer um tempo computacional muito elevado. Isto se deve ao grande número de operações computacionais executadas para contabilizar a energia de interação dipolar que tem que ser contabilizada spin a spin. Para uma partícula FM de base quadrada de Ferro com um lado $l = 100$ nm e altura $h = 100$ nm, Figura 2.5, por exemplo, teríamos aproximadamente $8,24 \times 10^7$ spins, considerando a estrutura bcc do ferro, o que levaria a um número infinito de interações contabilizadas, no caso, por exemplo, da interação dipolar, o que dá um tempo computacional muito alto. Alternativamente, podemos considerar o estudo destas partículas magnéticas utilizando o conceito de células.

A idéia de células consiste na discretização da partícula FM em cubos⁶⁸ interagentes em que cada célula representa uma quantidade de momentos magnéticos que apontam em determinada direção. Neste contexto, fizemos a aproximação de representar conjuntos de momentos magnéticos em células cúbicas, fato comum em simulações micromagnéticas⁶⁹, Figura 2.6. As propriedades magnéticas de um conjunto de partículas pequenas dependem fortemente da relação entre energia de anisotropia local e da energia de troca. Para partículas grandes a magnetização pode se orientar no eixo fácil do material e os domínios

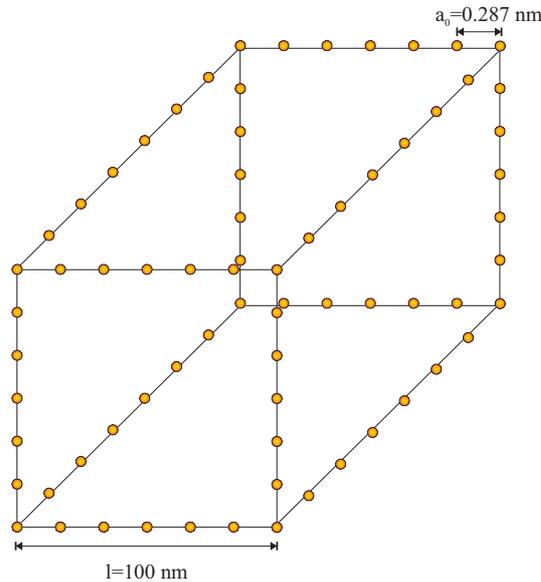


Figura 2.5: Número de interações feitas em função do número de spins de ferro em um dot de $100 \text{ nm} \times 100 \text{ nm} \times 100 \text{ nm}$.

magnéticos podem ser formados dentro das partículas.

O processo da magnetização, assim, é determinado pela anisotropia magneto-cristalina do material. Para partículas muito pequenas, entretanto, a interação de troca faz com que os momentos magnéticos tendam a se alinhar paralelamente impedindo a magnetização de procurar seu eixo fácil de cada célula individualmente. Logo, existe um limite para o qual a magnetização não tem a possibilidade de formar uma parede de domínio no interior da partícula este limite é denominado comprimento de troca⁷⁰.

As dimensões laterais das células devem ser menores que o comprimento de troca l_{Tr} do material, garantindo assim que a célula seja um monodomínio, representando assim o comportamento magnético de uma grande quantidade de momentos magnéticos que teriam que ser contabilizados individualmente. Logo, ao calcular a configuração de equilíbrio de uma partícula FM utilizando as células temos um enorme ganho de tempo computacional. Nossas simulações inicialmente foram feitas para parâmetros magnéticos do Fe. Os cálculos foram feitos para determinada dimensão da célula, assim os valores de entrada no programa dependiam da escolha desse tamanho. Escolhendo outro tamanho de célula valores de entrada teriam que ser recalculados.

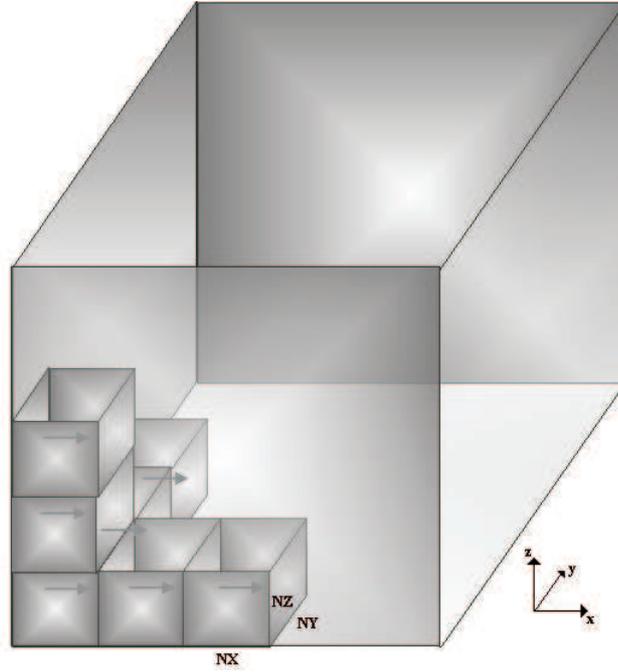


Figura 2.6: Divisão de uma partícula FM cúbica em células cúbicas com aresta menor que o comprimento de troca do Material FM.

Os cálculos feitos por nós para estas constantes usando o ferro como material FM está descrito no apêndice A. Consideramos os parâmetros experimentais do Ferro: $M_S = 1,73 \times 10^6$ A/m (magnetização de saturação), $A = 1 \times 10^{-11}$ J/m (constante de exchange), $a_0 = 2,87 \times 10^{-10}$ m (parâmetro de rede), utilizados por O. Fuchart et al.,⁷¹ em seu trabalho, e considerando o comprimento de troca como sendo,

$$l_{Tr} = \pi \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}} \quad (2.1)$$

podemos estimar qual seria o valor máximo do volume de cada célula, ou seja, qual o volume crítico que garante que cada célula seja um monodomínio. Logo, para o Ferro teremos um comprimento de troca $l_{Tr} = 10.2$ nm, o que dá uma célula com um volume de $V_c = 1,07 \times 10^3$ nm³, volume este que compreende 46656 momentos magnéticos alinhados formando um monodomínio, esta aproximação acelera consideravelmente o processo de

cálculo, diminuindo assim o tempo computacional. O fato importante a ser observado na substituição de um conjunto de momentos magnéticos por um único momento é perceber qual é o erro que se comete neste tipo de aproximação. Calculamos este erro levando em conta a energia dipolar de duas células vizinhas momento a momento individualmente E_{mm} , e o comparamos com a energia dipolar dos momentos coletivos de cada célula E_{MM} , analisamos este erro como função da energia total de interação da célula E_T que leva em conta energia de anisotropia E_{Anis} , energia de troca E_{Troca} , energia de interface E_{Int} e da própria energia dipolar E_{mm} . Observamos que o erro cometido é bastante pequeno, da ordem de 10^{-4} para células primeiras vizinhas e diminui acentuadamente à medida que as células vão se distanciando entre si.

$$Erro = \frac{E_{mm} - E_{MM}}{E_T} \quad (2.2)$$

A Figura 2.7 mostra o comportamento das energias E_{mm} (preto) e E_{MM} (azul), as curvas são bem semelhantes, entretanto, existe uma discrepância quando as células estão dispostas como primeiras vizinhas e à medida que elas vão sendo afastadas esta discrepância vai diminuindo. O erro cometido na aproximação é mostrado na Figura 2.8 e é menor que 1 % o que torna bastante viável este tipo de aproximação, neste contexto de nanoestruturas.

Foi usado um modelo de campo local autoconsistente⁷² que incorpora efeitos de interface, a interação dipolar na partícula FM, bem como as energias de troca e de anisotropia intrínsecas. Estes efeitos são levados em conta sobre as células que serão consideradas nossas unidades de simulação, ou seja, cada célula corresponde a um momento magnético em nossa simulação, onde aspectos como geometria, comprimento de troca, e tipo de rede que se está utilizando (bcc para o Ferro, hcp para o cobalto, etc.) podem influenciar na intensidade da quantidade de magnetização que a célula representa, pois tanto o comprimento de troca do material como a quantidade de momentos magnéticos que a célula representa variam. Logo para células com geometria cúbica, utilizadas neste

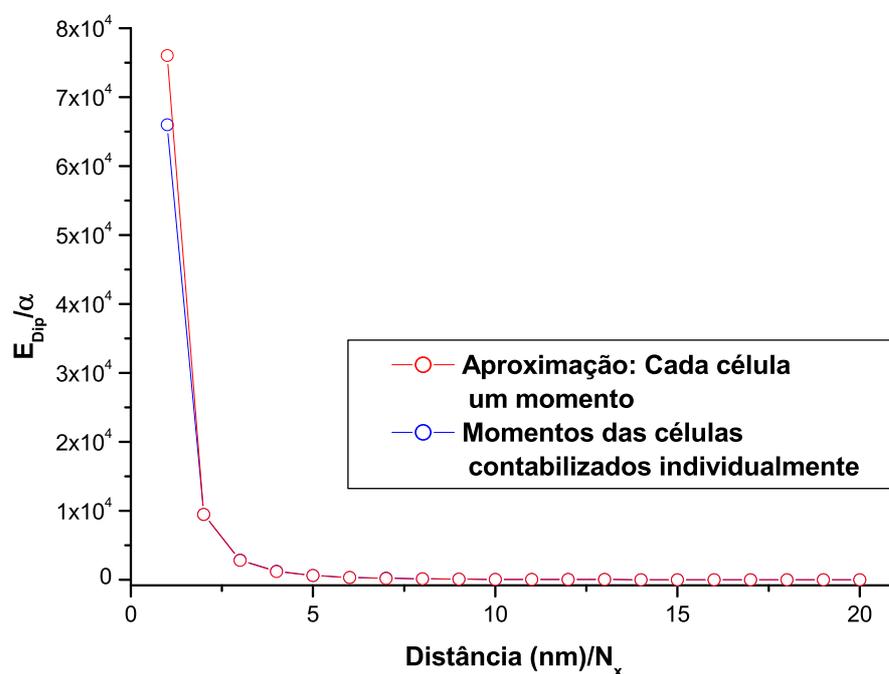


Figura 2.7: Comportamento das energias E_{mm} (azul) e E_{MM} (vermelho).

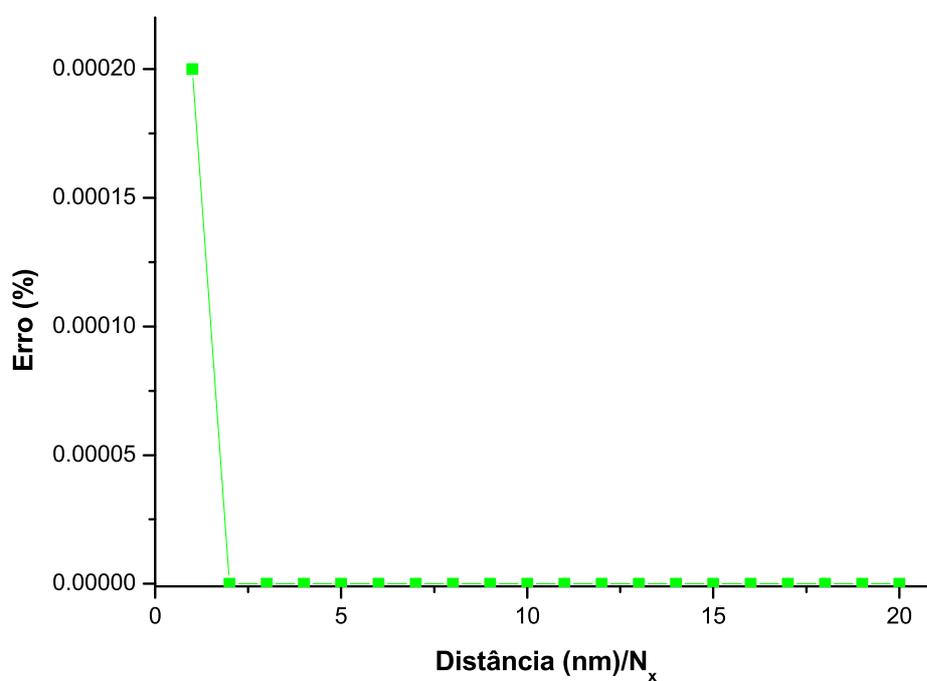


Figura 2.8: Erro percentual cometido na aproximação.

cálculo, a energia magnética, inclui a energia de anisotropia uniaxial, a energia da troca entre momentos magnéticos (primeiros vizinhos), a interação dipolar entre os momentos magnéticos da partícula FM, a energia de Zeeman e a energia do campo de interface. A energia magnética é dada por:

$$E = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} \left[-J_{eff} \left(\vec{S}_{i,j,k} \cdot \vec{S}_{i+1,j,k} + \vec{S}_{i,j,k} \cdot \vec{S}_{i,j+1,k} + \vec{S}_{i,j,k} \cdot \vec{S}_{i,j,k+1} \right) \right. \\ \left. - K_{eff} \left(S_{i,j,k}^x \right)^2 - D \vec{S}_{i,j,k} \cdot \vec{H}'_{d_{i,j,k}} - h_J \vec{S}_{i,j,1} \cdot \vec{H}'_J \right] \quad (2.3)$$

onde $\vec{H}'_{d_{i,j,k}}$ é dado por:

$$\vec{H}'_{d_{i,j,k}} = \sum_{i_0=1}^{N_x} \sum_{j_0=1}^{N_y} \sum_{k_0=1}^{N_z} \left[\frac{\vec{S}_{i_0,j_0,k_0}}{r_{(i,j,k)(i_0,j_0,k_0)}^3} \right. \\ \left. - 3 \frac{\vec{r}_{(i,j,k)(i_0,j_0,k_0)} \cdot \vec{S}_{i_0,j_0,k_0}}{r_{(i,j,k)(i_0,j_0,k_0)}^5} \vec{r}_{(i,j,k)(i_0,j_0,k_0)} \right] \quad (2.4)$$

Com a finalidade de encontrar, para uma dada célula (com um determinado momento magnético), a configuração de equilíbrio local, podemos escrever sua energia como:

$$E_{i,j,k} = -J_{eff} [S_{i,j,k}^x S_{i+1,j,k}^x + S_{i,j,k}^y S_{i+1,j,k}^y + S_{i,j,k}^z S_{i+1,j,k}^z \\ + S_{i,j,k}^x S_{i,j+1,k}^x + S_{i,j,k}^y S_{i,j+1,k}^y + S_{i,j,k}^z S_{i,j+1,k}^z \\ + S_{i,j,k}^x S_{i,j,k+1}^x + S_{i,j,k}^y S_{i,j,k+1}^y + S_{i,j,k}^z S_{i,j,k+1}^z] \\ - K_{eff} \left(S_{i,j,k}^x \right)^2 - h_J S_{i,j,1}^x \\ - D S_{i,j,k}^x H_{d_{i,j,k}}^x - D S_{i,j,k}^y H_{d_{i,j,k}}^y - D S_{i,j,k}^z H_{d_{i,j,k}}^z \quad (2.5)$$

e a partir dela calcular os campos efetivos sobre cada célula. É importante notar que a constante de exchange J_{eff} , a constante de anisotropia K_{eff} , o prefator do campo

dipolar D e o termo do campo de interface, estão escritos de forma a levar em conta a contabilização de células como unidade magnética. Considerando uma rede (bcc), onde $\vec{S}_n = 2N_{x'}N_{y'}N_{z'}\vec{s}_n$, sendo \vec{S}_n o momento magnético da célula, $N_{x'}N_{y'}N_{z'}$ o volume da célula e \vec{s}_n o momento magnético intrínseco do material ($Fe = 2.2$). As constantes energéticas dadas por:

$$J_{eff} = \frac{J}{4N_{x'}N_{y'}N_{z'}} \quad (2.6)$$

$$K_{eff} = \frac{Ka_0^3}{8s^2N_{x'}N_{y'}N_{z'}} \quad (2.7)$$

$$D = \frac{\mu_0g^2\mu_B^2}{4\pi N_{x'}a_0^3} \quad (2.8)$$

$$h_J = \frac{g\mu_B}{2N_{z'}} \quad (2.9)$$

onde para o ferro os parâmetros usados foram, $a_0 = 2,87 \times 10^{-10}$ m, é parâmetro de rede, $N_{x'} = N_{y'} = N_{z'} = l_{exch}$ são as dimensões laterais das células, $J = 2,46 \times 10^{-21}$ J é o valor da constante de troca intrínseca, $K = 4,76 \times 10^5$ J/m³ é a constante de anisotropia intrínseca, são dados experimentais comumente utilizados neste tipo de simulação e usados por O. Fuchart ET al.⁷¹ e C. Binns and M. J. Maher³³, para simulação de partículas magnéticas ultrafinas e filmes nanoestruturados respectivamente. Os valores usados para o fator de Landé e do magneton Bohr são respectivamente $g = 2$ e $\mu_B = 9,27 \times 10^{-24}$ J/T.

A minimização da energia do sistema é feita de modo que o momento magnético das células esteja alinhado com o campo efetivo sobre cada uma delas, desta forma não havendo torque sobre tais células, ver Figura 2.9. Este campo efetivo sobre cada célula, $H_{eff(i,j,k)}^\alpha$ é dado por:

$$H_{eff(i,j,k)}^\alpha = -\frac{1}{g\mu_B} \frac{\partial E_{i,j,k}}{S_{i,j,k}^\alpha} \quad (2.10)$$

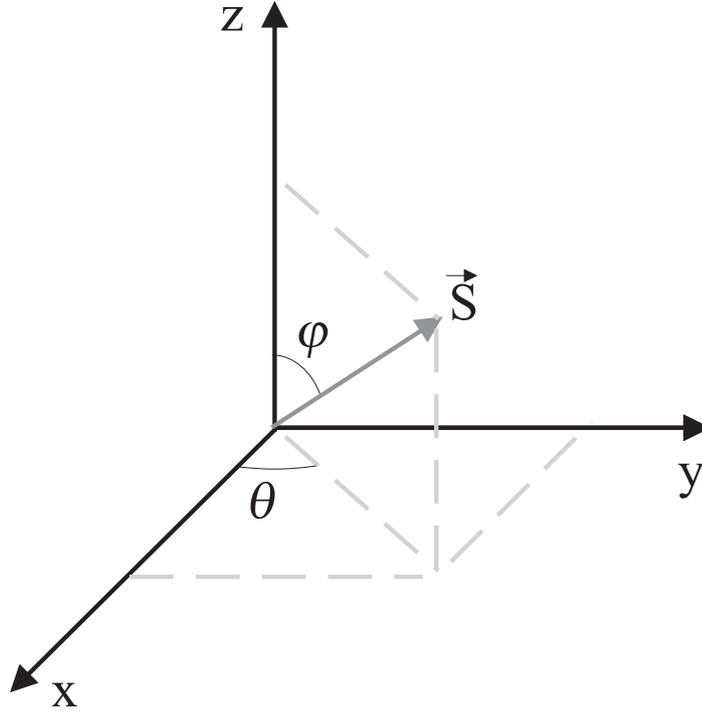


Figura 2.9: Orientação dos eixos coordenados e representação da configuração de equilíbrio $\delta E \simeq 0$.

onde o índice α pode assumir as variáveis x, y, z . Utilizamos parâmetros adimensionais (ver apêndice A) para representar as várias contribuições do campo local sobre cada momento magnético. Os campos são escritos em unidades do campo de troca de cada célula $\vec{H}_{exc} = \frac{ZJS}{g\mu_B}$ onde Z é o número de coordenação, para a rede cúbica $Z = 6$. Logo em unidades do campo de troca $\vec{H}_{exc} = \frac{6JS}{g\mu_B}$ as componentes de campo efetivo são:

$$\begin{aligned}
 H_{eff(i,j,k)}^x &= \frac{1}{6} \left[S_{i+1,j,k} \text{sen}(\varphi_{i+1,j,k}) \cos(\theta_{i+1,j,k}) \right. & (2.11) \\
 &+ S_{i,j+1,k} \text{sen}(\varphi_{i,j+1,k}) \cos(\theta_{i,j+1,k}) \\
 &+ \left. S_{i,j,k+1} \text{sen}(\varphi_{i,j,k+1}) \cos(\theta_{i,j,k+1}) \right] \\
 &+ \alpha_A S_{i,j,k} \text{sen}(\varphi_{i,j,k}) \cos(\theta_{i,j,k}) + H_J \\
 &+ H_{d_x}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{eff(i,j,k)}^y &= \frac{1}{6} \left[S_{i+1,j,k} \text{sen}(\varphi_{i+1,j,k}) \text{sen}(\theta_{i+1,j,k}) \right. \\
&\quad + S_{i,j+1,k} \text{sen}(\varphi_{i,j+1,k}) \text{sen}(\theta_{i,j+1,k}) \\
&\quad \left. + S_{i,j,k+1} \text{sen}(\varphi_{i,j,k+1}) \text{sen}(\theta_{i,j,k+1}) \right] \\
&\quad + H_{d_y}
\end{aligned} \tag{2.12}$$

$$\begin{aligned}
H_{eff(i,j,k)}^z &= \frac{1}{6} \left[S_{i+1,j,k} \text{cos}(\varphi_{i+1,j,k}) \right. \\
&\quad S_{i,j+1,k} \text{cos}(\varphi_{i,j+1,k}) \\
&\quad \left. S_{i,j,k+1} \text{cos}(\varphi_{i,j,k+1}) \right] \\
&\quad + H_{d_z}
\end{aligned} \tag{2.13}$$

onde, $\alpha_A = \frac{Ka_0 N_z l}{JS}$ é o coeficiente do campo de anisotropia uniaxial, $H_J = \frac{H'_J}{H_{exc}}$ é o coeficiente do campo de interface e $\alpha_d = \frac{\mu g^2}{H_{exc}}$ representa o campo de dipolar dos vizinhos mais próximos e esta parcelas correspondem a:

$$\begin{aligned}
H_{d_x} &= \left(\frac{3A_x}{((i - (i - 1))^2 + (j - (j - 1))^2 + (k - (k - 1))^2)^{(5/2)}} \right) \\
&\quad - \left(\frac{S_{i,j,k} \text{sen}(\varphi_{i,j,k}) \text{cos}(\theta_{i,j,k})}{((i - (i - 1))^2 + (j - (j - 1))^2 + (k - (k - 1))^2)^{(3/2)}} \right)
\end{aligned} \tag{2.14}$$

$$\begin{aligned}
A_x &= (S_{i,j,k} \text{sen}(\varphi_{i,j,k}) \text{cos}(\theta_{i,j,k}) (i - (i - 1)) \\
&\quad + S_{i,j,k} \text{sen}(\varphi_{i,j,k}) \text{sen}(\theta_{i,j,k}) (j - (j - 1)) \\
&\quad + S_{i,j,k} \text{cos}(\varphi_{i,j,k}) (k - (k - 1))) (i - (i - 1))
\end{aligned} \tag{2.15}$$

$$H_{d_y} = \left(\frac{3A_y}{((i - (i - 1))^2 + (j - (j - 1))^2 + (k - (k - 1))^2)^{(5/2)}} \right) \tag{2.16}$$

$$- \left(\frac{S_{i,j,k} \text{sen}(\varphi_{i,j,k}) \text{sen}(\theta_{i,j,k})}{((i - (i - 1))^2 + (j - (j - 1))^2 + (k - (k - 1))^2)^{(3/2)}} \right)$$

$$\begin{aligned} A_y &= (S_{i,j,k} \text{sen}(\varphi_{i,j,k}) \text{cos}(\theta_{i,j,k})(i - (i - 1)) \\ &\quad + S_{i,j,k} \text{sen}(\varphi_{i,j,k}) \text{sen}(\theta_{i,j,k})(j - (j - 1)) \\ &\quad + S_{i,j,k} \text{cos}(\varphi_{i,j,k})(k - (k - 1)))(j - (j - 1)) \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} H_{dz} &= \left(\frac{3A_z}{((i - (i - 1))^2 + (j - (j - 1))^2 + (k - (k - 1))^2)^{(5/2)}} \right) \\ &\quad - \left(\frac{S_{i,j,k} \text{cos}(\varphi_{i,j,k})}{((i - (i - 1))^2 + (j - (j - 1))^2 + (k - (k - 1))^2)^{(3/2)}} \right) \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned} A_z &= S_{i,j,k} \text{sen}(\varphi_{i,j,k}) \text{cos}(\theta_{i,j,k})(i - (i - 1)) \\ &\quad + S_{i,j,k} \text{sen}(\varphi_{i,j,k}) \text{sen}(\theta_{i,j,k})(j - (j - 1)) \\ &\quad + S_{i,j,k} \text{cos}(\varphi_{i,j,k})(k - (k - 1))(k - (k - 1)) \end{aligned} \quad (2.19)$$

A competição entre a energia de troca, a energia de desmagnetização e o efeito de um campo externo dá origem a diferentes estados magnéticos em pequenas partículas ferromagnéticas. Como já mencionado anteriormente, a interação dipolar eleva demasiadamente o tempo computacional devido à grande quantidade de interações entre as células. Um recurso utilizado em micromagnetismo para contornar esta situação é o uso de um raio de corte para a interação dipolar. Este raio de corte funciona como um limitador desta quantidade de interações, ou seja, as contribuições para a energia dipolar de uma determinada célula só são levadas em conta até certa distância, onde estas contribuições são consideráveis.

Neste trabalho tivemos como referência para o raio de corte o trabalho de C. Santamaria e H.T. Diep.^{73,74} Usamos uma distância de seis células para o raio de corte da interação de dipolar, a partir desta distância consideramos as contribuições para a energia

dipolar desprezíveis. Ainda, com a intenção de testar se as aproximações feitas tornam o nosso modelo confiável fizemos ainda um último teste que foi o de testar o comportamento das partículas com dimensões abaixo do comprimento de troca. Para isso foram feitas três simulações, Figura 2.10, para uma partícula FM de dimensões $x = 100 \text{ nm} \times y = 100 \text{ nm} \times z = 50 \text{ nm}$ sem a presença do campo de interface para testar a confiabilidade do algoritmo para tais partículas com células abaixo do comprimento de troca.

Os resultados apresentados na Figura 2.10 mostram simulações para células de tamanho iguais a 10 nm (Figura 2.10.a), 5 nm (Figura 2.10.b) e 2.5 nm (Figura 2.10.c). Os perfis de magnetização, no plano $x - y$, são idênticos e a componente φ da magnetização têm pouca diferença, como visto nas três escalas, os valores desta variável estão no intervalo entre 72° e 106° . Estes resultados nos fornecem uma confiabilidade no algoritmo para podermos construir e apresentar os nossos resultados na próxima seção.

2.1.1 Resultados

O objetivo principal dos trabalhos recentes⁴⁷ na área de densidade de gravação magnética é compreender os processos de estabilização magnética de partículas com dimensões nanométricas, bem como a sua aplicabilidade na indústria de armazenamento de dados. A intensidade de fuga de fluxo do campo magnético é um fator importante nas aplicações técnicas, principalmente para leitura, de matrizes de partículas magnéticas utilizadas no armazenamento de dados. Esta fuga de fluxo é oriunda da carga magnética acumulada na superfície lateral da partícula como mostrado na Figura 2.11. Tais partículas, dependendo de sua estabilidade magnética se pode associar a unidade de informação (o bit).

A variação do perfil de magnetização da partícula magnética, causada pela competição entre as tendências impostas pelo campo dipolar e o campo de interface, pode alterar a intensidade da fuga de fluxo. Esta alteração pode ser usada para aumentar a quantidade de fuga de fluxo magnético da partícula observando a disposição da sua geometria. Os resultados inicialmente apresentados neste capítulo revelam o comportamento das partículas magnéticas (nanométricas) na presença do campo de interface. Estes resultados levam

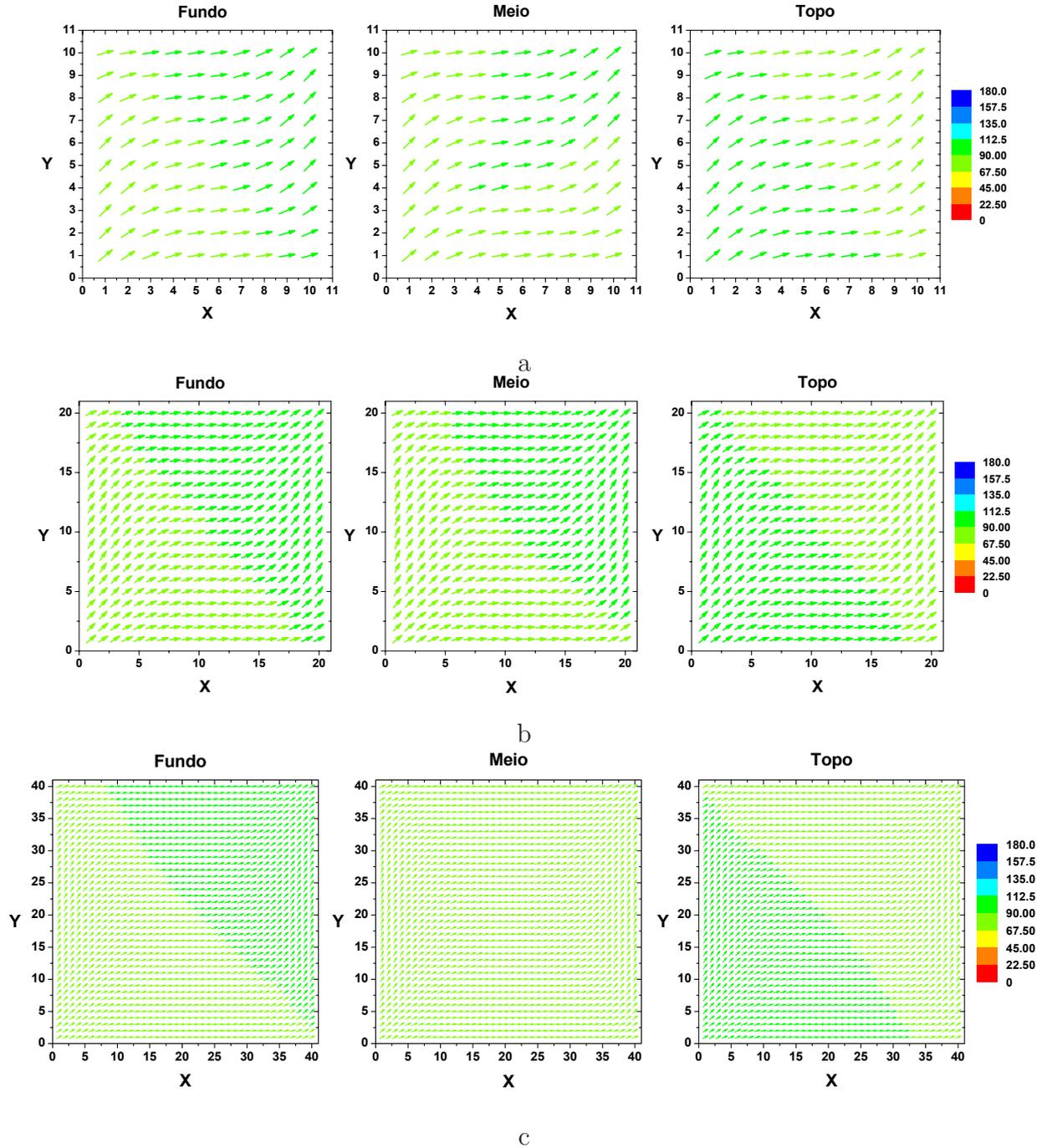


Figura 2.10: Comparação do tamanho das células simulações feitas para uma partícula magnética com anisotropia magnética uniaxial (eixo x) e campo dipolar sobre todas as células dentro do raio de corte (6 células). As células têm dimensões laterais l : (a) $l = 10$ nm, (b) $l = 5$ nm e (c) $l = 2.5$ nm.

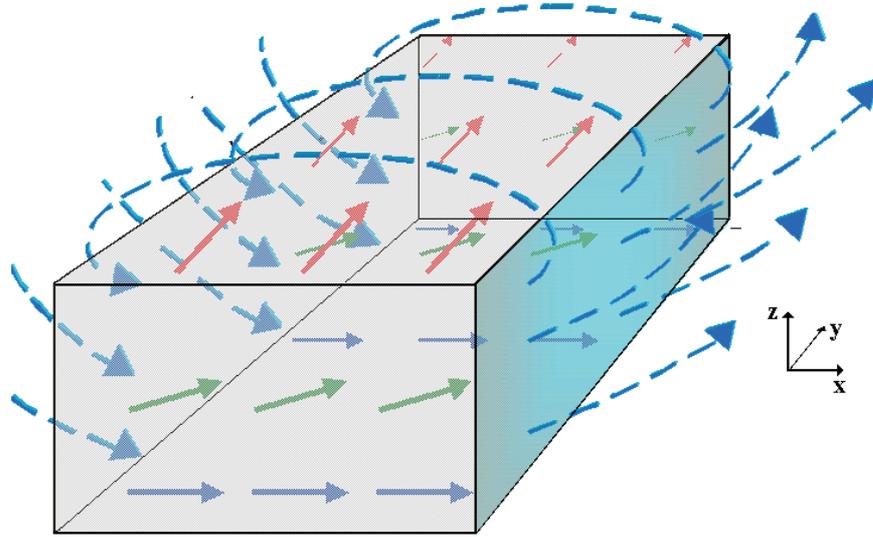


Figura 2.11: Fuga de Fluxo magnético de uma partícula que tem seus momentos magnéticos da interface alinhados na direção x pelo campo de interface.

em conta a geometria da partícula, quanto a base, que pode ser retangular ou quadrada, enfatizando as fases magnéticas nas partículas e a densidade de carga magnética média em uma das faces da partícula, Figura 2.11.

2.1.2 Estudo da densidade de carga magnética média

Apresentamos na Figura 2.12 a variação da densidade de carga magnética média de partículas de forma retangular e quadrada com sua espessura (eixo z), isto é feito com o intuito de observar as tendências que o campo de interface, atuante somente no plano inferior da partícula, impõe nos planos superiores. No nosso algoritmo os fatores que regulam os parâmetros experimentais como campo de troca, campo dipolar, campo de anisotropia e campo de interface são regulados pelas constantes α_{EXCH} , α_D , α_{ANIS} e α_J respectivamente (Ver apêndice A).

O nosso estudo da densidade de carga magnética média leva em conta a competição entre o efeito estabilizante do campo de interface, regulado por α_J , e o efeito do campo dipolar, regulado por α_D , que tende a diminuir a densidade de cargas magnética nas superfícies da partícula para diminuir a energia magnetostática. Os resultados apresentados

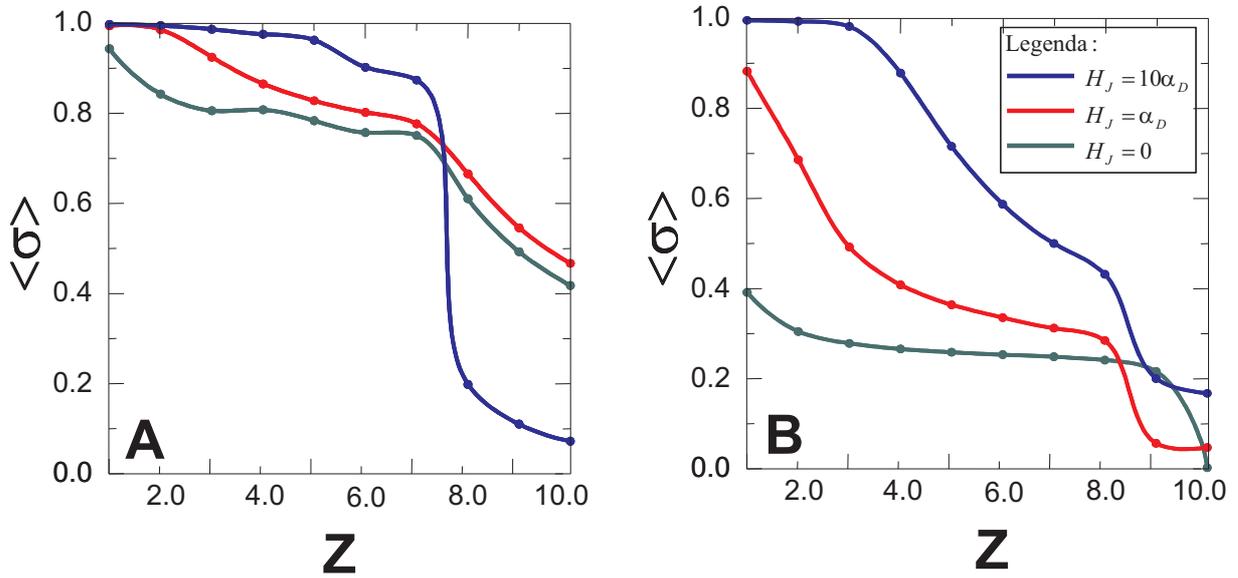


Figura 2.12: Comportamento da densidade superficial de carga magnética média das partículas, com geometrias retangulares e quadradas, variando com o número de planos de células que constituem a partícula. As geometrias escolhidas foram: (A) Base Quadrada; (B) Base Retangular.

a seguir comparam a influencia destes campos na medida em que a partícula torna-se mais alta. A legenda mostrada na Figura 2.12.B mostra a relação entre campo de interface (α_J) e campo dipolar (α_D) para as duas geometrias das partículas.

A Figura 2.12.A, o comportamento da densidade de carga média variando com a altura z de uma partícula uma partícula de base quadrada, 10×10 células, e altura variando de 0 a 10 células. Nessas simulações o tamanho da célula é de 10 nm. Para o campo de interface nulo ($\alpha_J = 0$, curva verde) observamos que o comportamento da densidade de carga magnética é decrescente com uma queda mais acentuada para partículas com espessura maiores que $z = 7$ (70 nm).

As simulações feitas para um campo de interface com valor igual ao campo dipolar ($\alpha_J = \alpha_D$, curva vermelha) encontramos um comportamento semelhante ao anterior, entretanto, partículas menos espessas (z até 2, 20 nm) retêm uma quantidade de carga magnética maior do que no caso sem campo de interface ($\alpha_J = 0$ curva verde). Observamos que a densidade superficial de carga magnética média tem um valor máximo para partículas de menor espessura (z até 2, o que corresponde a 20 nm, já que cada célula tem

10 nm) e a medida que a altura da partícula vai aumentando esse valor vai diminuindo. Para partículas com um valor mais intenso de campo de interface ($\alpha_J = 10\alpha_D$, curva azul) observamos uma forte mudança no comportamento da carga magnética.

Para partículas com espessuras até 50 nm ($z = 5$) a carga magnética se mantém próxima ao seu valor máximo tendo uma diminuição suave no intervalo de espessuras entre 50 nm e 70 nm. Espessuras a partir de 70 nm apresentam abrupta queda no valor da carga magnética, caindo para aproximadamente 20% do seu valor máximo. Este comportamento é fruto da competição entre duas tendências, o campo de interface alinhar os momentos da interface e campo dipolar tende a diminuir a energia magnetostática. Para partículas muito espessas, como no caso as de espessuras maiores que 70 nm a influência do campo de interface nos momentos magnéticos da parte superior da partícula tende a ser menor que a contribuição do campo dipolar. Por sua vez estas esses momentos magnéticos da parte superior da partícula também influenciam os momentos da parte mais baixa da partícula diminuindo os efeitos do campo de interface e conseqüentemente a estabilização da magnetização via campo de interface. Também observamos que para partícula mais espessas, mais espessas que 70 nm, com o aumento do campo de interface a queda na densidade de carga é tão maior quanto maior for o valor do campo de interface. Este fator indica que em estruturas muito altas o campo de interface pode não fornecer seu objetivo que é estabilizar a partícula dando o máximo de carga lateral para favorecer o processo de leitura de dados.

A Figura 2.12.B exibe o comportamento da densidade de carga média de partículas que possuem base retangular, 10×20 células, e altura variando de 0 a 10 células. Neste gráfico estudamos novamente a competição entre as tendências de alinhamento com o eixo de anisotropia dos momentos magnéticos do plano de interface (α_J) com a tendência a diminuição da energia magnetostática via campo dipolar (α_D). Notavelmente, as curvas da densidade de carga magnética média possuem características semelhantes as de base quadrada, mostradas na Figura 2.12.A, de queda da carga magnética com a espessura da partícula, entretanto o efeito de uma área perpendicular a magnetização maior realça os efeitos do campo dipolar em virtude desta configuração exibir uma energia magnetostática

maior quando os momentos magnéticos ficam alinhados com o eixo de anisotropia nas superfícies $y - z$ da partícula.

A diminuição da carga magnética é muito maior se comparada com a situação de partícula com base de geometria quadrada, Figura 2.12.A. Para as situações em que temos campo de interface nulo ($\alpha_J = 0$, curva verde) e campo de interface igual ao campo dipolar ($\alpha_J = \alpha_D$, curva vermelha) não chegamos nem a obter valor máximo para a carga magnética, para $\alpha_J = 0$ aproximadamente 40% do valor máximo e para $\alpha_J = \alpha_D$ aproximadamente 90% do seu do valor máximo.

O comportamento de queda não é parecido nos dois casos até a espessura $z = 8$ células (80 nm) onde o decaimento da partícula sob influência do campo de interface é maior do que a partícula sem campo de interface, comportamento também observado para a partícula de base quadrada, entretanto é importante observar que para a partícula sem a presença do campo de interface para espessura $z = 10$ a carga magnética praticamente é anulada pelos efeitos do campo dipolar. Para a situação em que temos um campo de interface mais intenso, ($\alpha_J = 10\alpha_D$, curva azul) conseguimos obter carga magnética máxima até a altura de $z = 3$ (30 nm) e para espessuras maiores a carga magnética decresce até um valor mínimo 20% do seu valor máximo em $z = 10$ (100 nm).

2.1.3 Fases Magnéticas para uma Partícula Magnética

Outro ponto interessante a ser abordado é o comportamento dos perfis de magnetização destas partículas magnéticas. O objetivo aqui é apresentar uma coleção de estruturas claramente reconhecidas no meio do nanomagnetismo⁴⁷. A apresentação destes resultados inicialmente será feita pela observação de três planos da partícula magnética que denominaremos de fundo, meio e topo. Cada seta representa a disposição da célula no plano $x - y$ e a cor da célula representa o mergulho da magnetização na direção z . Inicialmente vamos dar ênfase ao estudo de partículas com a geometria da base quadrada, $N_x = 10$ células, $N_y = 10$ células e $N_z = 10$ células, cada célula com 10 nm.

Um estado comumente encontrado na configuração dos perfis de magnetização é o denominado “S-state”⁴⁷. O “S-state” (Figura 2.13) tende a minimizar a energia de mag-

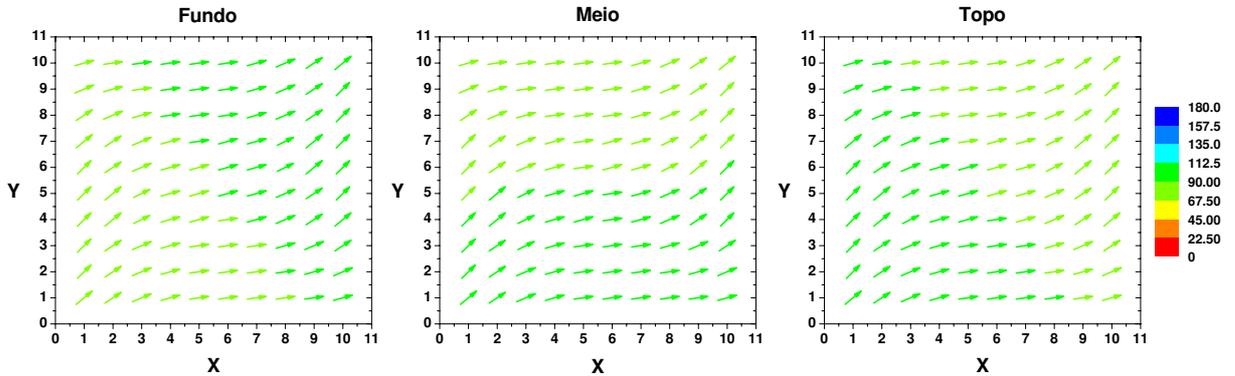


Figura 2.13: “S-state” encontrado para partícula com base de geometria quadrada, $N_x = 10$, $N_y = 10$ e $N_z = 10$, na ausência de campo de interface.

netostática, o que observa-se nesta configuração, é que na face lateral da partícula, perpendicular ao seu eixo fácil (eixo x), os momentos magnéticos curvam-se para diminuir pólos de carga magnética nesta superfície, este tipo de comportamento causa uma diminuição da fuga de fluxo magnético nas faces $y - z$ da partícula. O estado “S-state” praticamente não apresenta componente z da magnetização exibindo a mesma disposição nos três planos escolhidos para a representação da partícula, fundo, meio e topo. Esta simulação foi feita na ausência de campo de interface $\alpha_J = 0$.

Na Figura 2.14, temos a magnetização alinhada com o eixo de anisotropia na base da partícula por influencia do campo de interface, praticamente sem componente z . No plano do meio da partícula encontramos uma fase “S-State” com a magnetização tendo componente perpendicular ao plano $x - y$ principalmente na vizinhança das faces perpendiculares ao eixo de anisotropia. O momento magnético médio do plano do meio praticamente gira de um ângulo de 45° com o momento magnético médio da interface inferior. Na superfície superior a magnetização forma uma fase quase antiparalela ao eixo fácil da partícula. Esta configuração é possível devido à intensidade do campo de interface que estabiliza os planos inferiores, entretanto tem pouca influência sobre a região superior da partícula que se estabiliza, via interação dipolar, desta forma para minimizar a energia magnética. Nesta simulação utilizamos $\alpha_J = \alpha_D$.

O resultado apresentado na Figura 2.15 é o que denominamos de estado não remanente (ENR), pois a magnetização nos três planos fundo, meio e topo, apresentam praticamente

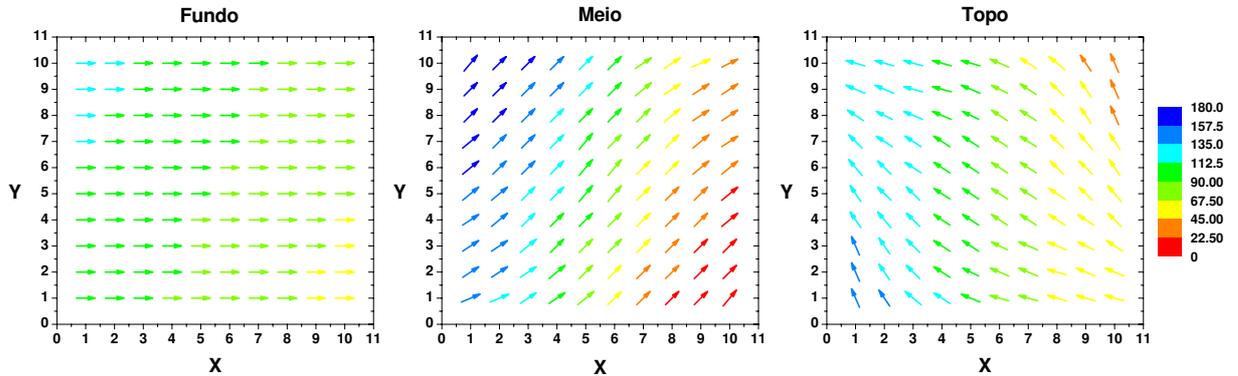


Figura 2.14: Interface estabilizada com giro de aproximadamente 90° da magnetização entre cada plano. Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 10$ e $N_z = 10$ e campo de interface igual ao campo dipolar.

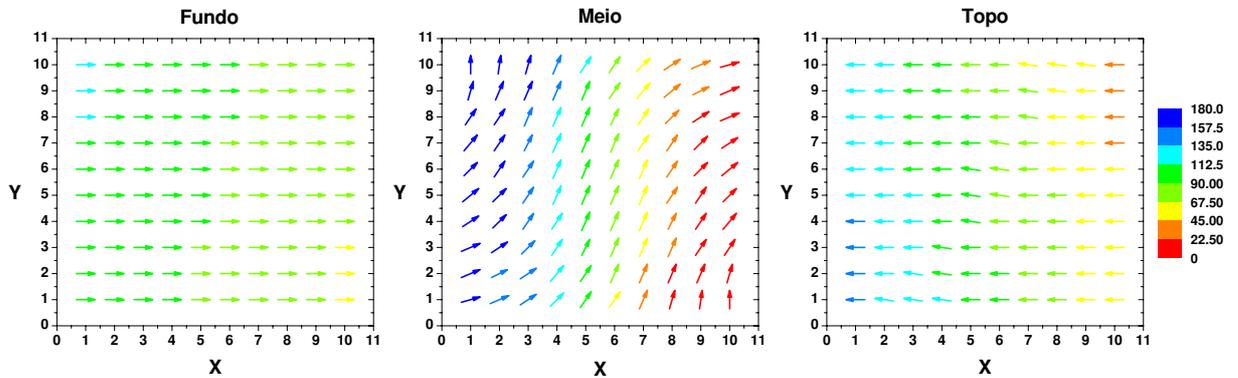


Figura 2.15: Interface estabilizada com giro na magnetização de aproximadamente 180° entre os planos da interface (Fundo), do meio e do topo da partícula. Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 10$ e $N_z = 10$ e campo de interface 5 vezes maior que o campo dipolar.

90° entre os momentos magnéticos de cada um deles, apresentando, inclusive componente vertical da magnetização nos planos do meio da partícula e o plano da superfície apresenta magnetização antiparalela ao eixo fácil da partícula. Este é um estado encontrado para partículas mais espessas, onde a intensidade do campo de interface é suficiente para estabilizar os planos mais baixos, isto faz com que as linhas de força destes momentos dos planos inferiores atuem, juntamente com o efeito do campo dipolar (interno a partícula), imponham aos momentos magnéticos do topo da partícula uma posição de equilíbrio magnético orientada de 180° em relação aos momentos da sua base.

A Figura 2.16 exibe o estado remanente, neste estado a partícula magnética exibe uma estabilidade magnética imposta pela influência do campo de interface que, neste caso, é 10

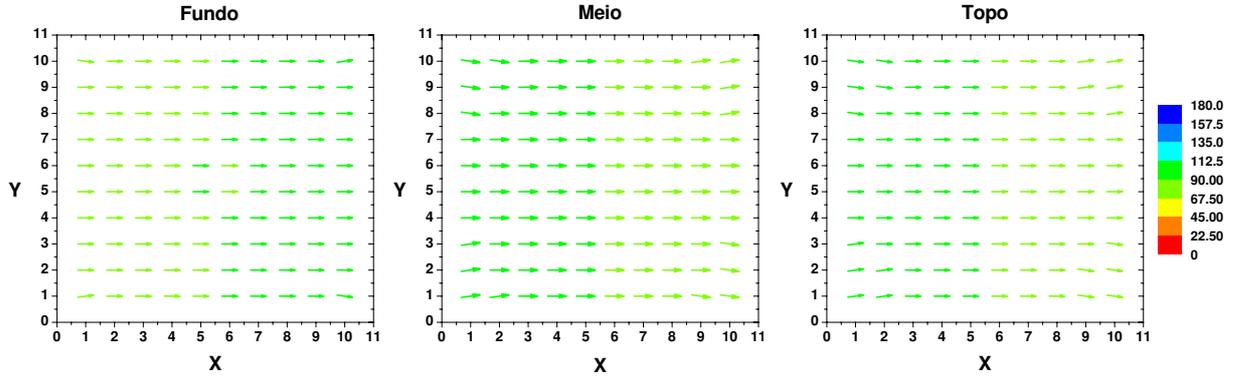


Figura 2.16: Estado Remanente. Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 10$ e $N_z = 10$ e campo de interface 10 vezes maior que o campo dipolar.

vezes maior que o campo dipolar da partícula magnética. Este estado também pode ser encontrado para os campos de interface menos elevados, entretanto a partícula magnética tem que ter menor espessura como mostrado na Figura 2.11, para menores espessuras maior densidade de carga magnética tendo em vista que $\sigma = \vec{M} \cdot \hat{n}$, onde \hat{n} é o vetor perpendicular ao plano $y - z$. Este é o estado de interesse tecnológico ao qual se pode associar de maneira confiável a unidade lógica de gravação magnética (o bit) já que ele forneceria uma maior quantidade de fuga de fluxo magnético nas faces perpendiculares ao eixo de anisotropia da partícula (eixo x).

Para estudar o efeito da geometria na estabilidade das partículas decidimos aumentar y na face ($y - z$) perpendicular ao seu eixo de anisotropia, com isto o efeito dipolar torna-se mais evidente por a partícula ter faces perpendiculares ao eixo de anisotropia maiores o que fornece uma energia magnetostática muito alta se a magnetização apontar perpendicularmente a esta face.

Na Figura 2.17, apresentamos para os planos do fundo (interface), meio e topo, a configuração da magnetização de uma partícula de base retangular, partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 20$ e $N_z = 10$ sem campo de interface $\alpha_J = 0$. Nos três planos encontramos a fase “S-State”, com a magnetização média de cada plano formando um ângulo de quase 90° com o eixo fácil da partícula. Neste estado praticamente não temos carga magnética nas superfícies $y - z$ o que resulta em ausência de fuga de fluxo magnético que é o que se deseja para que a leitura magnética seja feita. A face $y - z$ maior faz com

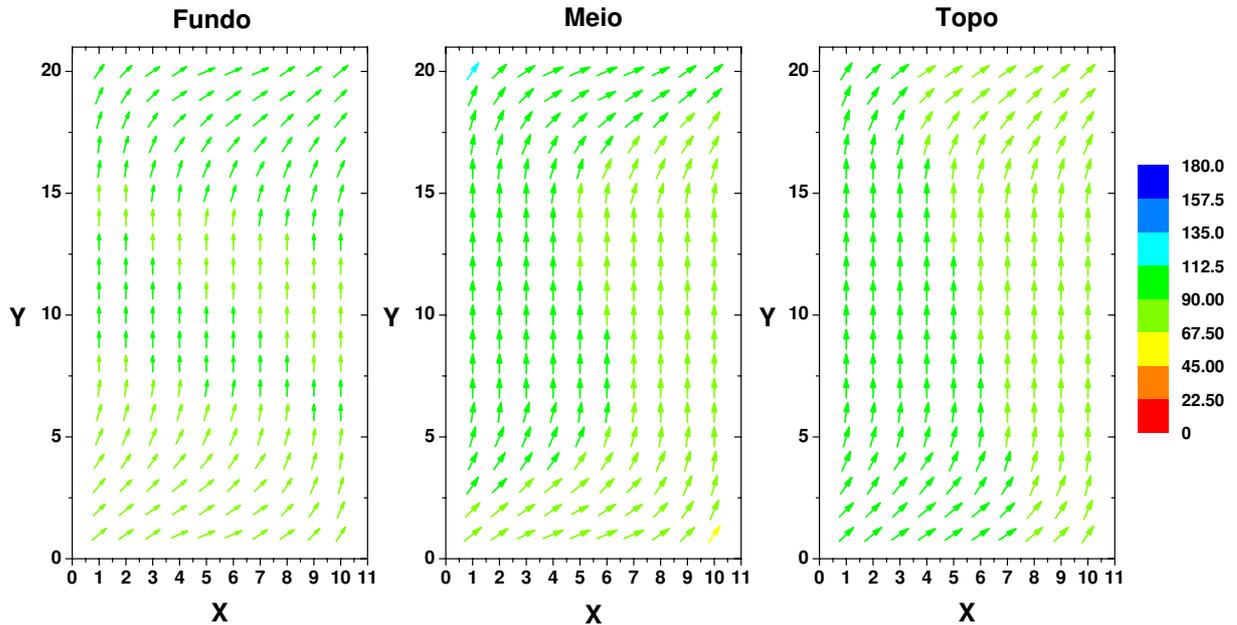


Figura 2.17: “S-state”. Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 20$ e $N_z = 10$ sem campo de interface.

que a estabilidade magnética seja alcançada com a magnetização da partícula apontando quase que perpendicularmente ao eixo fácil da partícula.

Para efeito de comparação No caso da partícula com base quadrada, Figura 2.13, temos uma configuração magnética mais favorável a ser associada com a unidade lógica de gravação (bit) que no caso da Figura 2.17, onde a configuração da partícula apresenta todas as células apontando perpendicularmente ao eixo de anisotropia da partícula na sua parte central girando apenas nas regiões próximas as faces $y - z$. Este estado também são caracterizados como não remanentes (ENR).

Para este tipo de geometria, mais alongada no eixo $-y$, a segunda estrutura apresentada, Também ENR (Figura 2.18), este estado foi obtido, em nossas simulações, para partículas com maior face lateral e para valores de campo de interface baixos. Estes fatores fazem com que os efeitos do campo dipolar sejam evidenciados pelas grandes faces laterais $y - z$ minimizando assim a energia magnetostática. A superfície (Topo) e a interface (fundo) da partícula praticamente têm disposição opostas para a magnetização, enquanto que os planos do meio tem magnetização com acentuada componente z nas bordas maiores e formando uma configuração tipo uma flor no plano.

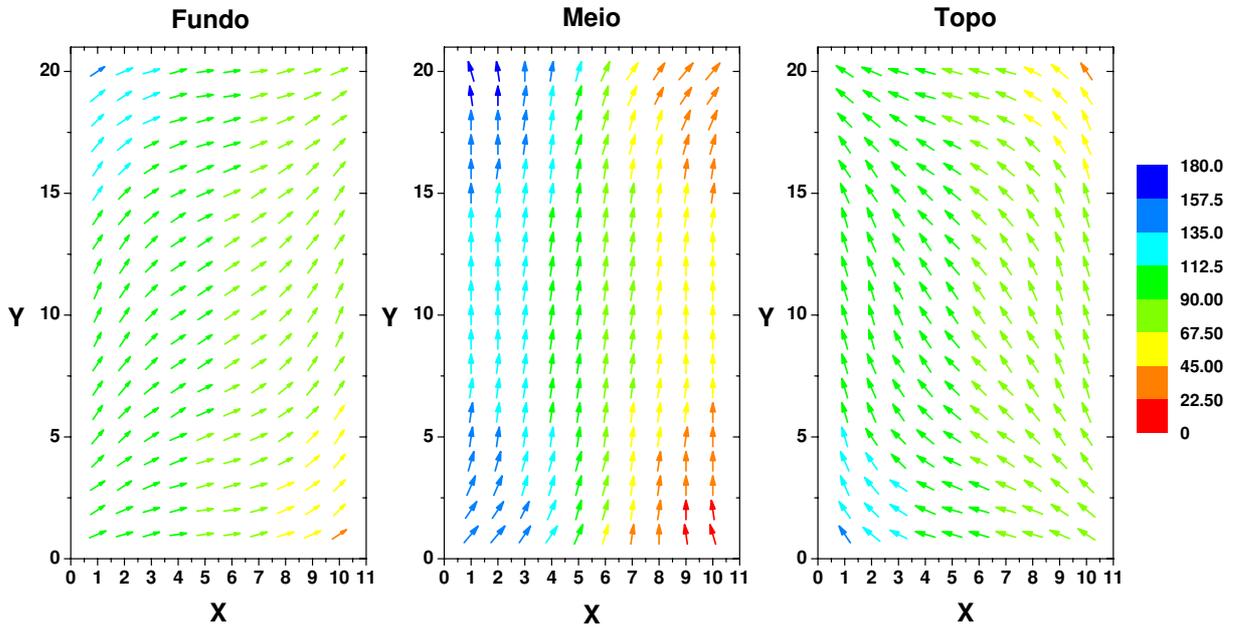


Figura 2.18: Estado não remanente (ENR). Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 20$ e $N_z = 10$ e campo de interface com o mesmo valor do campo dipolar.

Na Figura 2.19, temos uma estrutura em que o campo de interface começa a competir com o campo dipolar buscando o alinhamento dos momentos da interface da partícula. Os momentos magnéticos da região intermediária e da superfície da partícula sofrem menos a influência do campo de interface, então procuram a acomodação em uma situação em que a energia magnetostática é menor. Com a interface estabilizada contendo um estado “S-State”, no meio da partícula, girado de aproximadamente 45° com a interface inferior. A superfície superior formando um giro de aproximadamente 90° com o eixo fácil da partícula.

Por último, apresentamos o estado remanente (ER) para partículas com a geometria retangular. Nesta configuração a partícula é submetida a um intenso campo de interface que estabiliza os momentos magnéticos da interface e estes influenciam os planos superiores da partícula. Para encontrar este estado fizemos a simulação com uma partícula de espessura menor $z = 3$ como sugere o gráfico da densidade de carga magnética para partículas com essa geometria Figura 2.12.B.

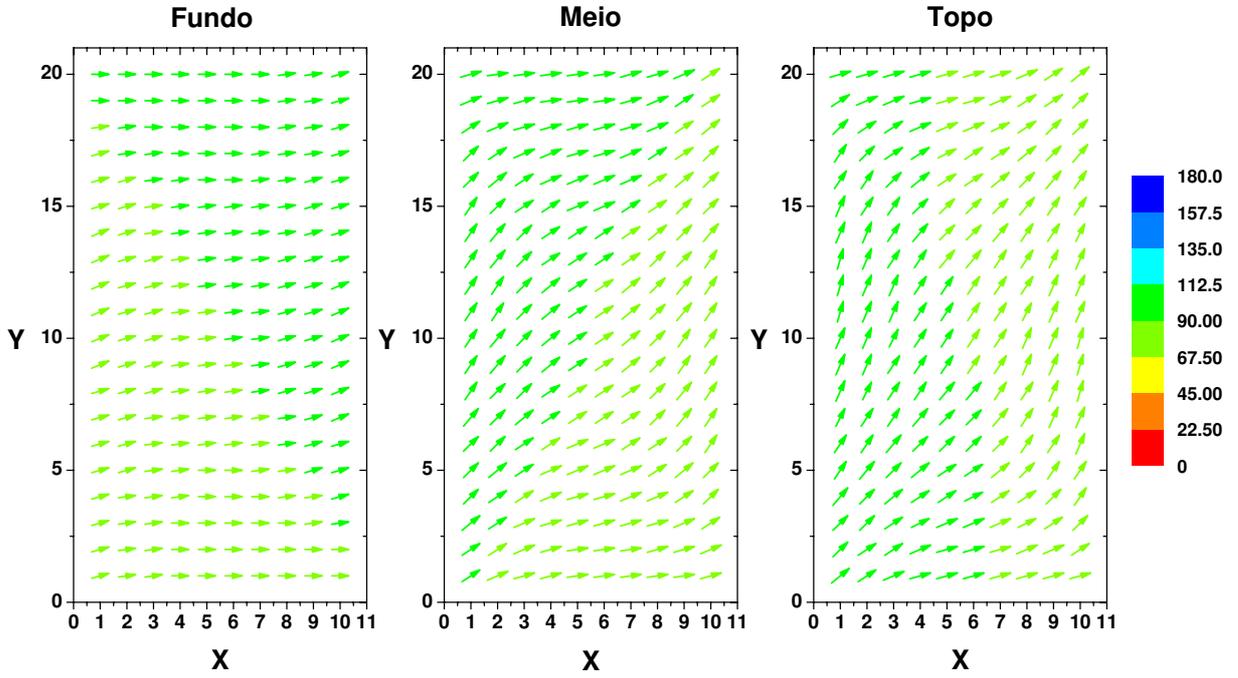


Figura 2.19: Interface estabilizada com giro de 90° . Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 20$ e $N_z = 10$ e campo de interface 5 vezes maior que o campo dipolar.

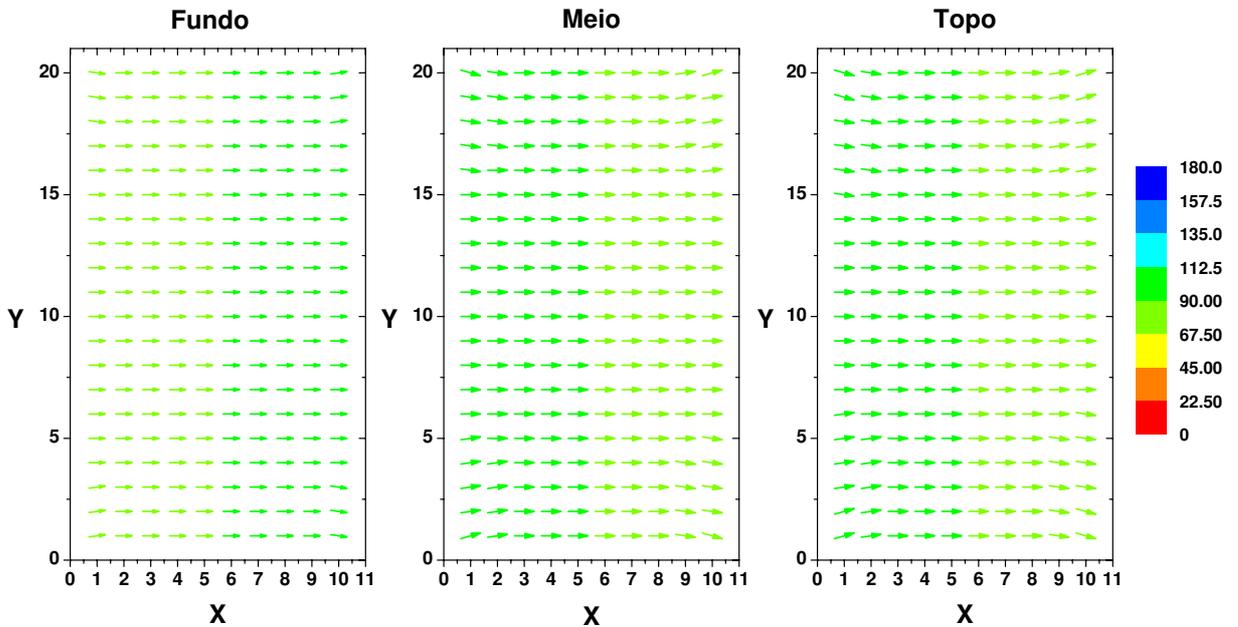


Figura 2.20: Estado Remanente. Partícula com a geometria $N_x = 10$, $N_y = 20$ e $N_z = 10$ e campo de interface 10 vezes maior que o campo dipolar.

2.2 Modelo otimizado

O tempo computacional gasto para se obter estruturas magnéticas como as mostradas na seção 2.1 torna-se muito elevado quando trabalhamos com partículas maiores de dimensões da ordem de dezenas de nanômetros, ou mesmo se procuramos observar de forma mais detalhada uma estrutura magnética. Nas simulações micromagnéticas este tempo pode ser significativamente diminuído usando o artifício de células cúbicas de momentos magnéticos, como mencionado na seção 2.1.

Em vez de trabalhar com a unidade de simulação com momentos magnéticos trabalharemos com blocos de momentos magnéticos que apontam em uma mesma direção, sendo esta condição garantida pelo fato da célula cúbica ter lados menores que o comprimento de troca do Fe . A Figura 2.10 mostra para o caso do Fe três simulações magnéticas com células escolhidas com tamanhos de 2,5 nm, 5,0 nm e 10 nm, todos menores que o comprimento de troca do Fe . Os padrões de magnetização apresentados são os mesmos, entretanto, obtivemos mais detalhes na figura com célula de 2,5 nm.

2.2.1 Alteração na energia de troca

Este resultado inicial motivou a busca por algoritmos que acelerassem nossas simulações enquanto estes primeiros resultados (seção 2.1) eram encontrados. Entre diversas modificações introduzidas no algoritmo inicial, uma das mais significativas, foi a troca de formalismo adotada para o cálculo da energia de troca, ver apêndice B, onde descrevemos esta energia por um procedimento de discretização em cubos (células)⁶⁸ interagentes, onde a magnetização dentro de cada célula, com lado d , é constante, mas pode variar de direção entre células vizinhas.

Tanto o modelo inicialmente usado como este são equivalentes. Entretanto, este último nos garantiu também a possibilidade de troca de parâmetros do material como constante de anisotropia, constante de troca, como também liberdade para escolha do tamanho da célula. A estrutura magnética é descrita em termos dos momentos magnéticos de pequenas células cúbicas, com o lado d escolhido com tamanho menor que o comprimento

de troca do Ferro. A densidade de energia é escrita como uma soma das energias de troca, interface, anisotropia, Zeeman e energia dipolar:

$$\begin{aligned}
E = & \frac{A}{d^2} \sum_j \sum_k (1 - \hat{m}_j \cdot \hat{m}_k) - M_S \vec{H}_{INT} \cdot \sum_i \hat{m}_i - \\
& M_S \vec{H} \cdot \sum_j \hat{m}_j - K \sum_j (m_j^x)^2 + \\
& \frac{M_S^2}{2} \sum_j \sum_k \left(\frac{\hat{m}_j \cdot \hat{m}_k}{n_{jk}^3} - \frac{3(\hat{m}_j \cdot \hat{n}_{jk})(\hat{m}_k \cdot \hat{n}_{jk})}{n_{jk}^5} \right)
\end{aligned} \tag{2.20}$$

onde o primeiro termo é o termo de troca e a segunda soma se estende sobre os vizinhos mais próximos da célula j . O segundo termo é o acoplamento da troca da interface, e a soma existe, somente, sobre o primeiro plano da partícula FM. O terceiro termo é a energia Zeeman e o quarto a energia de anisotropia do FM e o último termo é a energia magnetostática. M_S é a magnetização de saturação, \hat{m}_i é a direção da magnetização e \hat{n}_{ij} , no último termo, é a distância entre as células i e j em unidades do tamanho de um dos lados da célula (d), $d = 3nm$ para o Fe , menor do que o seu comprimento de troca $l_{EX} \approx 10nm^{75}$. Em todas as simulações executadas neste capítulo estaremos utilizando células com este tamanho, $d = 3nm$.

Como parâmetros experimentais do Fe nós usamos os seguintes valores: constante de troca $A = 2.5 \times 10^{-11}$ J/m, constante de anisotropia $K = 4.2 \times 10^4$ J/m³ e magnetização de saturação $M_S = 1.7 \times 10^6$ A/m.⁷⁶ Usamos um algoritmo auto consistente de campo local que permite calcular a orientação dos momentos magnéticos de cada célula.⁷⁷⁻⁸⁴ A configuração de equilíbrio é a direção \hat{m}_i que minimiza a energia magnética da partícula. No equilíbrio o torque sobre cada momento magnético, em cada célula, é zero ($\vec{m}_i \times \vec{H}_{eff}^i = 0$), onde o campo efetivo é dado por $\vec{H}_{eff} = -(1/M_S)(\partial E / \partial \vec{m}_i)$.

2.2.2 Resultados

Os resultados apresentados nesta seção tratam de partículas FM, sobre um substrato AFM, com base de geometria quadrada. Nestes resultados enfocamos nossos esforços na

caracterização de fases magnéticas para as partículas mudando dois fatores fundamentais na estabilização de partículas com essa geometria. O primeiro fator é a variação do tamanho da partícula, o segundo fator é como partículas com essas mesmas dimensões comportam-se na presença de um campo de interface oriundo do acoplamento FM/AFM.

O tamanho da partícula FM é um fator de grande importância na sua estabilidade no que se refere à gravação magnética. Em partículas FM de base quadrada com lado d algumas centenas de vezes o comprimento de troca do material podemos encontrar uma situação em que a magnetização pode se acomodar neste volume. Um efeito indesejável nesta acomodação é a perda de coercividade da partícula já que a magnetização efetiva na direção de interesse, a qual se quer associar a informação lógica (estado “1” ou “0”), diminui.

Outro fator importante associado a este enfoque é que partículas com dimensões maiores diminuem a densidade de gravação magnética. Por outro lado, partículas FM muito pequenas podem passar a ter um comportamento superparamagnético. Nesse regime, a magnetização pode flutuar de um estado magnético para o outro por causa de sua energia térmica. Esse efeito de flutuação no estado magnético da partícula é muito prejudicial à informação lógica a ser guardada na partícula FM, afinal o que se deseja e que a informação nela guarda perdure por muito tempo. Estes fenômenos de relaxação da magnetização tornam-se muito importantes para a gravação magnética. O tempo de relaxação do momento magnético de uma partícula depende da temperatura, a Lei de Nèel-Arrhenius⁸⁵ descreve este comportamento:

$$\tau = \tau_0 e^{\frac{KV}{k_B T}} \quad (2.21)$$

onde K é a constante de anisotropia do material, V é o volume da partícula, k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura. Usualmente temos $\tau_0 = 10^{-9}$ s. Se o tempo de relaxação é pequeno, a magnetização não fica estável, e temos o fenômeno do superparamagnetismo. A forma de apresentação dos resultados escolhida para as duas situações

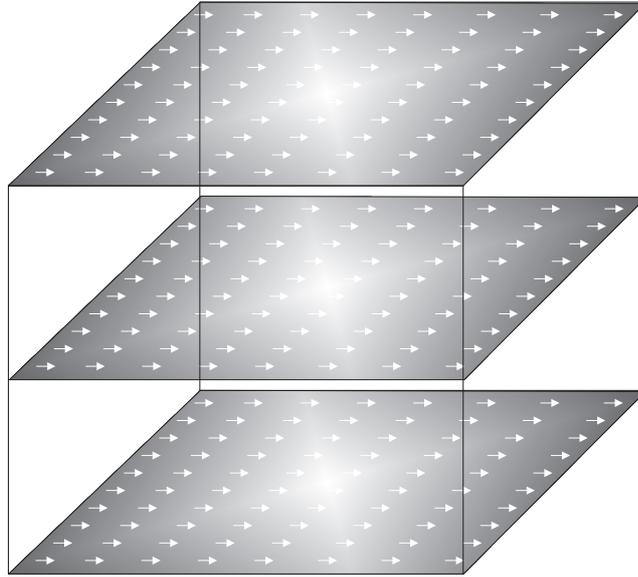


Figura 2.21: Estado remanente (ER) “Uniform”.

acima descritas foi à construção de dois diagramas de fases para tamanhos diferentes de bases, com geometria quadrada ($d \times d$), e diferentes alturas h . Também foram escolhidas duas situações relacionadas ao campo de interface. Inicialmente trabalharemos com o campo de interface nulo $H_J = 0$ no diagrama de fases mostrado na Figura 2.27. No diagrama de fases da Figura 2.28 foi utilizado um forte campo de interface de 16.3 kOe que é o valor do campo de troca da partícula FM de ferro.

Antes de iniciar a descrição das fases magnéticas encontradas para esta configurações de geometria e de campo de interface, D. Goll et. al.⁴⁷ introduziram a idéia de classificar os estados magnéticos “estado remanente” (ER), estado “quase-remanente” (EQR) e “estado não remanente” (ENR). Trata-se de uma classificação para estados magnéticos associados a quantidade de magnetização retida pela partícula na direção do eixo de anisotropia. O diagrama de fases mostra seis fases como resultado da variação da geometria da partícula, são elas “Uniform”, “Twist-I”, “C-flower”, “Z-flower”, “Twist-II” e a fase “Vortex”. A fase uniforme é a que temos a maioria dos momentos magnéticos das células orientados em uma mesma direção e por este motivo a classificaremos como ER. Esta situação é a que possui maior interesse da indústria de gravação magnética para o armazenamento de dados tendo em vista que vai fornecer uma alta densidade de cargas magnéticas nas faces

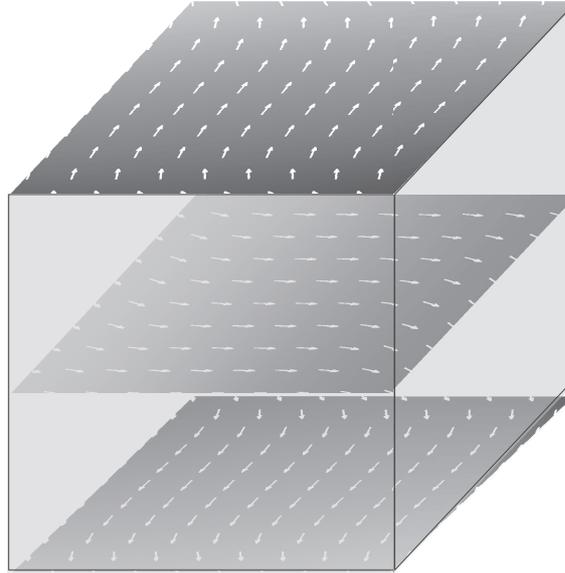


Figura 2.22: Estado quase remanente (EQR) “Twist-I”.

perpendiculares ao eixo fácil da partícula ocasionando maior fuga de fluxo magnético. A Figura 2.21 ilustra este estado.

A Figura 2.22, mostra o a fase “Twist-I” que vamos denominar EQR. Nesta fase temos uma característica que mostra bem a competição entre os campos de anisotropia H_A , de interface H_{INT} (quando for o caso) e o campo dipolar H_D que tende a desestabilizar a configuração de interesse que é o ER. Nessa situação os momentos magnéticos da interface formam uma estrutura tipo “S-state” disposta quase perpendicularmente ao eixo de anisotropia enquanto que os momentos da superfície da partícula tem configuração semelhante com o sentido oposto. Os planos intermediários da partícula apresentam este mesmo estado, entretanto com a maior parte da magnetização retida no eixo de anisotropia (eixo- x). Esta configuração da partícula retém alguma carga nas faces $y-z$ da partícula, motivo pelo qual a denominaremos de EQR.

A fase “C-flower” apresentada na Figura 2.23 praticamente não apresenta carga magnética nas faces $y-z$ da partícula, os momentos magnéticos estão quase todos contidos neste plano. Na superfície e na interface a magnetização tem uma estrutura parecida com uma flor configuração que diminui a aplicabilidade de uma partícula magnética neste estado como armazenadora de informação. Devido a esta ausência de cargas no plano

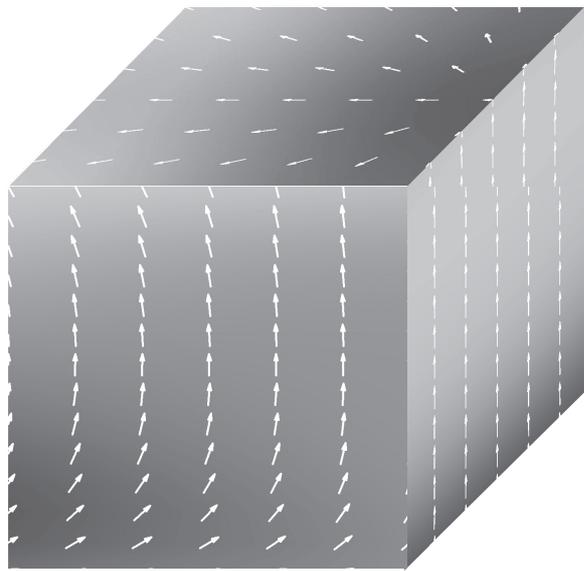


Figura 2.23: Estado não remanente (ENR) “C-flower”.

$y - z$ denominamos esta fase de ENR.

A fase “Z-flower”, mostrada na Figura 2.24, também é caracterizada como um ENR onde os momentos magnéticos da partícula magnética encontram-se quase todos perpendiculares ao plano de interface e tanto neste plano como no plano da superfície existe uma formação da magnetização formando uma estrutura semelhante a uma flor com mergulhos verticais opostos.

Outra fase caracterizada foi a “Twist-II” onde também consideramos um ENR, pois praticamente não há cargas magnéticas nas faces $y - z$ resultando em fuga de fluxo magnético originado nessas faces praticamente zero. Na Figura 2.25 podemos observar que a magnetização nos planos apresenta um estado tipo “S-state” que giram de aproximadamente de 180° entre si. O “S-state” do plano de interface (base da partícula) tem a maioria dos momentos magnéticos paralelos ao plano $y - x$, o “S-state” dos planos do meio da partícula está girado de 90° em relação ao plano da interface e o “S-state” da superfície da partícula está girado de 180° em relação ao “S-state” formado no plano da interface.

O estado que representa o menor interesse tecnológico no que se refere a gravação em nanopartículas magnéticas é o “Vortex”. Isto é notável pois este é o estado que apresenta

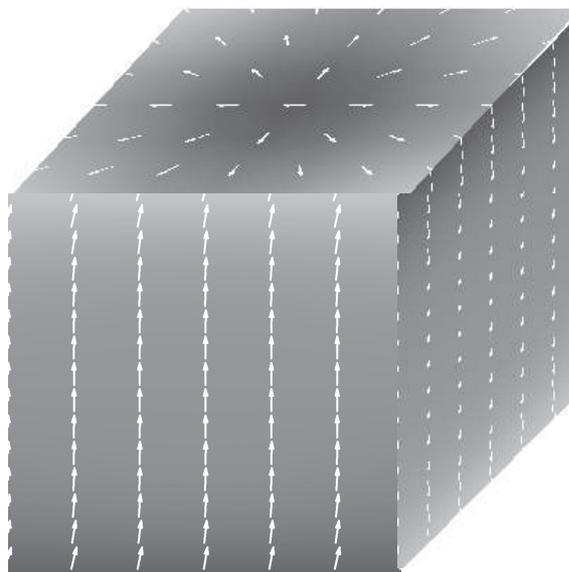


Figura 2.24: Estado não remanente (ENR) “Z-flower”.

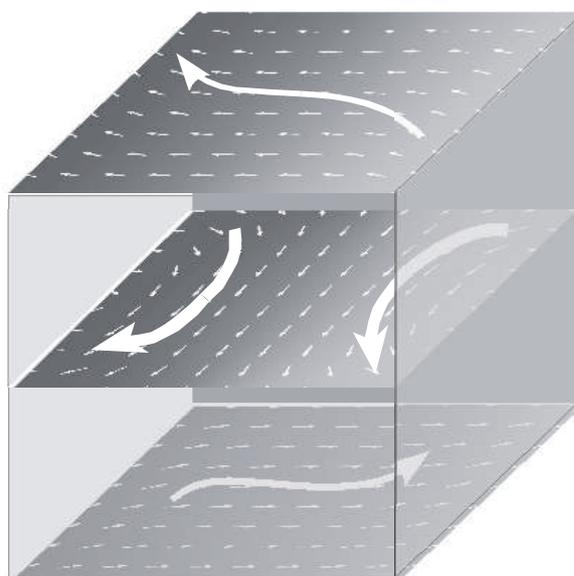


Figura 2.25: Estado não remanente (ENR) “Twist-II”.

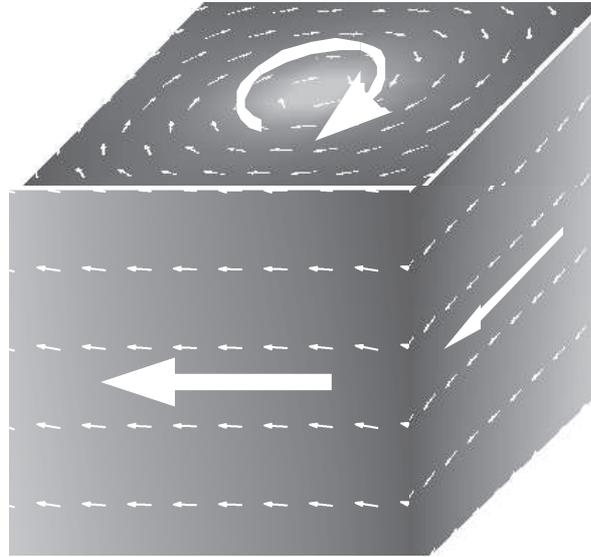


Figura 2.26: Estado não remanente (ENR) “Vortex”.

menor parcela de momentos magnéticos orientados na direção do eixo de anisotropia da partícula, Figura 2.26. A magnetização se apresenta em forma de vórtice não retendo carga magnética para eventual leitura de fuga de fluxo magnético. Inicialmente investigamos o impacto da mudança de geometria da partícula no comportamento de sua magnetização. A Figura 2.27 mostra o diagrama de fases para partículas FM sem a presença de um campo de interface estabilizante na sua face inferior. Neste diagrama de fases encontramos todas as fases descritas acima variando de uma para outra quando é variada a geometria da partícula. Neste diagrama mantivemos a base da partícula sempre quadrada de lado d e sua espessura valendo h . Tanto d como h variaram de 0 até 80 nm. Partículas magnética menos espessas, com até 15 nm, apresentam-se na fase “uniform” com todos os momentos magnéticos no plano $x - y$ e paralelos ao eixo fácil da partícula. É o que denominamos de ER. Não há espaço para grandes acomodações da magnetização, a espessura da partícula é praticamente o comprimento de troca do ferro, conseqüentemente o estado mais favorável energeticamente para a partícula é alinhar na direção do eixo de anisotropia.

Com espessuras variando entre 15 nm e 25 nm temos duas fases presentes. A fase “Twist-I” (EQR) presente em partículas de bases menores, de 0 até 25 nm, e a fase

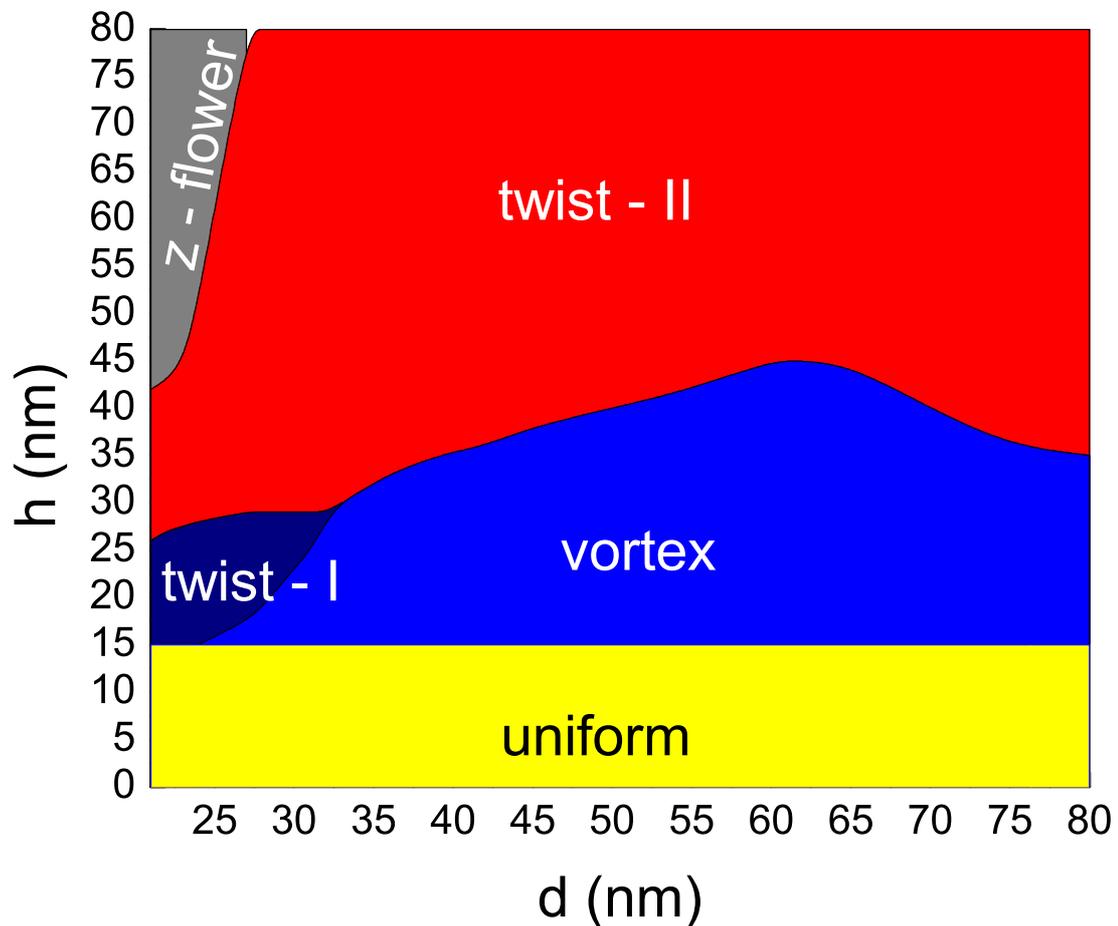


Figura 2.27: Diagrama de fases para campo de interface nulo.

“vortex” (ENR) presente nas partículas com bases com áreas maiores que 35 nm de lado. As partículas com lado d variando entre 25 e 35 nm apresentam uma região de fronteira entre as duas fases. Este comportamento é oriundo do aumento das dimensões das partículas onde a magnetização tem mais espaço para se acomodar. Espessuras acima de 30 nm apresentam ENR. Partículas de bases com lados menores que 30 nm e espessuras maiores que 40 nm encontram-se na fase “Z-flower”.

Partículas de bases com d maior que 30 nm temos o ENR “Twist-II”. Na ausência de campo de interface encontramos uma situação em que dominam os ENR para partículas

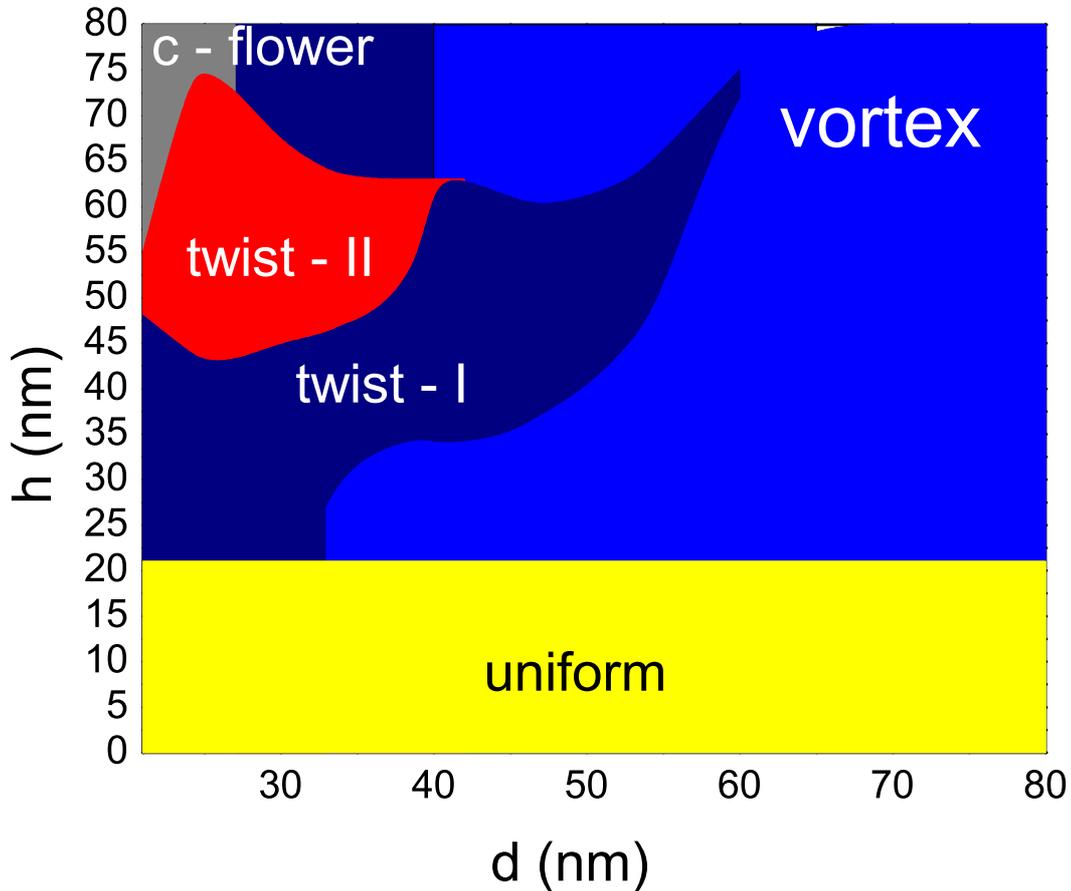


Figura 2.28: Diagrama de fases para campo de interface muito forte $H_J = 16.3$ kOe.

mais espessas de bases maiores onde predomina a fase “Twist-II” e só encontramos partículas no ER para partículas menos espessas.

Na presença de um forte campo de interface, $H_{INT} = 16.3$ kOe mesmo valor do campo de troca dos momentos magnéticos do ferro, encontramos algumas modificações no diagrama de fases. A fase “uniform” (ER) passa a existir para espessuras maiores até $h = 20$ nm. Este é um reflexo imediato da imposição do campo de interface nos momentos magnéticos da interface da partícula FM que tende a alinhar estes momentos na direção do eixo de anisotropia da partícula. A Fase “Twist-I” passa a ocupar duas faixas do

diagramas de fase, uma para partículas menos espessas (até $h = 45$ nm e lado $d = 35$ nm, aproximadamente) e outra para partículas com espessuras h entre 60 e 80 nm e lado d variando entre 30 e 40 nm. Entre estas duas faixas do diagramas de fase encontramos uma região onde devido à presença do campo de interface passou a existir a fase “Twist-II” que foi extremamente reduzida comparando os dois diagramas de fase. Ainda na presença do campo de interface observamos a troca da fase “Z-flower” pela fase “C-flower” para partículas de bases menores d até 25 nm e com espessura h variando entre 55 nm e 80 nm. Esta situação reflete bem a influência do campo de interface mesmo em partícula mais espessas na fase “C-flower” os momentos da interface formam uma estrutura semelhante a uma flor mas em sentido oposto ao apresentado na superfície o que demonstra que a magnetização procura um estado semelhante ao denominado na literatura de domínios magnéticos fechados (closure magnetic domains). Para partículas mais altas $h > 20$ nm e bases com lados maiores $d > 35$ nm temos o aparecimento do ENR “vortex”. Este efeito é resultado da influência do campo dipolar nas partículas que por serem grandes têm espaço para uma maior mobilidade da magnetização.

Capítulo 3

Histerese magnética em partículas nanométricas

3.1 Histerese magnética

Os materiais ferromagnéticos exibem uma complexa relação entre a magnetização \vec{B} e a intensidade de campo \vec{H} aplicado a estes materiais, Figura 3.1, além de depender do valor de \vec{H} , o valor de \vec{B} depende do modo pelo qual esse valor foi atingido. Isso tem como implicação uma relação não trivial entre \vec{B} e \vec{H} . À medida que o material ferromagnético é sujeito a um campo aplicado cada vez maior, a densidade do fluxo, \vec{B} , aumenta até o material alcançar a saturação (trecho ab na Figura 3.1). Observa-se que embora o campo aplicado \vec{H} seja nulo (no ponto c), a densidade de fluxo \vec{B} não é, ela tem valor igual a B_r). À medida que se diminui \vec{H} gradualmente, \vec{B} varia ao longo de bc (para um dado valor de \vec{H} , o valor de \vec{B} será maior, que no trecho ab, quando \vec{H} diminuir do que quando aumentar). Diz-se que \vec{B} se atrasa com relação à \vec{H} . Esta característica dos materiais ferromagnéticos é conhecida como histerese magnética (gr. tard. hystéresis, “falta”; “atraso”).

Para o laço de histerese mostrado na Figura 3.1 duas definições de grandezas muito importantes. A primeira é a Remanência (B_r) que é a densidade residual de fluxo, obtida para o campo aplicado nulo, obtida depois que o campo externo é removido, seu valor máximo é conhecido como retentividade. O valor de B_r pode ser tomado no laço de histerese na interseção do laço com o eixo da densidade de fluxo (ponto c na Figura 3.1).

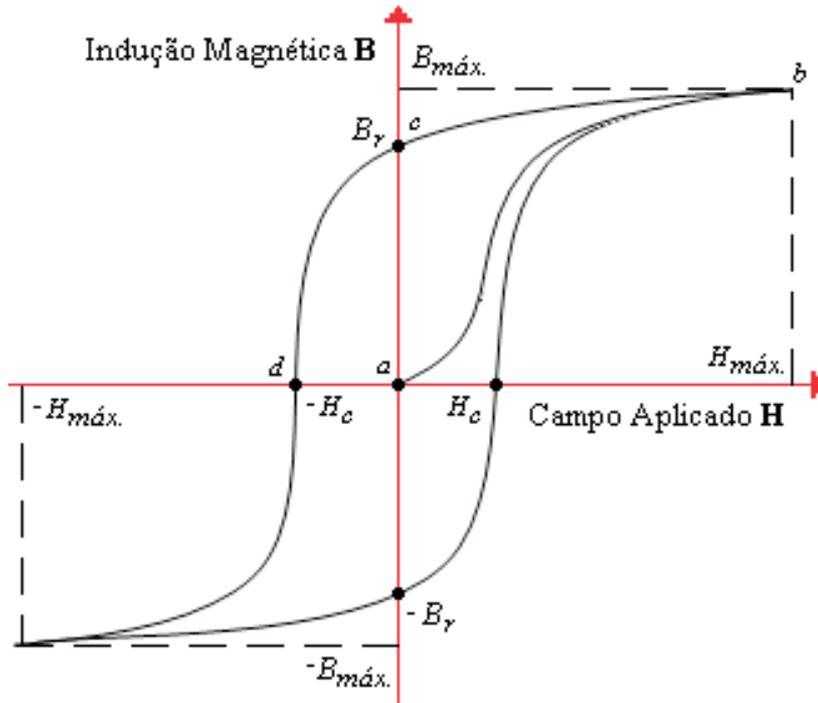


Figura 3.1: Curva de histerese idealizada de um material ferromagnético.

A intensidade do campo magnético aplicado necessária para reduzir a magnetização desse material a zero depois que o material atingiu a saturação é denominada de coercividade (H_c). Em outras palavras, o ciclo de histerese magnética mostra o quanto um material se magnetiza sob a influência de um campo magnético e o quanto de magnetização permanece nele na ausência de campo externo. Tratando de materiais FM, o *Fe*, por exemplo, se magnetiza com um campo externo de baixa intensidade, mantendo uma magnetização relativamente baixa depois desse processo. Ligas de samário e cobalto (*Sm - Co*), por exemplo, precisam de campos muito intensos para atingirem a saturação da magnetização, entretanto, retêm muita magnetização quando o campo é removido.

Materiais que apresentam alto valor de B_r (materiais retentivos) são empregados na confecção de ímãs permanentes. Estas estruturas são usadas para criar um campo magnético estável em uma determinada região do espaço. Existem muitas aplicações tecnológicas que usam esses dispositivos como, por exemplo, motores e geradores eletromagnéticos, dispositivos acústicos como alto-falantes e equipamentos médicos como sis-

temas de ressonância magnética nuclear, marca-passos etc.

Os materiais magnéticos destinados às máquinas elétricas AC geralmente são submetidos a fluxos variáveis e por isto devem ter área pequena no ciclo de histerese a fim de reduzir as perdas de histerese. São utilizados, portanto, nestes casos, os materiais magneticamente moles (macios) os quais apresentam baixa força coerciva (valor de H para o qual B é zero). O valor do campo coercivo de um material ferromagnético, H_c , pode ser determinado através da análise gráfica simples do laço da histerese. A coercividade de um material magnético é determinada pela medida de H_c na curva de histerese como ilustrado na Figura 3.1. Portanto, quanto mais largo e mais alto for o ciclo de histerese, maior será a dificuldade do material se desmagnetizar (alta coercividade) e maior será a magnetização que ele retém (alta remanência), depois de ser submetido a um campo magnético externo.

Na próxima seção, 3.2, apresentamos alguns resultados experimentais relacionados ao fenômeno de “exchange bias” e a um outro fato experimental interessante que é uma assimetria na histerese magnética de sistemas FM/AFM.

3.2 Resultados experimentais

Um outro fenômeno, bastante importante devido à sua aplicabilidade tecnológica é o “Exchange Bias” (EB). Inicialmente ele foi usado para estabilizar a magnetização de camadas ferromagnéticas moles em cabeças de leitura baseadas no efeito de magnetoresistência anisotrópica. Atualmente materiais que apresentam o fenômeno de “Exchange bias” são empregados em cabeças de leitura baseadas em válvulas de spin e circuitos de memória MRAM que utilizam o efeito de MRG. Também têm sido usado nas mídias de discos rígidos mais avançados, onde o substrato AFM aumente a estabilidade de partículas magnéticas pequenas cujo comportamento seria superparamagnético.

Desde a descoberta do fenômeno de EB, por Meiklejohn e Bean⁸⁶ em 1956, muitos esforços têm sido feitos para desenvolver uma compreensão completa deste fenômeno. Este fenômeno ocorre em sistemas onde um material ferromagnético (FM) está em contato

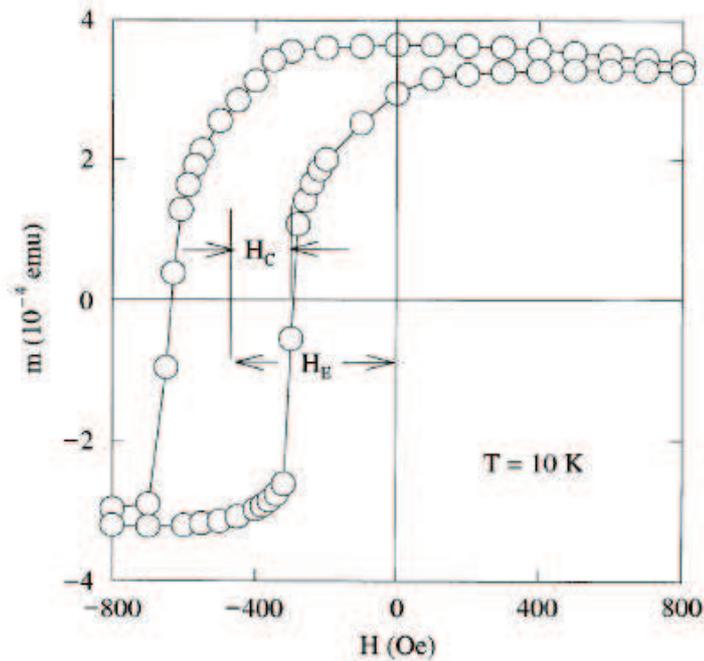


Figura 3.2: Curva de histerese com EB.

com um substrato antiferromagnético (AFM). Quando uma amostra com uma interface FM/AFM é resfriada abaixo da temperatura de Néel (T_N) na presença de um campo magnético externo estático, o centro do laço da magnetização do FM ($M \times H$) é deslocado da origem do campo aplicado, $H = 0$ (ver Figura 3.2), o valor deste deslocamento é denominado como Campo de EB (H_{EB}).

J. Nogués e Ivan K. Schuller⁸⁷ propuseram uma explicação qualitativa supondo uma interação de troca na interface FM/AFM. Quando um campo é aplicado na escala de temperatura $T_N < T < T_C$, os momentos do FM ficam alinhados com o campo aplicado, enquanto que os do AFM permanecem desalinhados, Figura 3.3.(a)(i). Ao resfriar o material a uma temperatura $T < T_N$, em presença de campo, devido à interação na interface, os momentos do AFM da interface FM/AFM alinham-se ferromagneticamente aos do FM (assumindo a interação ferromagnética). Os outros planos do AFM seguem a ordem do AFM para produzir a magnetização líquida zero (3.3.(a)(ii)). Quando o campo externo é gradualmente invertido, os momentos magnéticos do FM começam a

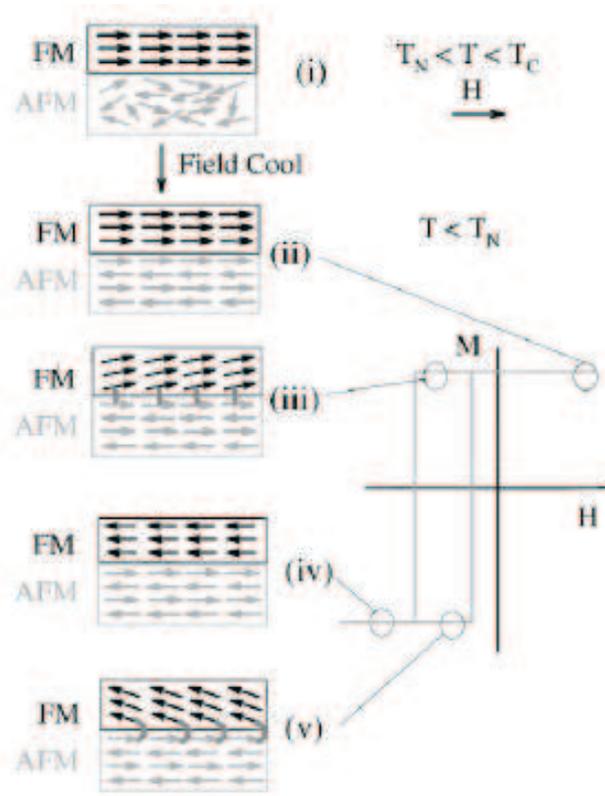


Figura 3.3: Diagrama esquemático da configuração dos momentos magnéticos da bicamada FM/AFM. (a) Diferentes estágios das configurações dos momentos magnéticos de um laço de histerese com “exchange biased” (b).

girar procurando um alinhamento com esse campo, entretanto devido à interação de troca na interface FM/AFM os momentos da interface do AFM acoplados com os momentos magnéticos do FM faz com que eles permaneçam em suas posições sem girar. Então o campo externo necessário para girar todos os momentos do FM torna-se maior, dando origem ao deslocamento (bias) no ciclo de histerese do FM.

Kai Liu et. al.⁶³, fabricaram bicamadas de FeF_2/Fe usando uma técnica nanolitográfica, onde investigaram como o EB em nanoestruturas AF/FM fornece uma fonte adicional, ajustável de anisotropia para estabilizar a magnetização, conseqüentemente causando uma possível redução da escala do comprimento que determina o limite superparamagnético na gravação magnética.

Os laços da histerese magnética exibem uma assimetria que desaparece na T_N do

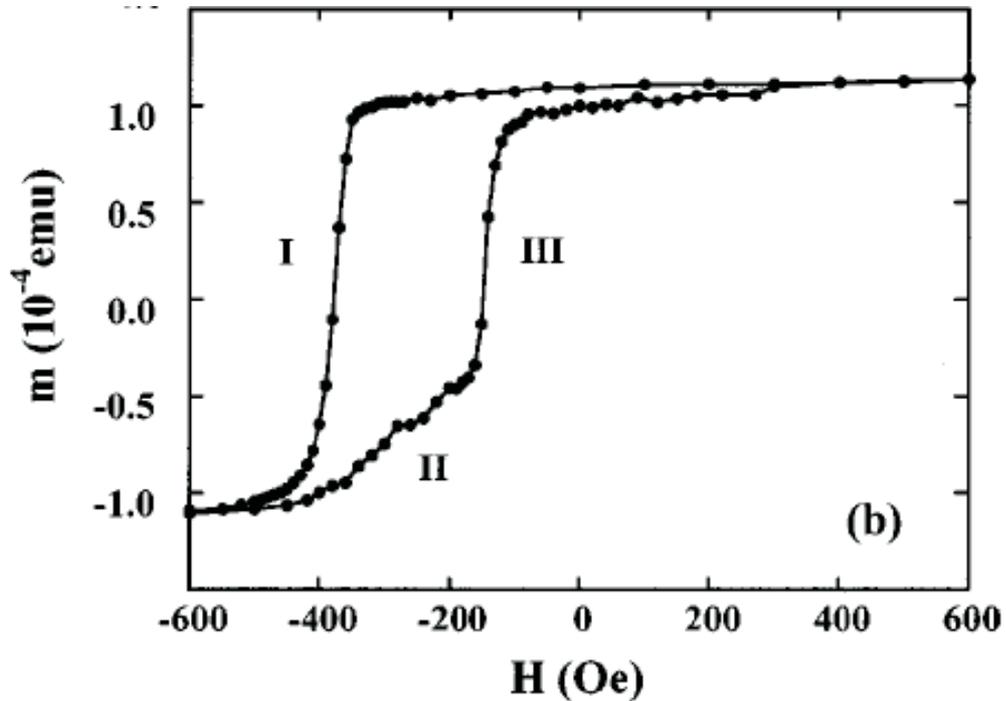


Figura 3.4: Laço de histerese para FeF_2 200Å/networked – $Fe(150Å)/Al(40Å)$ a 10K, apresentando “exchange bias” e assimetria no ramo de subida do laço.

FeF_2/Fe . Essa assimetria existe devido a um processo da rotação da magnetização no ramo de subida do laço de histerese como mostra a Figura 3.4.

O salto da magnetização da saturação positiva para a negativa é excessivamente abrupto (trecho I). No retorno, a reversão da magnetização primeiramente muda gradualmente até aproximadamente 2160 Oe (trecho II), ponto em que rapidamente muda para saturação positiva da saturação (trecho III). No trecho da saturação positiva para negativa um salto bastante abrupto na magnetização é observado, entretanto, no ramo da histerese onde o campo é crescente há um aumento gradual na magnetização, seguido de um salto para a saturação positiva. Esse comportamento reflete em uma assimetria no laço de histerese resultante dos momentos das células aprisionados na região de interface, onde o campo de interface tem uma maior influência. Na parte curvada da histerese os momentos magnéticos próximos à superfície da partícula estão alinhados com o campo externo (negativo), enquanto que na região de interface (positivo) o resultado desta competição

resulta na assimetria na histerese .

No âmbito da gravação magnética, densidades de armazenamento de dados da ordem de $Tbit/in^2$ requerem partículas cada vez menores e uma periodicidade da disposição dessas partículas magnéticas da ordem de dezenas de nanômetros. Como já citamos anteriormente, nesta escala de tamanhos, essas partículas tornam-se superparamagnéticas à temperatura ambiente . Nesta escala das dimensões há duas propriedades físicas que merecem a atenção, por um lado a estabilidade térmica está na vizinhança do limite superparamagnético e por outro lado, os estados magnéticos de partículas finas deste tamanho são dominados mais fortemente pelo campo dipolar. Em consequência disso, se espera uma variação grande do “Exchange bias” e da coercividade para mudanças pequenas nas dimensões da partícula. Um campo da interface pode ter um papel especial pois pode afetar a acomodação da estrutura magnética da partícula. Na seção 3.3, discutiremos que em partículas magnéticas finas a fonte do campo magnetostático é a carga magnética de volume e ela favorece a magnetização.

3.3 Resultados para partículas finas de Fe

A análise da histerese de nanopartículas magnéticas em uma temperatura baixa e bem definida é um fator interessante a ser estudado. Inicialmente, consideramos uma única partícula de *Fe* com uma base quadrada de lado d e altura h , variando na escala de algumas dezenas de nanômetros, sobre um substrato AFM . Os momentos magnéticos do substrato AFM estão congelados no estado antiferromagnético , e o acoplamento de troca dos momentos magnéticos da interface da partícula FM com os momentos do substrato AF é representado por um campo efetivo que age somente nos momentos da interface da partícula (ver Figura 3.5).

Nós descrevemos uma partícula ferromagnética por um procedimento de discretização em cubos (células)⁶⁸ . Essa discretização representa a partícula ferromagnética por uma disposição simples de células interagentes, onde magnetização dentro de cada célula, com lado d , é constante, mas pode variar de direção entre células vizinhas.

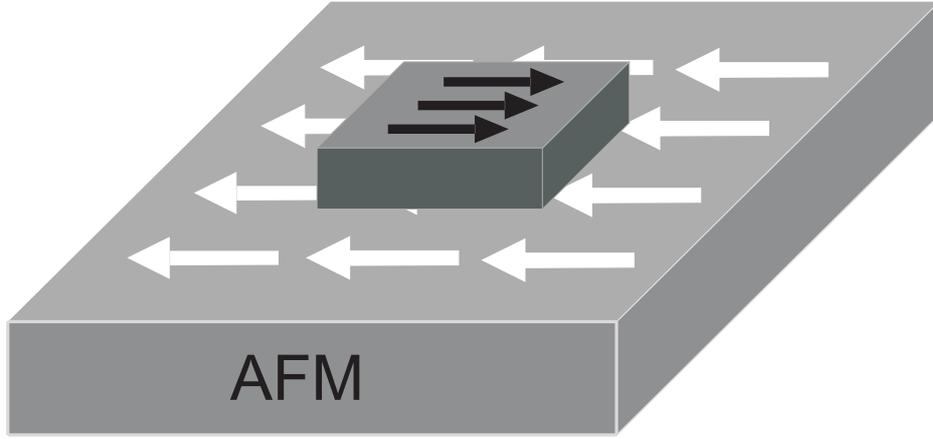


Figura 3.5: Representação esquemática de uma partícula ferromagnética em um substrato antiferromagnético (FM/AFM).

A densidade da energia pode ser escrita como uma soma das energias de troca, do acoplamento da interface, de anisotropia, Zeeman e dipolar:

$$\begin{aligned}
 E = & \frac{A}{d^2} \sum_j \sum_k (1 - \hat{m}_j \cdot \hat{m}_k) - M_S \vec{H}_{INT} \cdot \sum_i \hat{m}_i - \\
 & M_S \vec{H} \cdot \sum_j \hat{m}_j - K \sum_j (m_j^x)^2 + \\
 & \frac{M_S^2}{2} \sum_j \sum_k \left(\frac{\hat{m}_j \cdot \hat{m}_k}{n_{jk}^3} - \frac{3(\hat{m}_j \cdot \hat{n}_{jk})(\hat{m}_k \cdot \hat{n}_{jk})}{n_{jk}^5} \right)
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde o primeiro termo é o termo de troca e a segunda soma se estende sobre os vizinhos mais próximos da célula j . O segundo termo é o acoplamento da troca da interface, e a soma existe, somente, sobre o primeiro plano da partícula FM. O terceiro termo é a energia Zeeman e o quarto a energia de anisotropia do FM e o último termo é a energia magnetostática. M_S é a magnetização de saturação, \hat{m}_{ij} é a direção da magnetização e \hat{n}_{ij} , no último termo, é a distância entre as células i e j em unidades do tamanho de um dos lados da célula (d), $d = 3$ nm para o *Fe*, menor do que o seu comprimento de troca $l_{EX} \approx 10$ nm⁷⁵. Em todas as simulações executadas neste capítulo estaremos utilizando células com este tamanho, $d = 3$ nm, embora qualquer célula com lado menor que o

comprimento de troca seja confiável, conforme simulações mostradas na Figura 2.10 do capítulo 2, seção 2.1.

Nesse sistema, partícula FM sobre um substrato AFM, efeitos de tamanho são incorporados tendo em vista que os momentos magnéticos nas células das extremidades têm sua energia de troca reduzida pela ausência de vizinhos, e pelo aparecimento de cargas magnéticas de volume ρ e superficial σ nas faces dessa partícula, como mostram as figuras 3.16 e 3.17, que contribuem para o efeito dipolar. A mudança na geometria da partícula altera as disposições dessas cargas magnéticas, ρ e σ . Escolhemos o ferro (Fe) como o material FM que constitui as partículas. Nas simulações usamos os parâmetros: parâmetro de troca $A = 2.5 \times 10^{11} J/m$, constante de anisotropia $K = 4.2 \times 10^4 J/m^3$ magnetização de saturação $M_S = 1.7 \times 10^6 A/m$.^{76,88}

Como ferramenta de simulação computacional usamos um algoritmo auto consistente de campo local que permite calcular a orientação dos momentos magnéticos de cada célula.⁷⁷⁻⁸⁴ A configuração de equilíbrio é a direção \hat{m}_i que minimiza a energia magnética da partícula. No equilíbrio o torque sobre cada momento magnético, em cada célula, é zero ($\vec{m}_i \times \vec{H}_{eff}^i = 0$), onde o campo efetivo é dado por $\vec{H}_{eff} = -(1/M_S)(\partial E/\partial \vec{m}_i)$.

Efeitos dipolares em estruturas nanomagnéticas são fortemente relevantes. Ele pode ser discutido em termos das cargas de superfície ($\sigma = \vec{M} \cdot \hat{n}$) e de volume ($\rho = -\nabla \cdot \vec{M}$). Em filmes finos a configuração ‘curling’ é esperada, enquanto que para filmes espessos domínios magnéticos fechados (closure magnetic domains) são formados⁸⁹. Em ambos os casos a carga magnética de volume é muito importante. A competição entre essas duas fontes de carga magnética pode determinar o perfil magnético das partículas nessa escala de tamanhos. Dependendo da disposição da geometria da partícula propriedades magnéticas fundamentais, como remanência e coercividade, podem ser fortemente afetadas. Entender o mecanismo pelo qual essas propriedades mudam alterando a geometria das partículas é a idéia inicial que vamos tratar.

Nosso estudo sobre a histerese magnética de partículas FM tratará de uma partícula magnética com bases de geometrias quadrada ($d \times d$) e também retangular (uma dessas dimensões mais alongada), tendo como parâmetro principal de influência sobre a his-

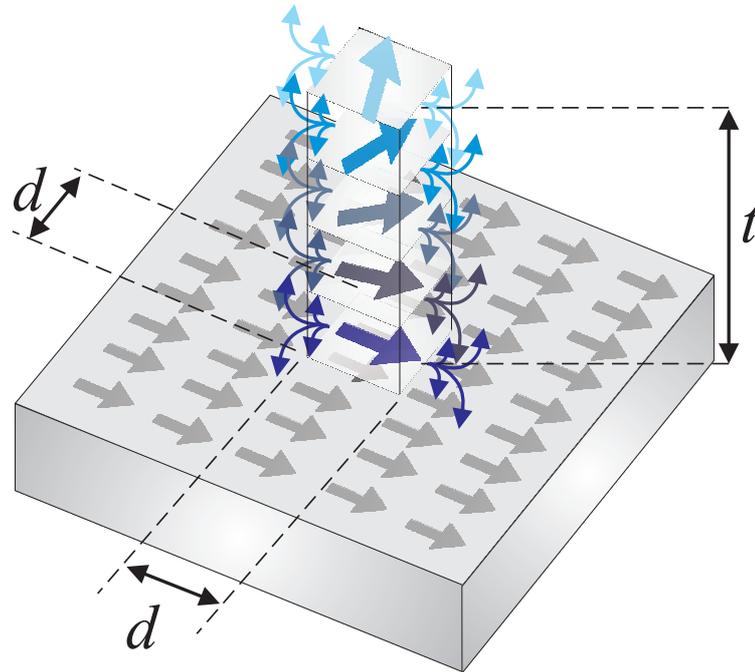


Figura 3.6: Variação da altura t de uma partícula ferromagnética fina quadrada de lado d disposta sobre um substrato antiferromagnético (FM/AFM). A interação entre os materiais (FM/AFM) existe nos momentos magnéticos da interface do FM.

terese magnética da partícula sua espessura t , como mostra a Figura 3.6. A variação da espessura da partícula proporciona mudanças importantes na histerese, perfis e cargas de magnetização.

Na seção 3.3.1, vamos apresentar os resultados obtidos para as propriedades magnéticas para EB de partículas FM finas com valores de espessuras t de $d = 12$ nm e $d = 15$ nm e base de geometria quadrada $d \times d$, sobre um substrato AF, como mostra a Figura 3.6. Na seção 3.3.3, vamos discutir sobre a coercividade destas partículas e como as densidades de carga magnética influenciam a coercividade em partículas magnéticas mais finas.

3.3.1 “Exchange Bias” (EB)

Como citamos na seção 3.2, um fenômeno bastante importante devido a sua aplicabilidade tecnológica é o “Exchange Bias” (EB). Sua aparição em aplicações FM/AFM para estabilizar a magnetização de materiais FM é recorrente⁶³. O desvio provocado no ciclo

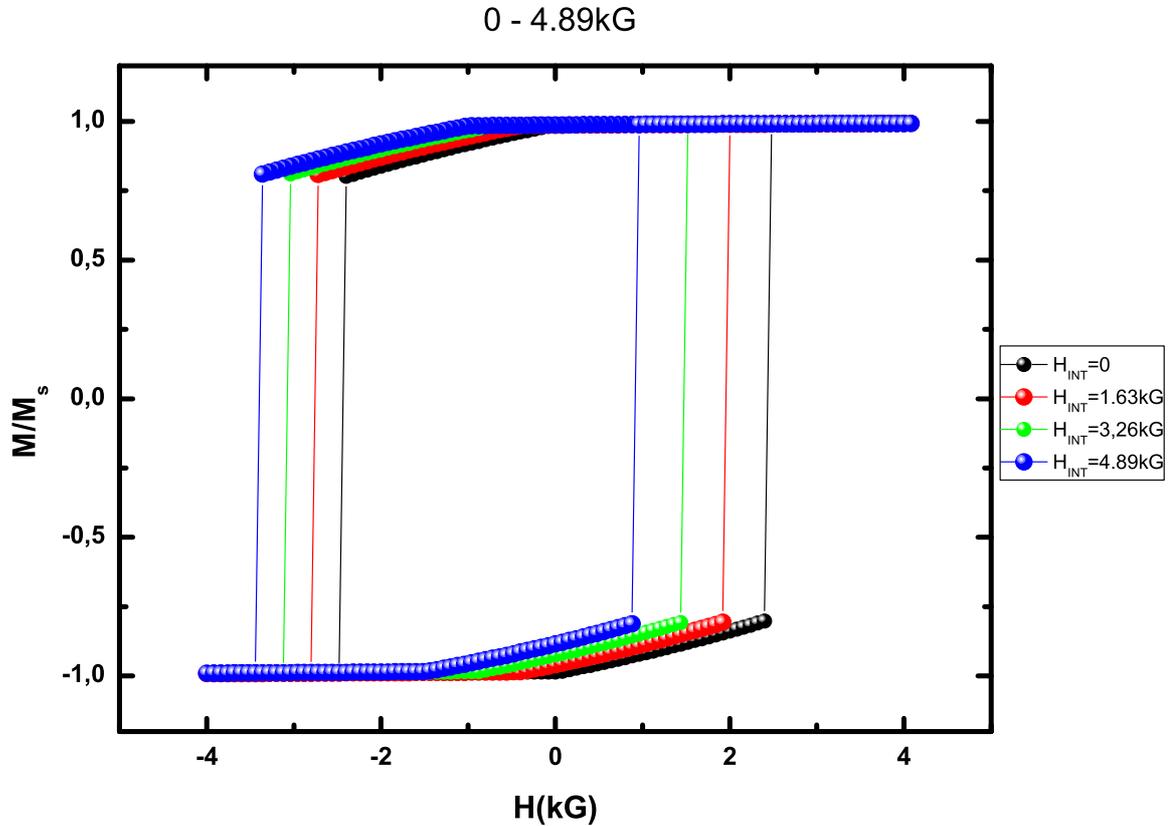


Figura 3.7: Laços de Histerese para partículas com dimensões de $21\text{ nm} \times 21\text{ nm} \times 12\text{ nm}$. Os valores do campo de interface estão indicados na escala ao lado, variando no intervalo de $0 - 4,89\text{ kG}$.

de histerese de um FM ocasiona variações em propriedades importantes desse material, como por exemplo, remanência relacionada à magnetização retida no material quando o campo externo é retirado e coercividade relacionada com a dureza magnética do material empregado na partícula magnética.

Nos laços de histerese magnética, mostrados nas Figuras 3.7 e 3.8, exibimos o desvio (bias) causado pela interação de troca para partículas magnéticas finas, de base quadrada, com dimensões de $21\text{ nm} \times 21\text{ nm}$.

Na Figura 3.7, observamos que para a espessura de $t = 12\text{ nm}$ a histerese é desviada (exchange bias), para a esquerda, sem apresentar comportamento assimétrico, para cam-

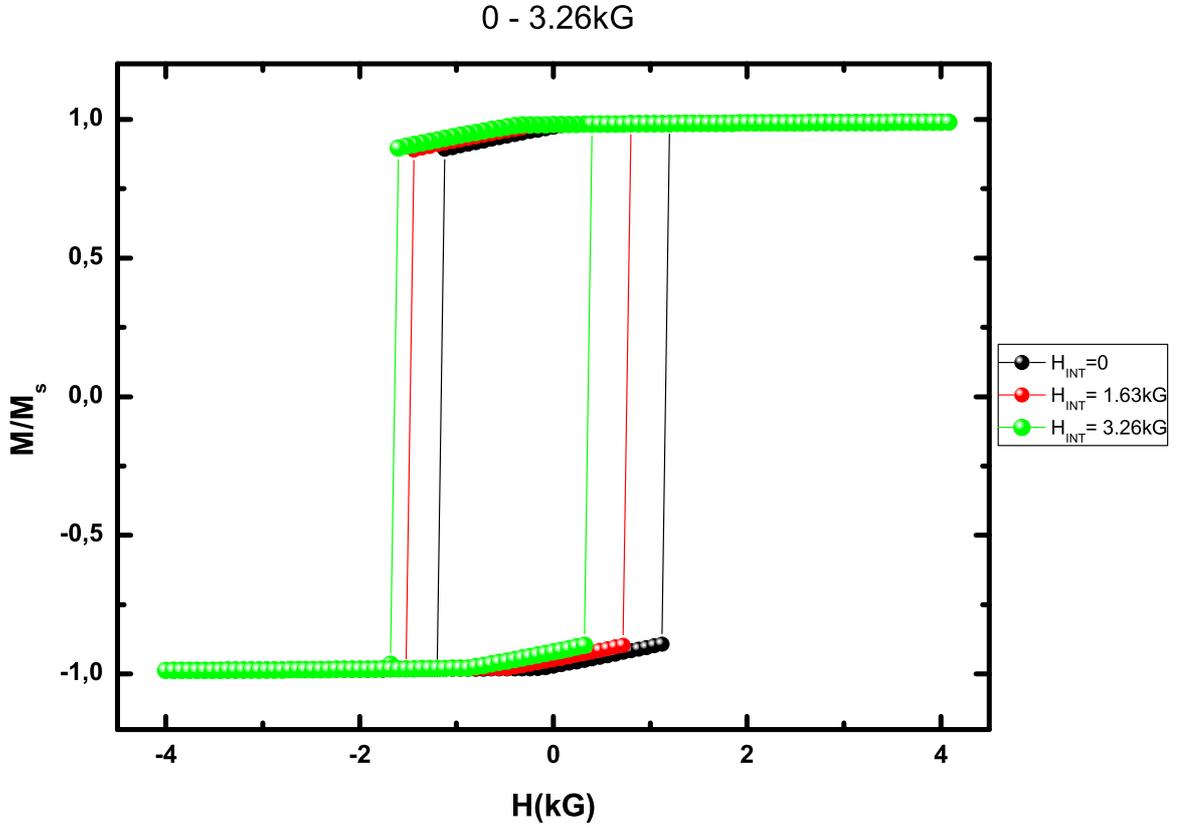


Figura 3.8: Laços de Histerese para partículas com dimensões de $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 15 \text{ nm}$. Os valores do campo de interface estão indicados na escala ao lado, variando no intervalo de $0 - 3.26 \text{ kG}$.

pos de interface variando no intervalo de $0 - 4.98 \text{ kG}$. Os valores de campo de interface (H_{INT}) apresentados são múltiplos do valor do campo de troca entre células vizinhas (H_{Troca}). O desvio na histerese magnética acontece em intervalos sucessivos de 0.4 kG aproximadamente, partindo da origem. O laço onde não há campo de interface ($H_{INT} = 0$) não há desvio na histerese magnética (laço de histerese preto na Figura 3.7). Esses valores para o campo de EB são: $H_{EB} = 0.40 \text{ kG}$ para $H_{INT} = 1.63 \text{ kG}$ (laço de histerese vermelho), $H_{EB} = 0.84 \text{ kG}$ para $H_{INT} = 3.26 \text{ kG}$ (laço de histerese verde) e $H_{EB} = 1.24 \text{ kG}$ para $H_{INT} = 4.89 \text{ kG}$ (laço de histerese azul).

Esse fato também foi observado por nós em partículas FM finas com base de geometria

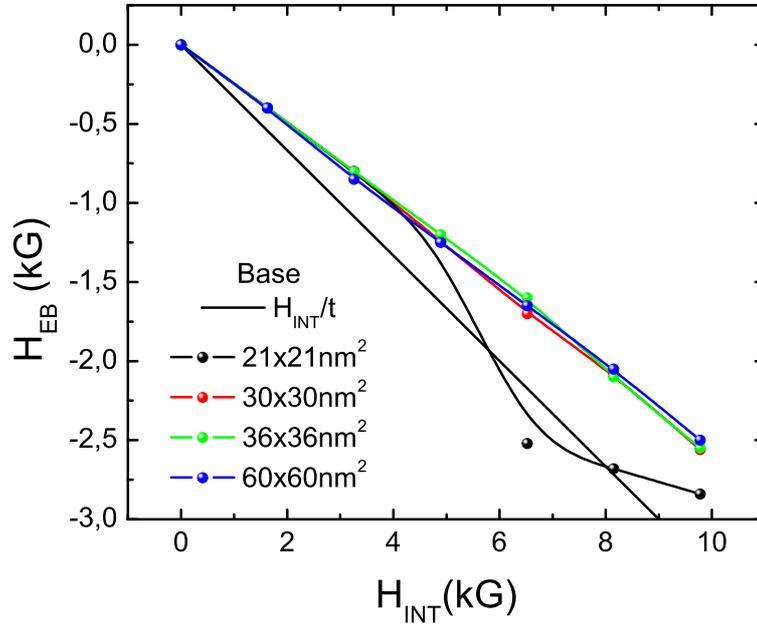


Figura 3.9: Dependência de H_{EB} vs. H_{INT} para partículas com dimensões de $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 15 \text{ nm}$. Os valores do campo de interface estão indicados na escala ao lado, variando no intervalo de $0 - 3.26 \text{ kG}$.

quadrada $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm}$ e espessura de $t = 15 \text{ nm}$, como mostra a Figura 3.8, entretanto, ele acontece em um intervalo de campo de interface menor de $0 - 3.26 \text{ kG}$ e os intervalos entre os campos de EB também são menores, $H_{EB} = 0.37 \text{ kG}$ para $H_{INT} = 1.63 \text{ kG}$ (laço de histerese vermelho) e $H_{EB} = 0.27 \text{ kG}$ para $H_{INT} = 3.26 \text{ kG}$ (laço de histerese verde). Esta redução se deve ao efeito da competição entre as cargas magnéticas de volume ρ_M e superfície σ_M ser mais intensa para esta espessura ($t = 15 \text{ nm}$).

Na Figura 3.9, apresentamos o comportamento do campo de EB para partículas FM com bases quadradas com as seguintes áreas: $21 \times 21 \text{ nm}$ (curva preta), $30 \times 30 \text{ nm}$ (curva vermelha), $36 \times 36 \text{ nm}$ (curva verde) e $60 \times 60 \text{ nm}$ (curva azul). A linha contínua, sem pontos, representa o valor do campo de EB variando com o campo de interface dividido pela espessura da partícula, $H_{EB} = H_{INT}/t_{FM}$, colocada no gráfico para efeito de comparação com os resultados obtidos para partículas FM finas. Conforme a aproximação

fenomenológica de Meiklejohn e Bean⁸⁶⁸⁷ uma expressão para o campo de EB é dada por $\mu_0 H_{EB} = JS_{AFM}S_{FM}/M_{FM}t_{FM}$ descrevendo a dependência do campo de EB com um acoplamento de interface, J, entre o FM e o AFM, onde t_{FM} e M_{FM} são a espessura e a magnetização de saturação da camada FM.

No nosso caso, estamos considerando tudo isso em um campo de interface H_{INT} . O resultado apresentado mostra que o campo de EB tem aproximadamente o mesmo comportamento apresentado para $H_{EB} = H_{INT}/t_{FM}$, embora de menor intensidade, para as partículas FM áreas de 30×30 nm, 36×36 nm e 60×60 nm, sendo modificado apenas na partícula de áreas 21×21 nm para campos de interface maiores que 4 kG.

3.3.2 Assimetria na histerese magnética

Nos gráficos representados nas Figuras 3.10 e 3.11, apresentamos laços de histerese magnética para partículas com espessura de $h = 12$ nm para campos de interface acima de 4.98 kG, $H_{INT} = 6.52$ kG e $H_{INT} = 9.78$ kG respectivamente. Observamos uma assimetria na histerese magnética, no ramo de subida, fato semelhante ao observado por Kai Liu et. al.⁶³, em bicamadas de FeF_2/Fe . Nas nossas partículas, como nas bicamadas de Liu, a assimetria é observada, no ramo da histerese onde o campo é crescente pelo aprisionamento dos momentos das células na região de interface, onde o campo de interface tem uma maior influência. Logo, nas partes encurvadas da histerese, os momentos magnéticos próximos à superfície da partícula estão alinhados com o campo externo, enquanto que na região de interface eles estão alinhados com o eixo fácil da partícula forçado pelo campo de interface.

Nas Figuras 3.12 e 3.13 são apresentados laços de histerese magnética para partículas com espessura de $h = 15$ nm para campos de interface acima de 3.26 kG, também $H_{INT} = 6.52$ kG e $H_{INT} = 9.78$ kG respectivamente. Notamos claramente que os efeitos sobre as formas dos laços de histerese são mais acentuados. Os dois ramos de histerese passam a sofrer mudanças em relação às formas anteriormente encontradas onde a espessura e os valores de H_{INT} eram menores. Nesse caso, a competição entre o campo de interface e o campo dipolar oriundo das cargas de superfície da partícula é mais intensa. O resultado

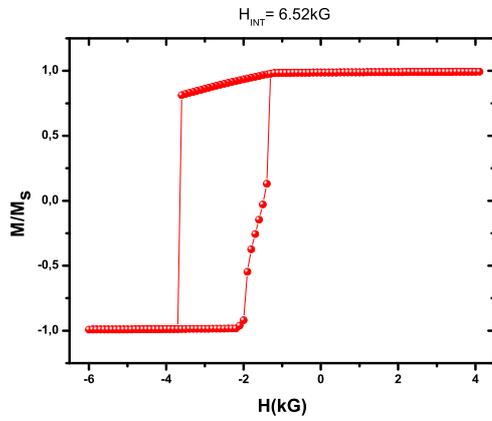


Figura 3.10: Laço de Histerese para partículas com dimensões de $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 12 \text{ nm}$ com campo de interface igual a 6.52 kG.

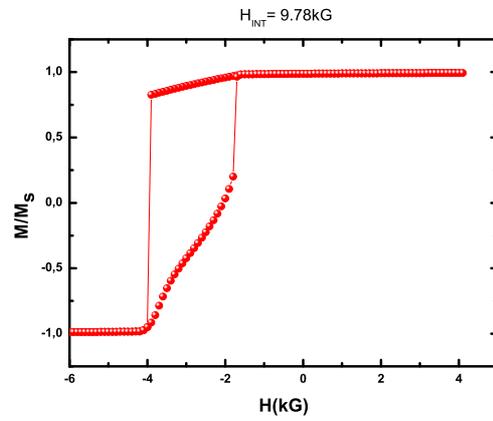


Figura 3.11: Laço de Histerese para partículas com dimensões de $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 12 \text{ nm}$ com campo de interface igual a 9.78 kG.

desta competição é a assimetria da histerese magnética.

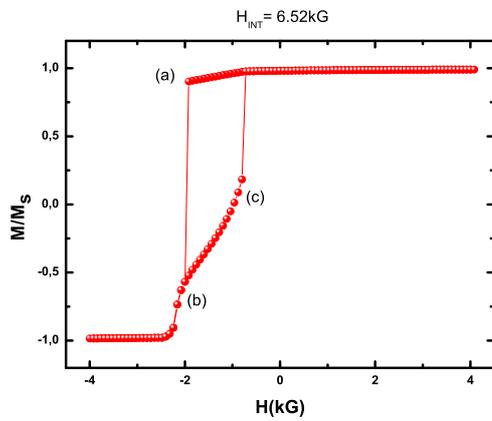


Figura 3.12: Laço de Histerese para partículas com dimensões de $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 15 \text{ nm}$ com campo de interface igual a 6.52 kG.

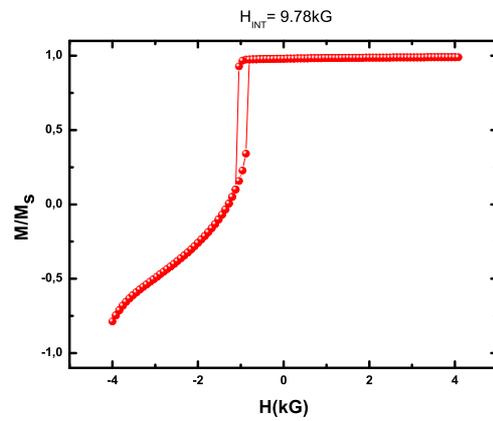


Figura 3.13: Laço de Histerese para partículas com dimensões de $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 15 \text{ nm}$ com campo de interface igual a 9.78 kG.

No caso das partículas FM finas, com espessura $t = 12 \text{ nm}$, o efeito de assimetria na histerese magnética é menor, pois, neste caso, além do campo de interface alinhar os momentos magnéticos do plano de interface FM/AFM e por consequência da energia de troca, esses forçam os momentos superiores na direção do eixo fácil da partícula FM, existe ainda uma contribuição do campo dipolar oriundo das cargas magnéticas de volume,

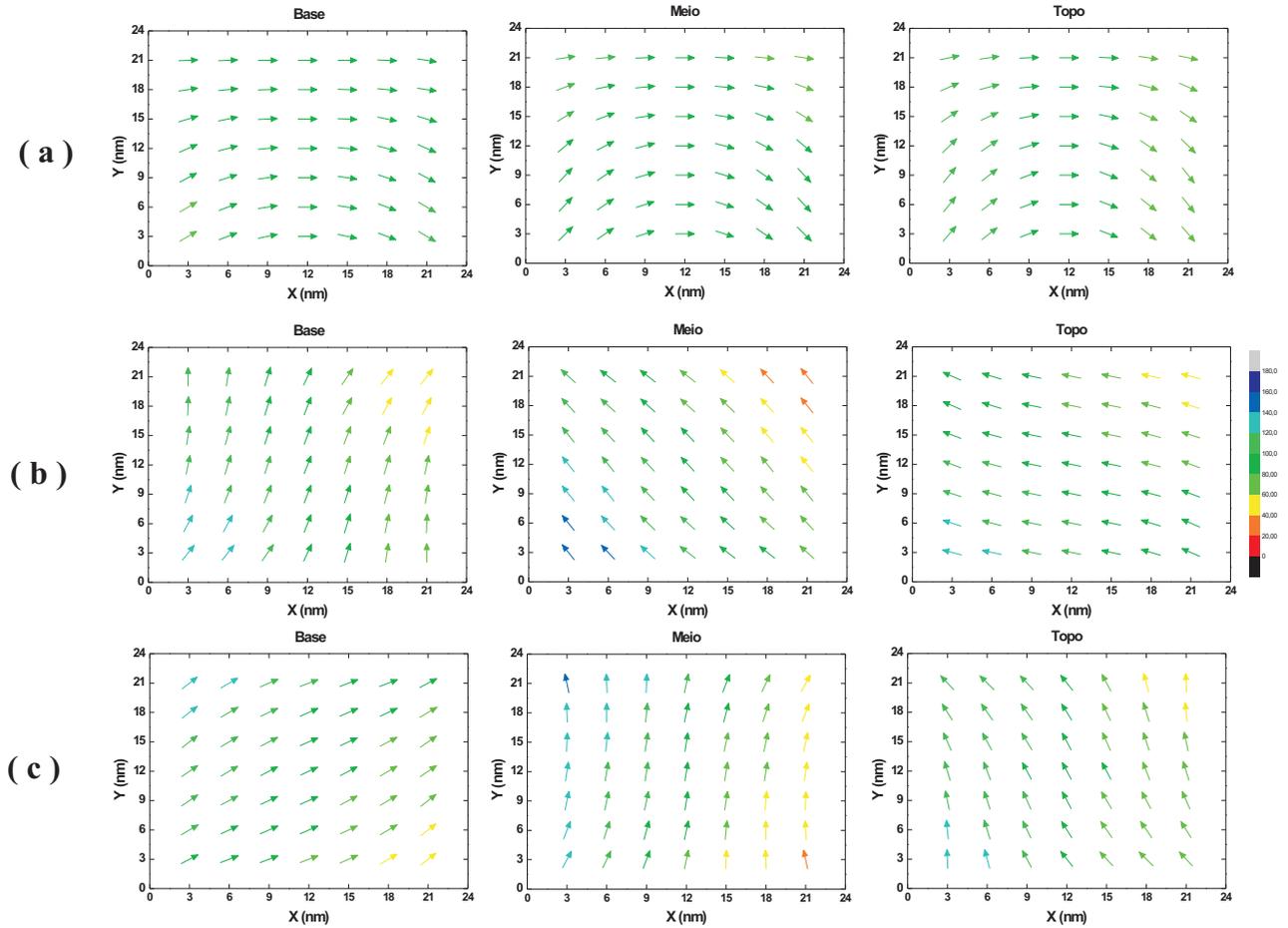


Figura 3.14: Mapas para os momentos magnéticos calculados nos pontos a, b e c selecionados na histerese da partícula $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 15 \text{ nm}$, submetida a um campo de interface de 6.52 kG .

ρ_M , que para esta espessura, na região interna (central da partícula) está alinhado com o campo de interface.

A Figura 3.14 mostra as configurações dos momentos magnéticos da partículas com dimensões $21 \text{ nm} \times 15 \text{ nm}$ dos pontos selecionados (a, b e c) na histerese magnética da Figura 3.12. Nós observamos que o fato da partícula FM ser fina, de certa maneira, impõe que a magnetização fique orientada, aproximadamente, nos planos paralelos aos plano de interface.

Na situação (a), no trecho de campo magnético externo decrescente, o padrão dos perfis de magnetização, na base, no meio e o topo da partícula são os mesmos, mesmo para um

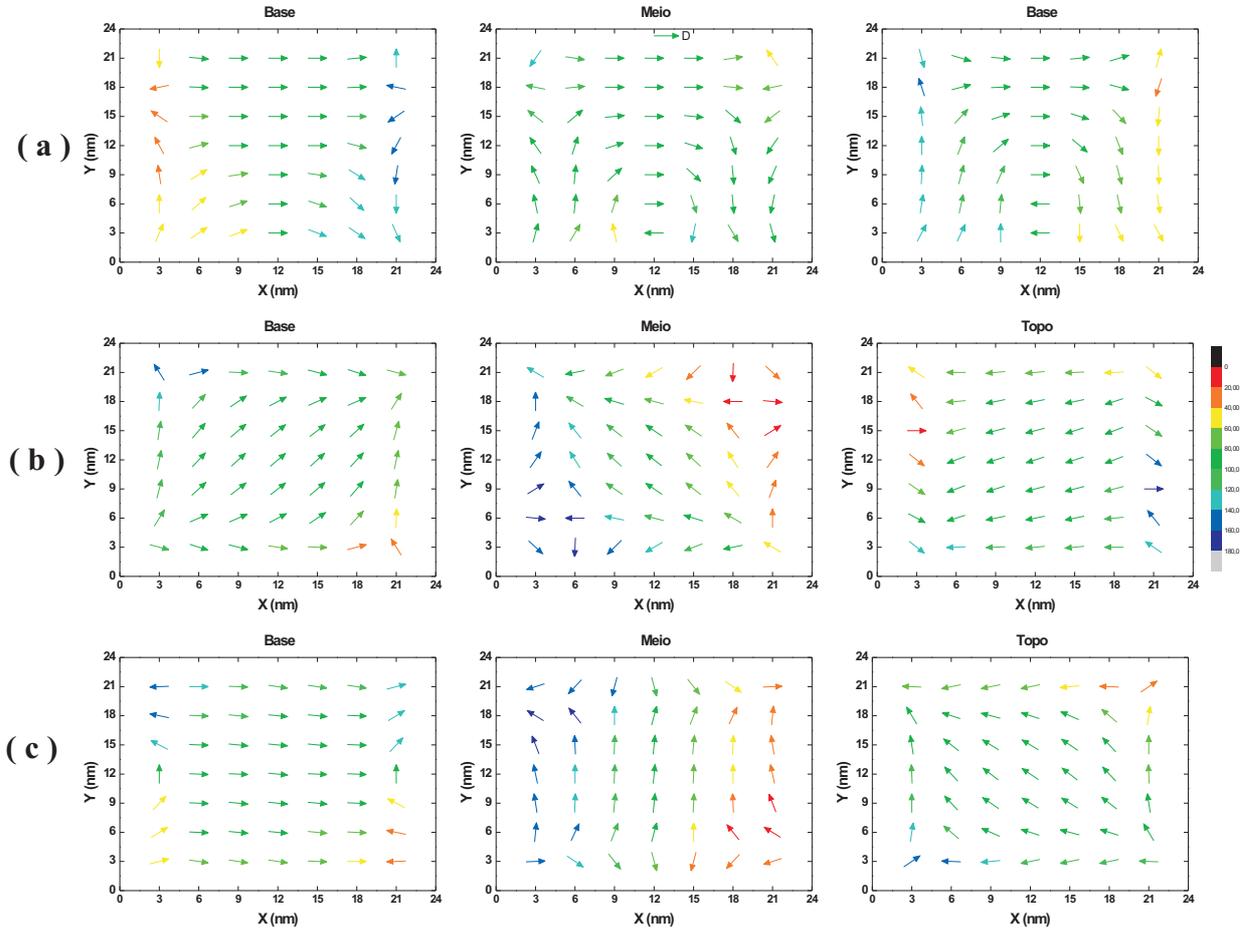


Figura 3.15: Mapas para o campo de dipolar calculados nos pontos a, b e c selecionados na histerese magnética da partícula $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 15 \text{ nm}$, em um campo de interface de 6.52 kG .

campo externo negativo, $H_{EXT} = -1.92 \text{ kG}$. Na situação (b) temos um campo externo, $H_{EXT} = -1.84 \text{ kG}$ os perfis de magnetização apresentam os momentos magnéticos do topo da partícula alinhados com o campo externo e os da interface praticamente formando um ângulo de $\pi/2$ com eles. Este comportamento é fruto da competição entre os campos de interface e dipolar considerando que o campo externo está retornando da saturação negativa. Para a situação (c) da Figura 3.14 temos mais uma situação de competição entre os campos dipolar e de interface para campos externos negativos, entretanto o efeito do campo de interface já é mais pronunciado nos momentos magnéticos da interface da partícula.

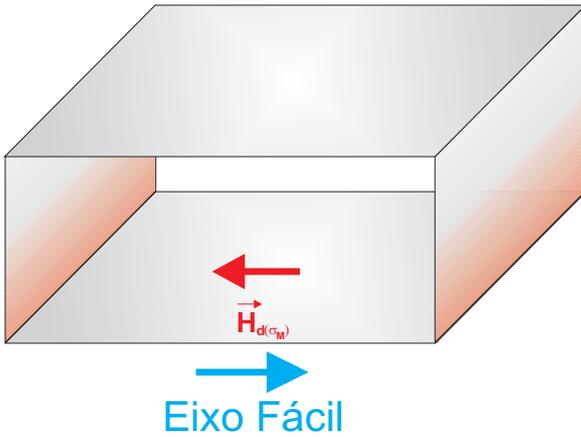


Figura 3.16: Campo dipolar dependendo apenas da carga magnética superficial σ .

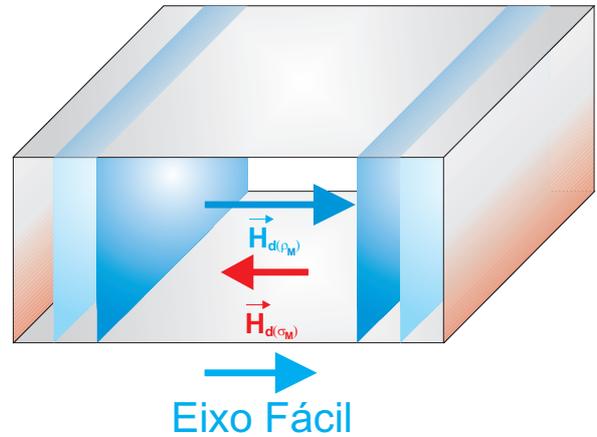


Figura 3.17: Campo dipolar dependendo da carga magnética superficial σ e volumétrica ρ .

Uma correlação desses estados magnéticos com o campo dipolar é mostrada na Figura 3.15, onde este campo apresenta orientação semelhante aos perfis da magnetização mostrados na Figura 3.14. É importante observar que, para essa espessura $t = 15$ nm, o campo dipolar tem a mesma orientação do eixo fácil do FM e dos momentos da interface FM/AFM do AFM. Este fato leva a um comportamento contrário do que se espera do campo dipolar. Com o campo de interface forçando os momentos magnéticos do FM na direção do eixo de fácil do material, nas faces perpendiculares a este eixo, é criada uma carga magnética superficial (σ_M) que tende a criar um campo dipolar com orientação contrária ao eixo fácil do FM, Figura 3.16. Entretanto, o que ocorre, conforme mostrado na Figura 3.15, para a situação (a), é que para espessuras abaixo de 15 nm as cargas magnéticas de volume passam a ser fontes de campo dipolar com orientação contrária ao campo criado pela carga de superfície, ajudando portanto, na estabilização da partícula FM, ver Figura 3.17.

3.3.3 Coercividade

Um outro fator interessante que observamos é o aumento da coercividade, capacidade que a partícula FM tem de manter seus momentos presos numa determinada direção. O aumento da coercividade significa dizer que os momentos magnéticos resistem bastante à mudança de direção do campo magnético externo.

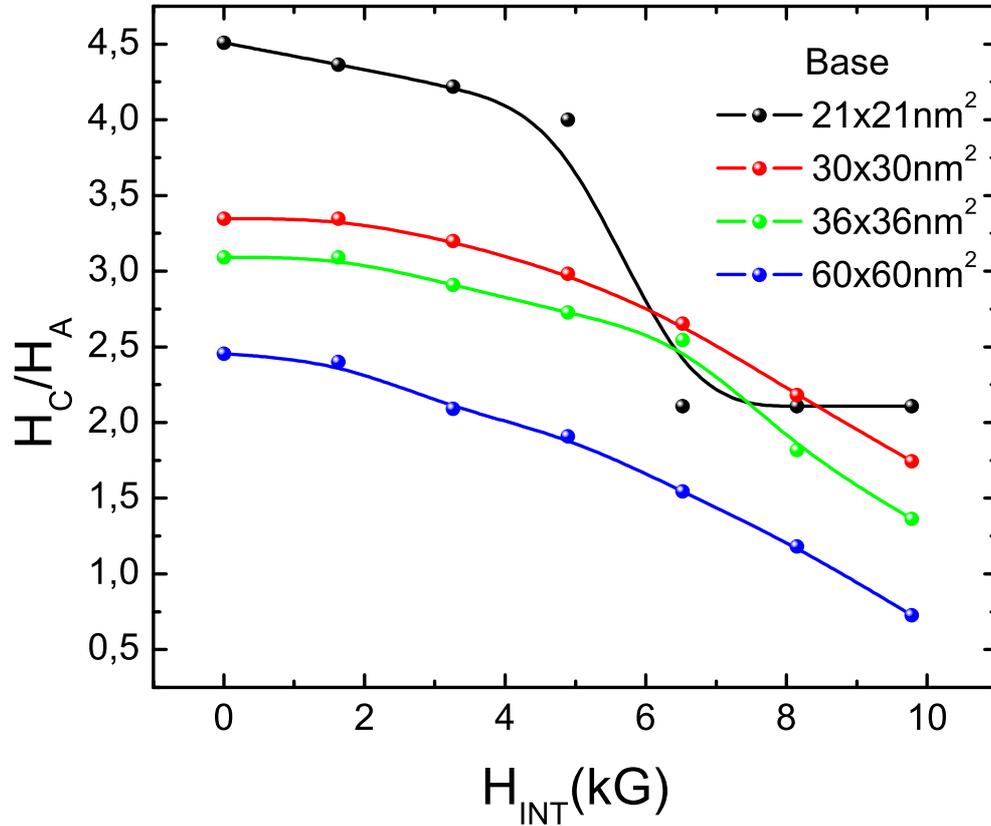


Figura 3.18: Coercividade em partículas FM finas, $h = 12$ nm, com base quadrada, $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm}$, $30 \text{ nm} \times 30 \text{ nm}$, $36 \text{ nm} \times 36 \text{ nm}$ e $60 \text{ nm} \times 60 \text{ nm}$.

Nas nossas partículas FM finas, tanto para a partícula de 12 nm, como para a partícula com 15 nm de espessura, com base quadrada de $21 \times 21 \text{ nm}^2$ existe um aumento considerável na coercividade das partículas considerando partículas com espessuras superiores a estas. No caso de 12 nm de espessura a coercividade (4.86 kOe) da partícula magnética chega a ser quase duas vezes (2.43 kOe) maior que a partícula de 15 nm de espessura e quatro vezes maior que o valor da coercividade de uma partícula modelo Stoner-Wohlfahrt⁹⁰ de Fe (1.1 kOe). Isto ocorre devido ao fato de que cargas magnéticas de volume contribuem para a estabilização da partícula apontando na direção do eixo fácil. Mapas da

configuração de momentos magnéticos da partícula e da configuração do campo dipolar mostram isso na Figura 3.15.

Na Figura 3.18, apresentamos como a coercividade de partículas FM finas, $T = 12$ nm, varia com o aumento da área da base da partícula, desde $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm}$ até $60 \text{ nm} \times 60 \text{ nm}$. Observamos que para partículas com áreas menores há um aumento na coercividade, entretanto para a partículas de base $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm}$, quando o campo de interface ultrapassa o valor de aproximadamente 5 kG a coercividade decresce mais rapidamente que os das partículas com bases maiores. Este fato ocorre por que nas histereses de partículas com bases menores as histereses começam a apresentar assimetria por influência do campo de interface como mostradas nas Figuras 3.10, 3.12 3.11, 3.13, onde mostramos que, também por influência do campo dipolar, para essas espessuras um estado magnético estável pode ser encontrado.

Um ponto importante a explorar para entender o grande aumento da coercividade de partículas magnéticas pouco espessas é a simetria das cargas magnéticas de volume. Na Figura 3.19 mostramos os mapas dos momentos magnéticos da células e do campo dipolar da camada do meio ($I_z = 5$) de uma partícula de ferro de base quadrada de dimensões $l = 21 \text{ nm}$ e $h = 12 \text{ nm}$. Estes mapas foram criados do estado que corresponde a $H = 0$ para uma partícula sem campo de interface ($H_I = 0$). Na 3.19.(a) nós mostramos o mapa da densidade de carga de volume sobreposto ao mapa do campo de dipolar. O mapa dos momentos magnéticos correspondentes é mostrado na 3.19(b). Notamos que há uma concentração de densidade de cargas de volume positiva perto da superfície esquerda onde a carga de superfície ($\sigma = -\vec{M} \cdot \hat{n}$, não mostrado no quadro) tem um valor negativo. Também onde a superfície densidade de carga magnética é positiva ($\sigma = \vec{M} \cdot \hat{n}$), há uma concentração de carga de volume ($\rho = -\text{div}\vec{M}$) negativa, como mostrado na Figura 3.19.(c). A carga efetiva em qualquer lado é dominada pela densidade de carga de volume (ρ) e o campo de dipolar aponta na direção da magnetização para a maioria do volume da partícula. Isto indica que o campo dipolar acrescenta estabilidade ao estado magnético e, como resultado, um campo externo maior, comparado a H_A , é exigido trocar a partícula.

Para interpretar o efeito do aprisionamento geométrico nós faremos uso de duas quan-

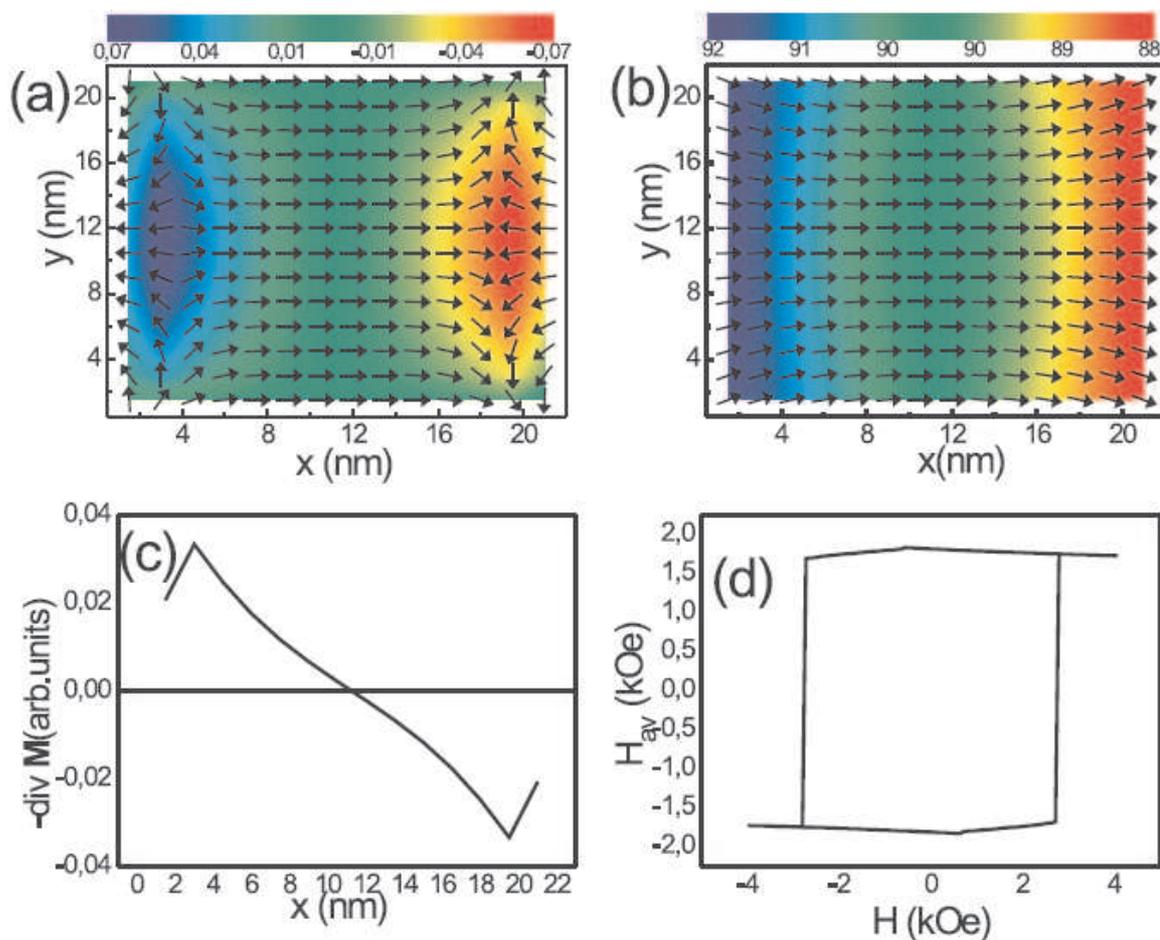


Figura 3.19: Representação esquemática: (a) do campo dipolar sobreposto a um mapa de cor representando a densidade de carga magnética de volume ρ , (b) da configuração de momentos magnéticos, na camada do meio ($I_z = 5$) de uma partícula quadrada de ferro com $h = 12$ nm e $l = 12$ nm, (c) densidade volumétrica média de carga dentro de uma faixa com valor fixo de I_x e (d) campo dipolar ao longo de um laço de histerese. O código de barra de cor no painel (a) indica o valor de ρ , e no painel (b) indica o ângulo com o eixo z .

tidades auxiliares. Uma é o valor médio (H_{av}) do campo dipolar ao longo da direção do campo externo, onde H_{av} é uma média feita sobre todas as células calculada para cada ponto no laço de histerese e conduz a outra curva de histerese, como mostrado em 3.19.(d). A outra quantidade é um valor médio da densidade de carga magnética de volume ($\rho(I_x)$) dentro de uma faixa de células com valor constante de I_x . Este modo de investigar a origem do campo dipolar é usado desde que, como visto na 3.19.(a), a natureza das linhas de campo dipolar indicam este tipo de simetria.

Para um determinado valor do campo externo (ou ponto no laço de histerese) nós calculamos, o campo dipolar médio como:

$$H_{av} = \frac{1}{N} \sum_{I_x, I_y, I_z} H_D^x(I_x, I_y, I_z), \quad (3.2)$$

E a carga de volume média

$$\rho_{av}(I_x) = \sum_{I_y, I_z} (-\nabla \cdot \vec{M}(I_x, I_y, I_z)), \quad (3.3)$$

onde,

$$H_D^x(I_x, I_y, I_z) = \hat{x} \cdot H_D(I_x, I_y, I_z) \quad (3.4)$$

e,

$$H_D(I_x, I_y, I_z) = M_S \sum_j \left(\frac{3(\hat{m}_j \cdot \hat{n}_{jk})\hat{n}_{jk}}{n_{jk}^5} - \frac{\hat{m}_j}{n_{jk}^3} \right) \quad (3.5)$$

A densidade de carga de volume média mostrada na 3.19.(c) explica por que o campo dipolar tem a estrutura mostrada na 3.19.(a). O campo dipolar médio para $H = 2.5$ kOe é quase $H_{av} = 2.0$ kOe. Isto conduz ao valor do campo coercitivo ($H_c = 2.5$ kOe) visto na Figura 3.7 para o campo de interface nulo, $H_I = 0$.

3.4 Partículas espessas de Fe

3.4.1 Carga magnética e Remanência

O nosso sistema inicial trata uma partícula magnética de base $30 \text{ nm} \times 30 \text{ nm}$, sujeita a um campo de interface de 6.5 kG . A remanência desse sistema é mostrada para duas espessuras bem definidas de 15 nm e 24 nm , Figura 3.20. O campo magnético externo está variando de $H = 4.0 \text{ kG}$ até $H = 0$. Podemos observar que para uma partícula ferromagnética de pequena espessura, $t = 15 \text{ nm}$, metade do comprimento lateral ($d = 30 \text{ nm}$) de sua base, a magnetização gira em torno de seu eixo duro, de uma face perpendicular ao seu eixo fácil à outra invertendo o sentido em cada uma delas, Figura 3.20.a.

Este resultado, o estado “curling”, foi previamente antecipado para filmes finos ferromagnéticos por Hornreich⁸⁹. Neste caso, a parte do campo dipolar dependente da carga magnética de volume favorece a estabilização da magnetização e com isso a remanência tem valor maior que 90% do valor de saturação da magnetização. Na Figura 3.20.b, observamos que a remanência, para partículas magnéticas espessas $t = 24 \text{ nm}$, cai para menos que 30% do valor máximo de saturação. Neste caso, a competição entre as fontes de campo dipolar, superficial e volumétrica, e o campo de interface favorecem o aparecimento de vórtices quando $H = 0$. Para partículas magnéticas espessas, as áreas perpendiculares ao plano da base da partícula são grandes, favorecendo o efeito dipolar, oriundo das cargas de superfície, nucleando na partícula arranjos que minimizem essas cargas.

Nas duas situações, partículas FM finas ou espessas sobre um substrato AFM, a magnetização é uma função do campo de interface. Na Figura 3.21, mostramos a remanência para uma partícula espessa, de $30 \text{ nm} \times 30 \text{ nm} \times 21 \text{ nm}$, sujeito a diferentes valores de campo de interface, $H_{int} = 0, 1.63$ e 16.3 kG . O campo magnético externo é iniciado no estado saturado da magnetização da partícula, $H = 2.2 \text{ kG}$, até to $H = 2.2 \text{ kG}$. Resultados contrários aos esperados são apresentados nas Figuras 3.21.a, ($H_{int} = 0$), e 3.21.b ($H_{int} = 1.63 \text{ kG}$).

O campo de interface desestabiliza a magnetização. A razão disto é que este campo de interface impõe um alinhamento aos momentos magnéticos da interface da partícula

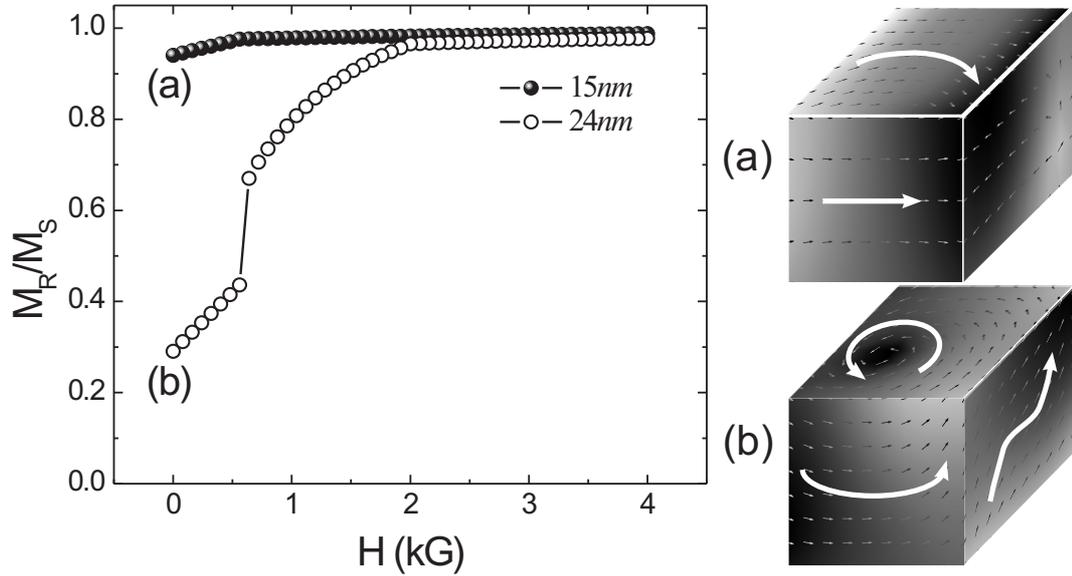


Figura 3.20: Remanência de partículas com bases quadrada $30 \times 30 \text{ nm}^2$, campo de interface $H_{int} = 6.5 \text{ kG}$ e espessura de $t = 15$ (círculo cheio) and 24 nm (círculo vazado). Do lado direito: a fase magnética de uma partícula fina (a), $t = 15 \text{ nm}$, e para uma partícula espessa (b), $t = 24 \text{ nm}$ for $H = 0$.

FM, induzindo uma carga magnética superficial em uma faixa próxima a interface. Esta carga superficial produz um campo desmagnetizante muito forte nos momentos do FM próximos a superfície. Assim o balanço entre as energias de interface e desmagnetizante definem o perfil magnético da partícula, nos planos da interface, do meio e da superfície, o sombreamento na figura mostra as componentes da magnetização, preto para cima e branco para baixo. Podemos ver na Figura 3.21.a que o perfil magnético, de uma partícula magnética na ausência de campo externo, $H = 0$, é um giro da magnetização perpendicular ao plano de interface da partícula, como uma parede de π -Block. Apesar disto há uma carga magnética líquida, na face perpendicular ao eixo fácil, no meio da partícula. Na Figura 3.21.b podemos observar o perfil magnético para campo de troca de interface fraco, $H_{INT} = 1.63 \text{ kG}$. Neste caso o mínimo da energia magnética favorece um estado de vórtice, da interface até a superfície da partícula. Inversamente a estas situações, para campo de interface forte, $H_{INT} = 16.3 \text{ kG}$ (ver Figura 3.21.c), a magnetização

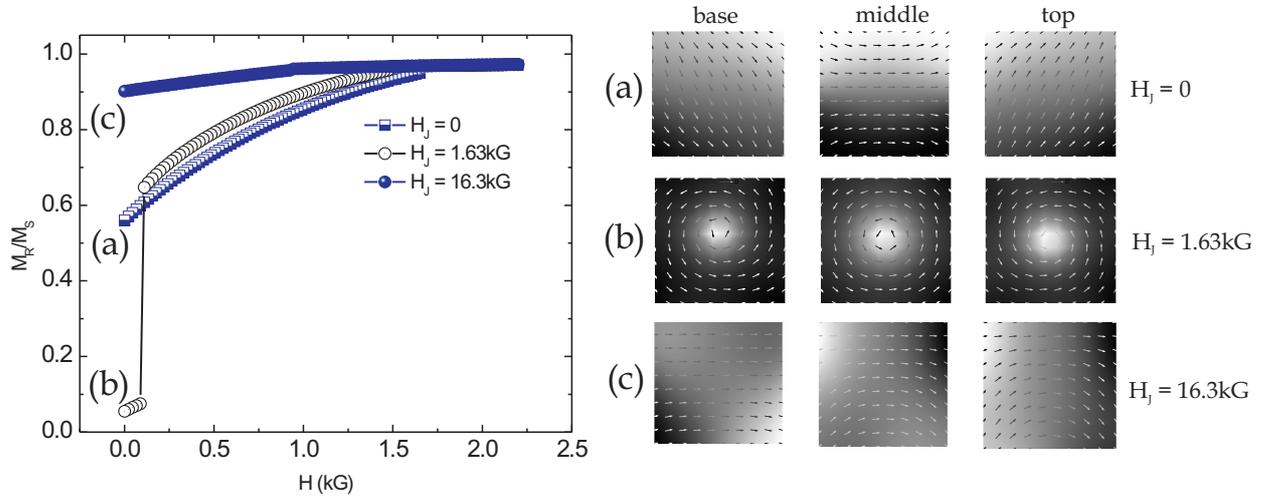


Figura 3.21: Partícula de Fe para três valores diferentes de campo de interface. A magnetização remanente é iniciada na saturação, com $H = 2.2$ kG, e o campo externo é reduzido até zero. As imagens no lado direito indicam os arranjos dos momentos magnéticos para a partícula FM para as curvas $H = 0$ (quadrados azuis), $H_{INT} = 1.63$ kG (círculo branco) e $H_{INT} = 16.3$ kG (círculo azul).

na interface está alinhada com o campo de interface e gera um estado “buckle” para a superfície. Este estado, quase alinhado, produz um remanência magnética enorme.

Estes resultados mostram este aspecto interessante da remanência, ela não é uma função linear de H_{INT} . Era de se esperar que com o aumento do campo de interface a remanência fosse aumentando entretanto, observamos que para campos de interface relativamente baixos, da ordem do campo de “exchange” do FM, isso não ocorre.

Partícula com base retangular

Outro tipo de investigação feita neste trabalho foi à observação do comportamento da coercividade e do campo de EB quando a forma geométrica da partícula é alterada. Nesta tese, estudaremos partículas retangulares de baixa espessura, ou seja, estudaremos partículas com altura de $t = 12$ nm, como mostram, as Figuras 3.27 e 3.22.

O interesse nessa mudança de geometria é tecnológico, já que os sensores das cabeças de leitura magnética detectam efetivamente o fluxo magnético das partículas. Então quanto maior a densidade de cargas nas proximidades das faces perpendiculares ao eixo

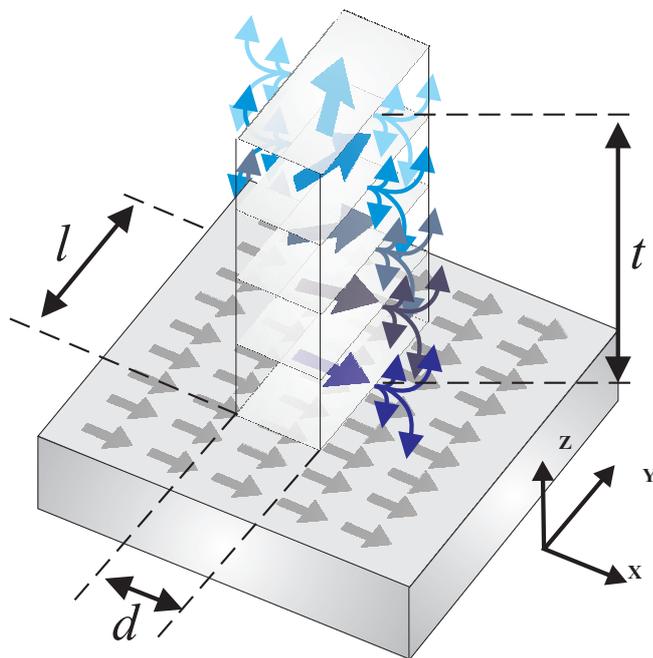


Figura 3.22: Partícula com geometria retangular com maior lateral l , perpendicular ao eixo x (eixo fácil).

fácil (eixo x) maior a densidade de linhas de fluxo magnético e melhor é o comportamento da partícula como unidade magnética de armazenamento de dados.

Uma possibilidade para aumento da fuga de fluxo magnético oriunda da carga magnética de superfície nas extremidades da partícula magnética seria estender esta face, aumentando a densidade de cargas magnéticas nessas regiões, como mostra a Figura 3.22. Em nossas simulações trabalhamos com o alongamento das partículas tomando por base uma partícula de $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm}$, aumentando a dimensão l na direção y de 3 nm de cada vez que é o tamanho da célula (unidade de simulação) que estamos utilizando.

Nossos resultados mostram que há uma diminuição na coercividade das partículas e que esta estrutura não é tão favorável quanto se deseja, pois, embora a quantidade de cargas magnéticas na superfície seja maior (temos uma área maior), sua aplicabilidade fica prejudicada pelo efeito dipolar ter mais intensidade. O painel com as Figuras 3.23.(a), 3.23.(b), 3.23.(c) e 3.23.(d), mostra com o efeito do aumento das faces perpendiculares ao eixo de anisotropia alteram as curvas de histerese destas partículas para campos de

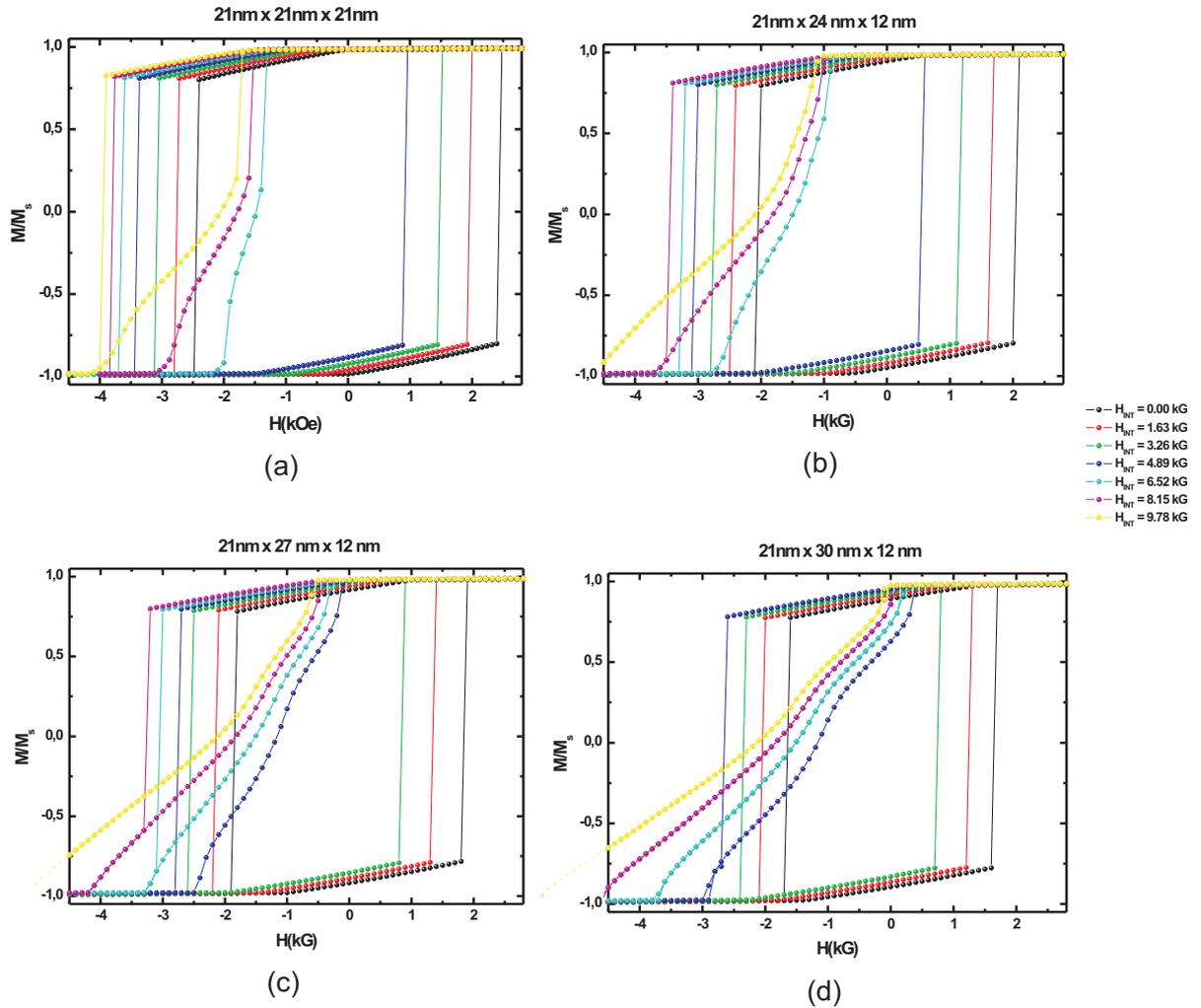


Figura 3.23: Ciclos de histerese para campos de interface variando entre 0 e 9.78 kG para partículas com bases de 21 nm × 21 nm (a), 21 nm × 24 nm (b), 21 nm × 27 nm (c) e 21 nm × 30 nm (d), todos com 12 nm de espessura.

interface (H_{INT}) variando entre 0 e 9.78 kG.

Na Figura 3.23.(a) temos os ciclos de histerese para uma partícula magnética com base de geometria quadrada mostrando a influência do campo de interface nesta partícula conforme discutido na seção 3.3.3. As Figuras 3.23.(b), 3.23.(c) e 3.23.(d) mostram como o aumento da face lateral perpendicular ao eixo de anisotropia influi nos laços de histerese, ficando praticamente inviável o cálculo do campo coercivo destas partículas quando o campo de interface é superior a 4.89 kG. Quando a coercividade destas partículas alongadas são

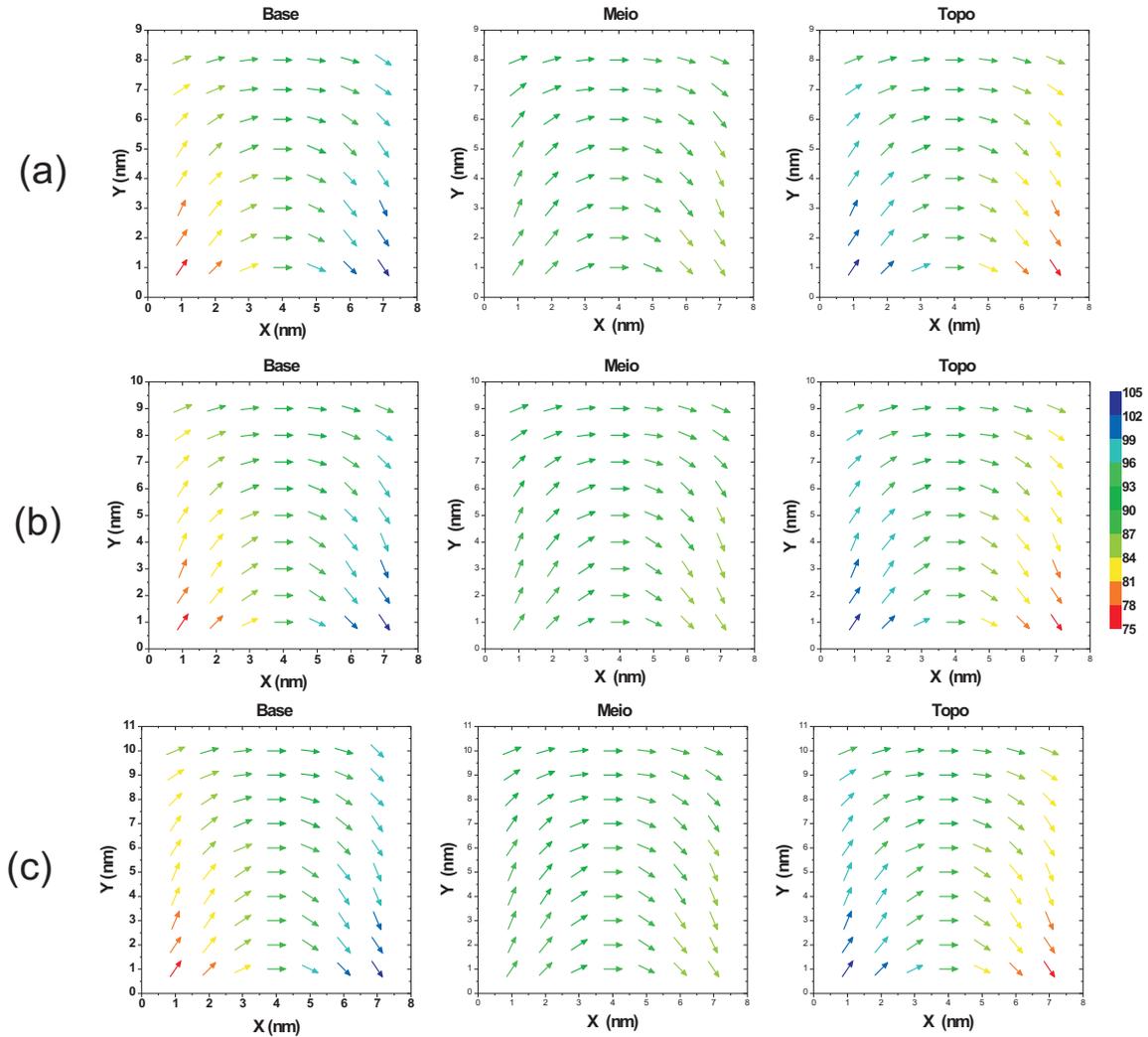


Figura 3.24: Partículas com geometria retangular $l = 24$ nm (a), $l = 27$ nm (b) e $l = 30$ nm (c).

comparadas a coercividade da partícula de base com geometria quadrada, Figura 3.23.(a), notamos que existe uma redução. Esta redução ocorre por existir ma maior quantidade de carga magnética superficial devido ao aumento da área da face.

Na Figura 3.24 observamos que o estado “curling” é formado para as os três comprimentos ($l = 24$ nm (a), $l = 27$ nm (b) e $l = 30$ nm (c)) escolhidos para o eixo y , perpendicular ao eixo de anisotropia. Nas três situações temos campo de interface nulo

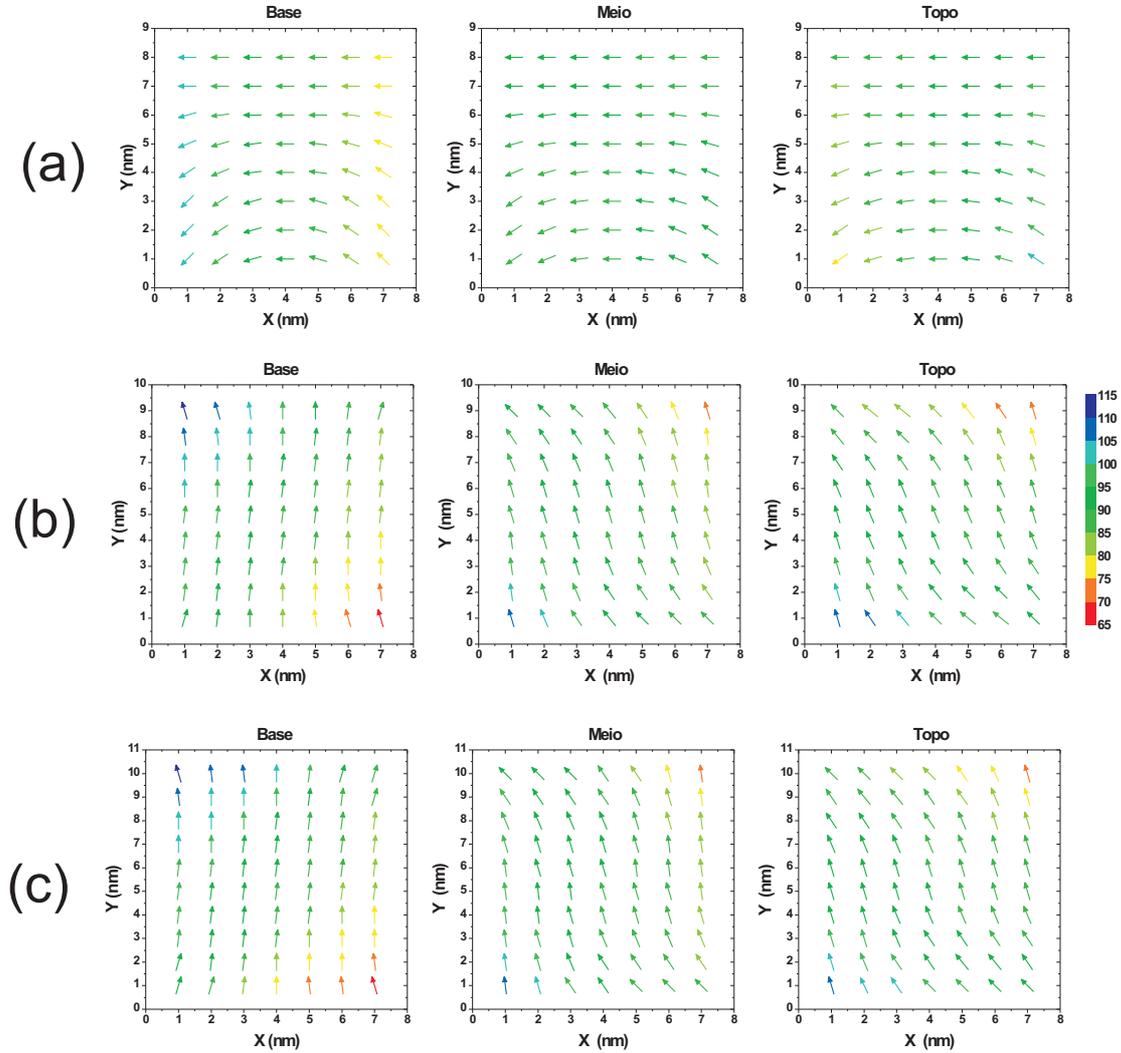


Figura 3.25: Partículas com geometria retangular $l = 24$ nm (a), $l = 27$ nm (b) e $l = 30$ nm (c).

e que a magnetização começa a apresentar componente z , mesmo para uma partícula de baixa espessura $z = 12$ nm. Este fato é representado na Figura 3.24 pela mudança de cor na seta que representa a magnetização em cada ponto, a cor verde indica que a magnetização naquele ponto está no plano $x - y$, ou com valores bem próximos a ele, valores próximos de vermelho indicam que a magnetização tem componente z positiva, e valores próximos de azul indicam que o mergulho da magnetização é no sentido de z negativo.

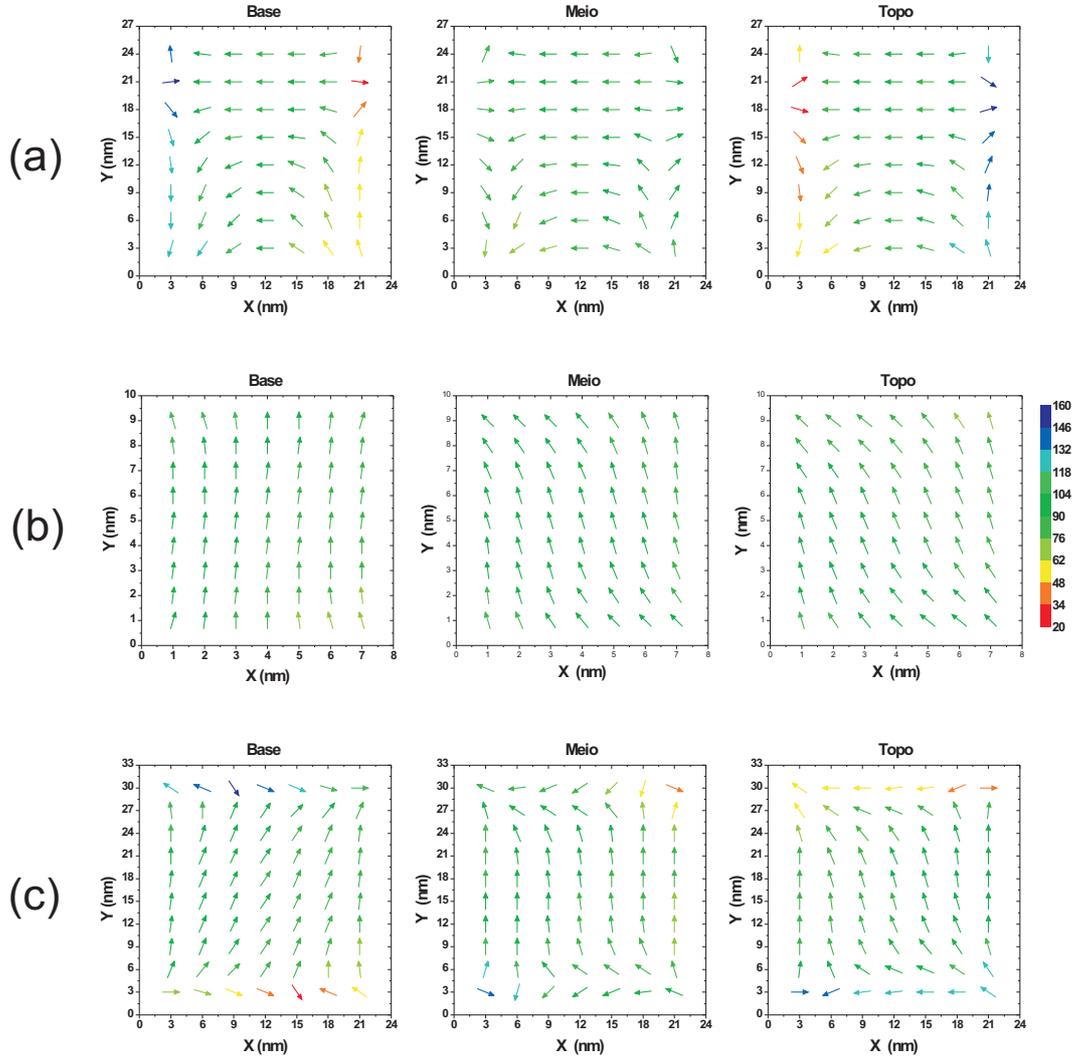


Figura 3.26: Partículas com geometria retangular $l = 24$ nm (a), $l = 27$ nm (b) e $l = 30$ nm (c).

Na Figura 3.23, Observamos que para um campo de interface $H_J = 4.89$ kG os ciclos de histerese magnética começam a apresentar assimetria, 3.23.(b), 3.23.(c) e 3.23.(d), que não apresentava com a geometria quadrada, 3.23.(a). O motivo deste comportamento é a competição entre o campo dipolar H_D , e os campos que tendem a alinhar os momentos magnéticos da partícula na direção x como campo de anisotropia H_A e campo de interface H_J . Na situação da geometria quadrada o campo dipolar auxilia na estabilização da

partícula, como mostrado na seção 3.3.2.

No caso das partículas mais alongadas na direção y esse aumento da área faz com que a condição de estabilidade seja desfeita e o campo dipolar passa fazer com que os momentos magnéticos procurem uma direção que minimiza a energia dipolar, Figura 3.25, no caso a própria direção y . Quando a partícula é menos alongada, $21 \text{ nm} \times 24 \text{ nm}$, Figura 3.25.(a), o comportamento da magnetização ainda é parecido com o da partícula com base quadrada, $21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm}$, embora seja notado uma diminuição na coercividade da partícula. Entretanto, quando o comprimento l é aumentado para $l = 27 \text{ nm}$ e $l = 30 \text{ nm}$, Figuras 3.25.(b) e (c) respectivamente, o alinhamento com a direção y é percebido, contribuindo assim para a assimetrias encontradas nos laços de histerese.

A Figura 3.26 mostra qualitativamente o comportamento do campo dipolar em cada célula da Figura 3.25. Nos casos de partículas com geometria de maior comprimento de l (24 nm e 30 nm), observamos que é o campo dipolar o causador na modificação no padrão da magnetização, no caso da partícula de base quadrada praticamente no plano $x - y$, causando a saída do plano da mesma principalmente nas regiões próximas as faces maiores para minimizar a energia magnetostática.

A Figura 3.27, mostra uma possibilidade para a disposição de partículas magnéticas mais alongadas na direção de seu eixo de anisotropia, e também do campo de interface. Nesta situação, o efeito da geometria torna-se mais favorável à estabilização da partícula, pois a forma mais alongada na direção do eixo de anisotropia torna as faces paralelas a este eixo maiores, conseqüentemente, este fato impõe um arranjo magnético, na partícula alongada com esta disposição, favorecendo o alinhamento na direção do eixo de interface. Este tipo de comportamento tem grande interesse tecnológico, tendo em vista que com um pequeno aumento no tamanho da partícula podemos ter um efeito estabilizante bastante favorável.

Nesta investigação continuamos fazendo uma comparação dos resultados obtidos para partículas mais alongadas com a partícula com base de geometria quadrada. Entretanto, estamos escolhendo aumentar o tamanho da partícula na direção x , novamente de 3 nm de cada vez como fizemos quando aumentamos o tamanho da partícula na direção y . Nossas

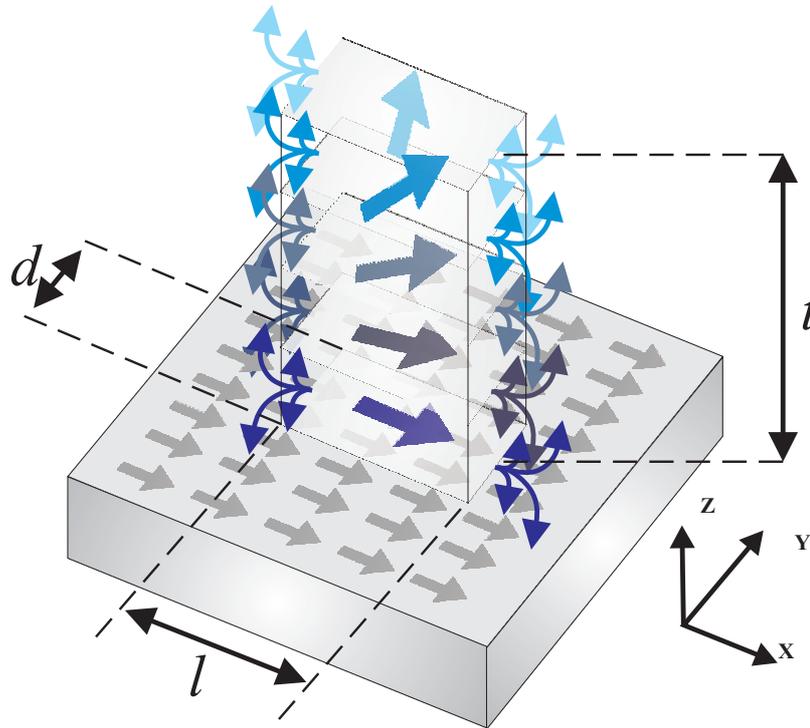


Figura 3.27: Partícula com geometria retangular com maior lateral l , paralela ao eixo x (eixo fácil).

simulações apresentam três tamanhos de partículas alongadas comparadas à partícula de base quadrada ($21 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 12 \text{ nm}$), são elas: $24 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 12 \text{ nm}$, $27 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 12 \text{ nm}$ e $30 \text{ nm} \times 21 \text{ nm} \times 12 \text{ nm}$.

A Figura 3.28, mostra ciclo de histerese para as quatro situações descritas acima para campos de interface variando entre 0 e 9.89 kG. Um comportamento que podemos observar é que uma partícula com apenas 3 nm (Figura 3.28.(b)) de comprimento a mais que a partícula de base quadrada (Figura 3.28.(a)) já deixa de apresentar a assimetria na histerese magnética para campos de interface superiores a 6.52 kG. No painel da Figura 3.29 encontramos os perfis da magnetização para o campo de interface de 6.52 kG para um valor de campo externo de -1.5 kG que demonstram que, os momentos magnéticos da parte central da partícula tendem a ficar alinhados na direção do eixo de anisotropia (eixo x) e todos aproximadamente paralelos ao plano $x - y$ o que resulta numa maior estabilidade da partícula magnética.

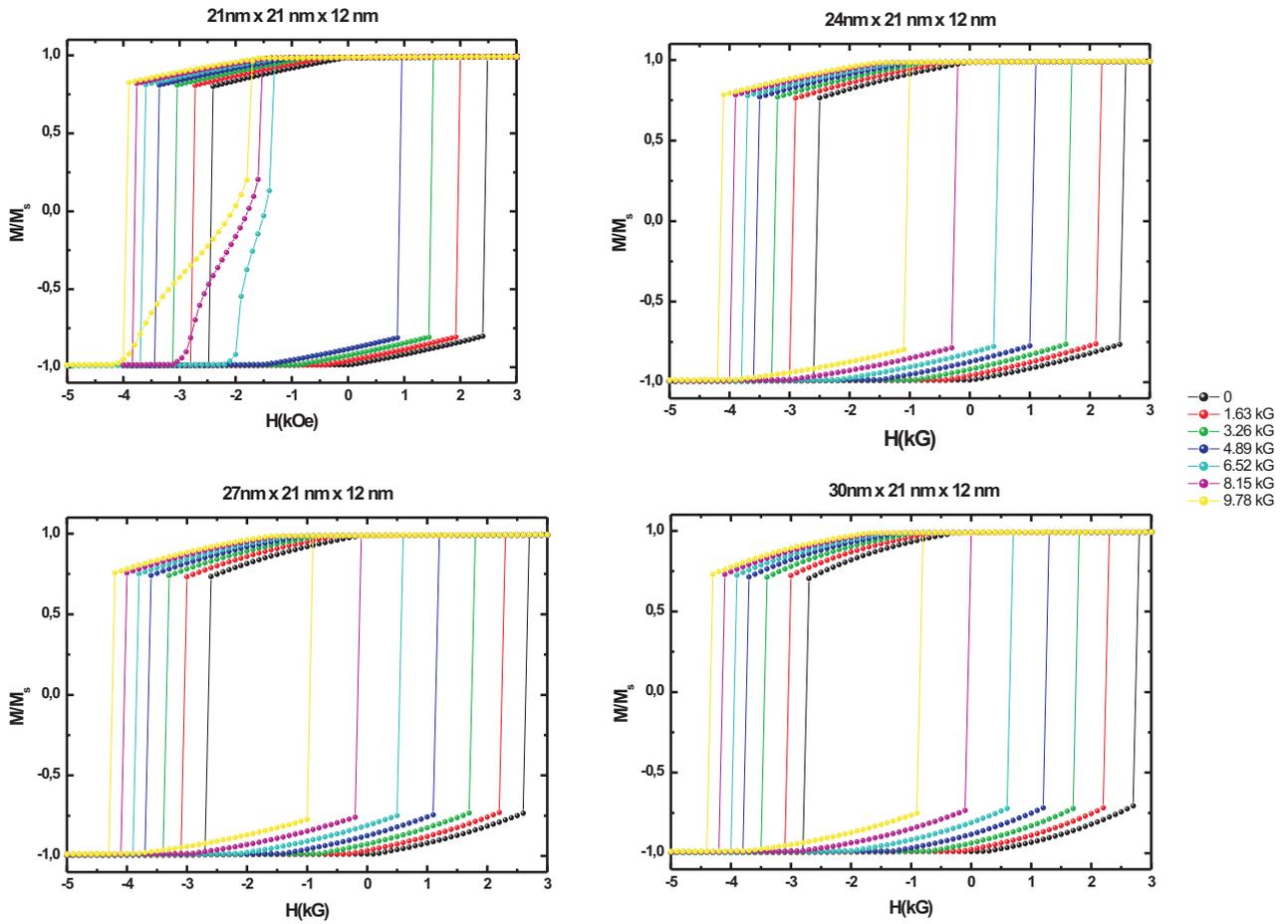


Figura 3.28: Ciclos de histerese para campos de interface variando entre 0 e 9.78 kG para partículas com bases de $21\text{ nm} \times 21\text{ nm}$ (a), $24\text{ nm} \times 21\text{ nm}$ (b), $27\text{ nm} \times 21\text{ nm}$ (c) e $30\text{ nm} \times 21\text{ nm}$ (d), todos com 12 nm de espessura.

A Figura 3.29 apresenta qualitativamente o campo dipolar H_D para este valor de campo externo (-1.5 kG) e para a curva de histerese com campo de interface de 6.52 kG. Nós observamos que a partícula com geometria quadrada apresenta um campo dipolar na interface que não é totalmente desmagnetizante, Figura 3.30.(a), apontando em uma direção diagonal. Nas Figuras 3.29.(b), 3.29.(c) e 3.29.(d), observamos que à medida que aumentamos de 3 nm o comprimento l da partícula na direção x os momentos magnéticos das células de sua parte central ficam cada vez mais alinhados com o eixo x além de estarem mais próximos do plano $x - y$ na região central da partícula. Já nas faces perpendiculares

ao eixo x as células das bordas têm momento magnético para fora do plano tanto na interface como na superfície da partícula com mergulhos opostos como mostra o painel das Figuras 3.29.(b) e 3.29.(d). Esta configuração reduz a energia magnetostática, entretanto na parte central da partícula (Figura 3.29.(c)) existe uma região em que algumas células permanecem com uma componente da magnetização na direção do eixo de anisotropia, o que fornece carga magnética de superfície, fato que é importante tendo em vista que as cabeças de leitura podem ler exatamente a fuga de fluxo destas superfícies.

Nas Figuras 3.30.(b), 3.30.(c) e 3.30.(d), observamos que à medida que aumentamos de 3 nm o comprimento l da partícula na direção x o campo dipolar fica cada vez mais alinhado com este eixo e as células têm H_D mais próximos do plano $x - y$ na região central da partícula. Já nas faces perpendiculares ao eixo x as células das bordas tem H_D fora do plano tanto na interface como na superfície da partícula em concordância com o painel das Figuras 3.29.(b), 3.29.(c) e 3.29.(d). Também é importante notar que nas partículas mais alongadas na direção x nas bordas perpendiculares a este eixo o campo dipolar H_D tem uma componente que aponta na direção x positiva para algumas partículas mostrando uma característica diferente do que normalmente se esperaria.

Um outro ponto que nós estudamos foi o comportamento da coercividade e do campo de “exchange bias” destas partículas, quando esta mudança na geometria é estabelecida, mostrado nas Figuras 3.31 e 3.32. Na Figura 3.31 observamos que há um aumento na coercividade das partículas à medida que elas ficam mais alongadas na direção do campo de anisotropia. A partícula com base alongada (30 nm \times 21 nm) chega a ter um campo coercivo aproximadamente 13% em relação à partícula com base quadrada (21 nm \times 21 nm), em um campo externo H_{INT} nulo. Observando este comportamento para $H_{INT} = 9.78$ kG, o aumento na coercividade é mais intenso ainda, cerca de 62%.

Este aumento pode ser entendido observando as formas da histerese magnética para as duas geometrias, quadrada (Figuras 3.28.(a)) e retangular (Figura 3.28.(d)) devido ao fato de a assimetria na histerese magnética deixar e existir em partículas mais alongadas no eixo x . Observando os perfis de magnetização, Figura 3.29, notamos que as faces mais alongadas, plano $x - z$, impõe na partícula uma ordenamento fazendo com que os seus

momentos magnéticos fiquem paralelos ao plano de interface. Este efeito adicional faz com que a coercividade das partículas aumente.

A Figura 3.32 apresenta o comportamento do campo de “exchange bias” (H_{EB}) para as geometrias quadrada e retangular. O comportamento é idêntico ao apresentado na Figura 3.9 para partículas com base quadrada maiores. Resultado este também apresentado por E. Popova et.al.⁹¹, só que para partículas de Cobalto. O valor de H_{EB} não é muito afetado por estes efeitos geométrico apresentados aqui nesta tese.

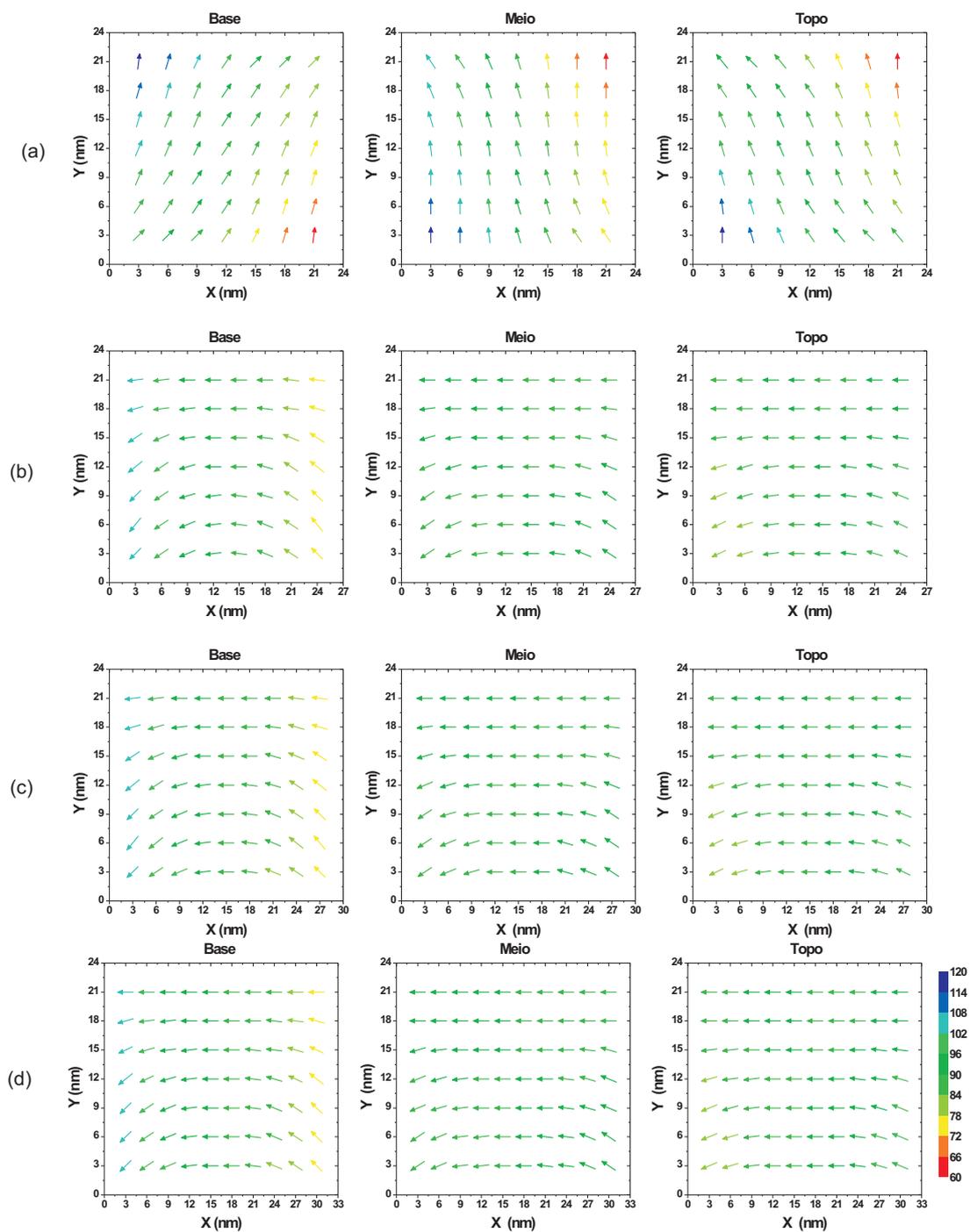


Figura 3.29: Perfis de magnetização para campo externo de -1.5 kG para partículas com bases de 21 nm \times 21 nm (a), 24 nm \times 21 nm (b), 27 nm \times 21 nm (c) e 30 nm \times 21 nm (d), todos com 12 nm de espessura.

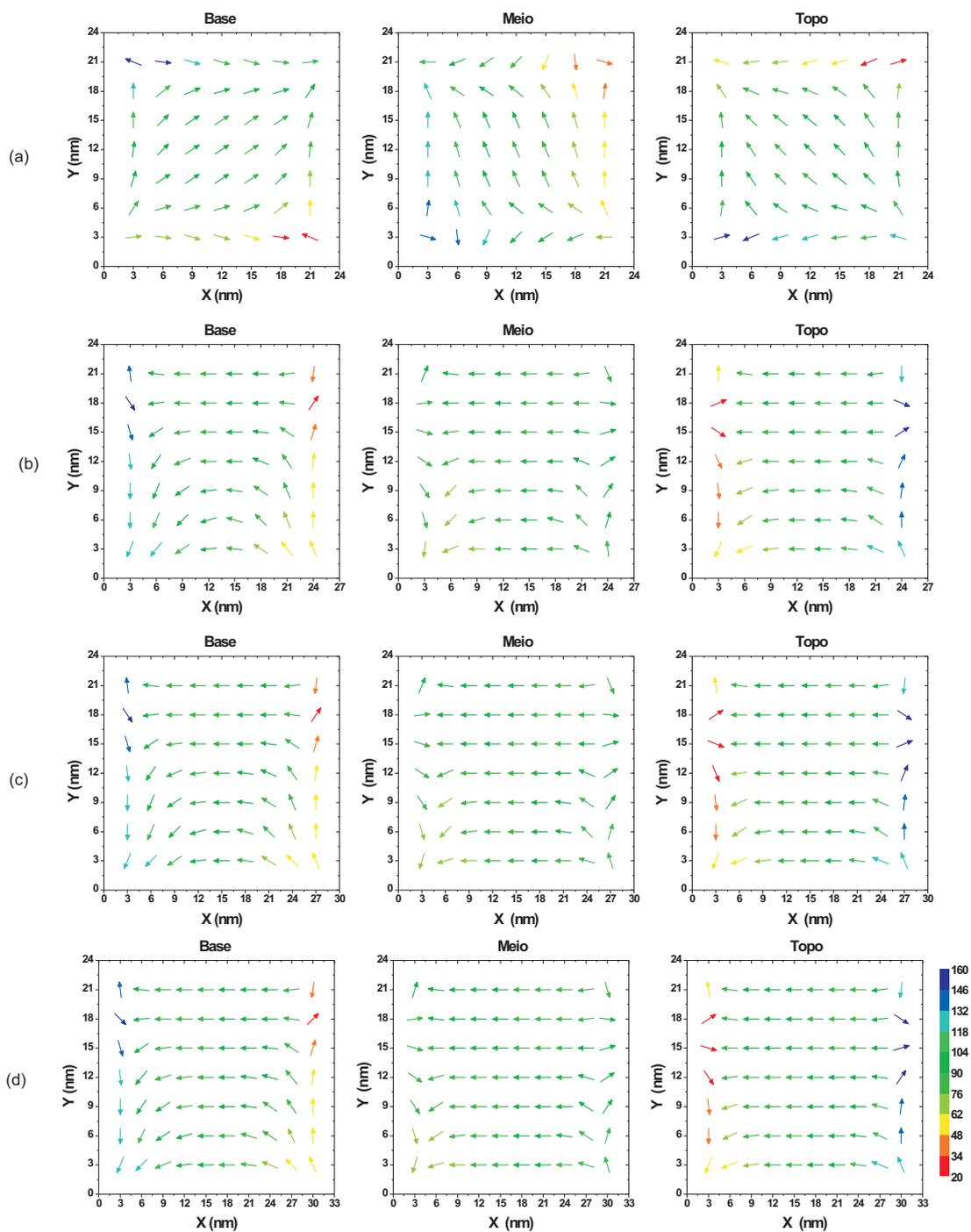


Figura 3.30: Perfis de magnetização para campo externo de -1.5 kG para partículas com bases de 21 nm \times 21 nm (a), 24 nm \times 21 nm (b), 27 nm \times 21 nm (c) e 30 nm \times 21 nm (d), todos com 12 nm de espessura.

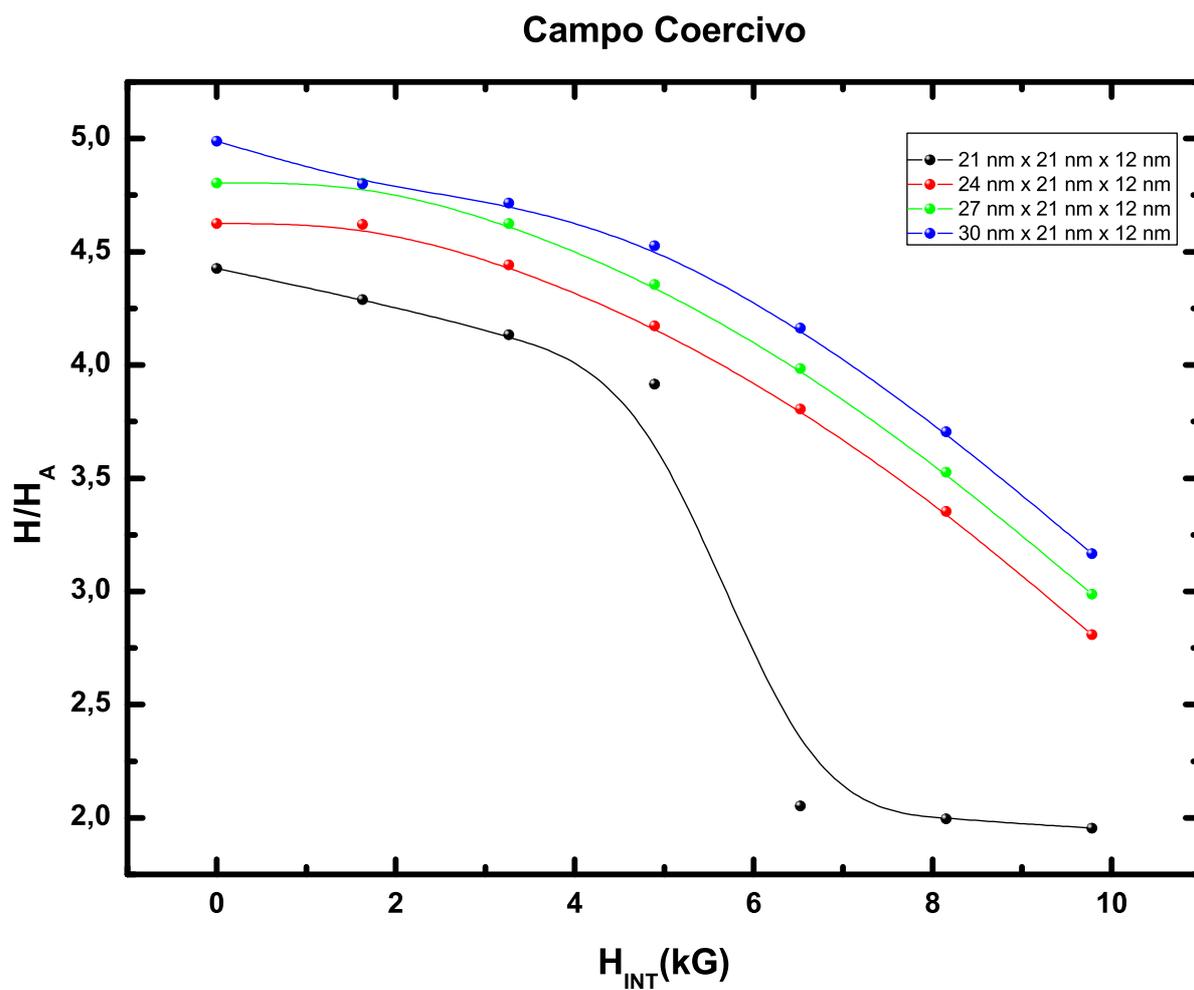


Figura 3.31: Campo coercivo em função do campo de interface para partículas com bases de 21 nm × 21 nm (a), 24 nm × 21 nm (b), 27 nm × 21 nm (c) e 30 nm × 21 nm (d), todos com 12 nm de espessura.

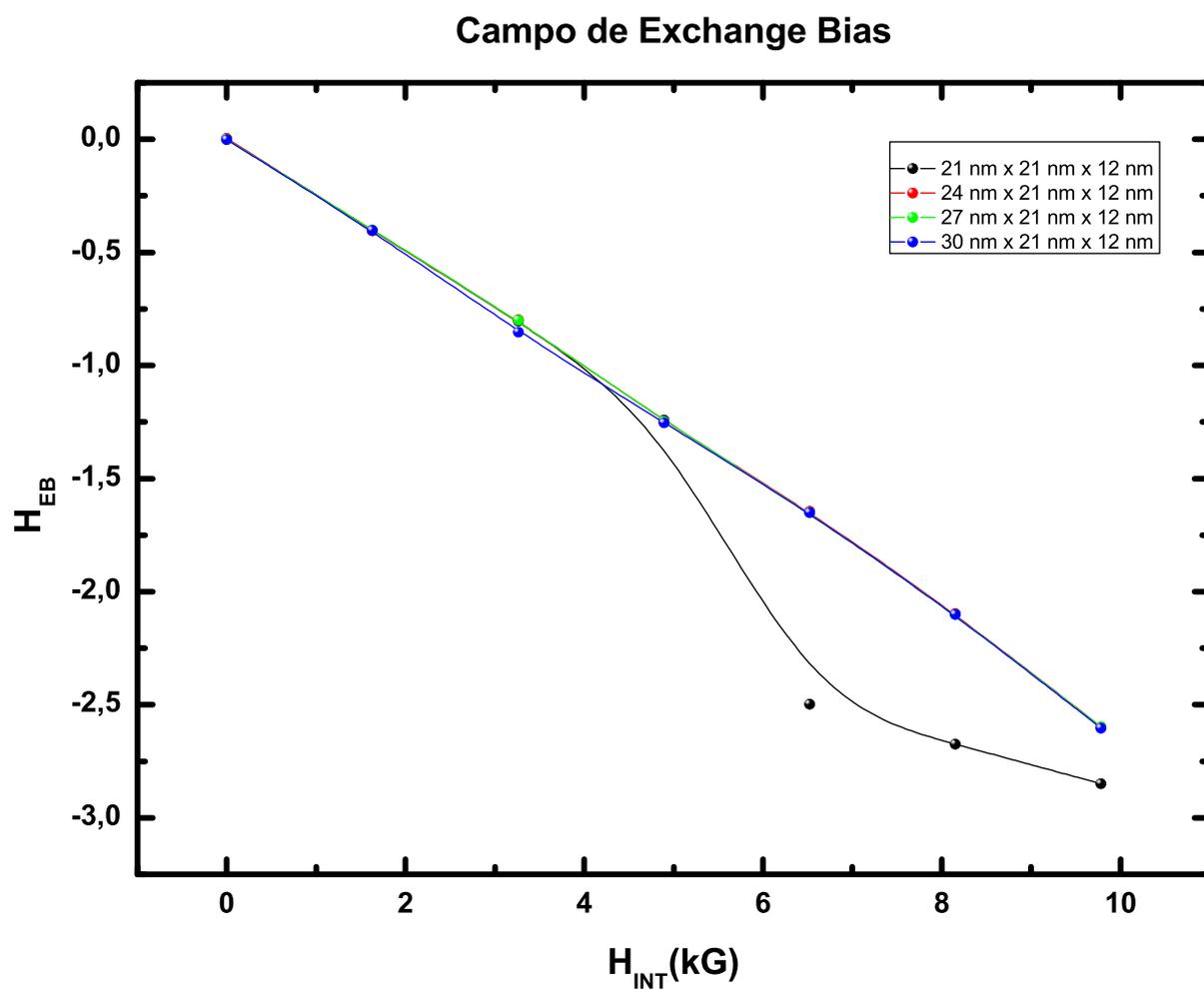


Figura 3.32: Campo coercivo em função do campo de “exchange bias” para partículas com bases de 21 nm × 21 nm (a), 24 nm × 21 nm (b), 27 nm × 21 nm (c) e 30 nm × 21 nm (d), todos com 12 nm de espessura.

Capítulo 4

Histerese térmica em partículas nanométricas

4.1 Estabilidade térmica

Materiais nanoestruturados têm sido extensivamente estudados recentemente.⁸ A motivação está, em grande parte, na aplicação destes materiais para o desenvolvimento de dispositivos magneto-eletrônicos miniaturizados e para o armazenamento em mídias magnéticas de alta densidade. Muito esforço de pesquisa tem sido dedicado para explorar o impacto das dimensões de nanoelementos nos seus estados magnéticos e mecanismos de giro (switching). Neste contexto, um tema recorrente e fundamental é o fato que um nanomagnetismo pode se tornar superparamagnético a uma temperatura menor que a temperatura de ordem de volume⁸.

Um possível modo para combater o limite de superparamagnético é tirar proveito do acoplamento magnético entre a nanopartícula e um sistema magnético termicamente estável. Isto tem sido investigado pelo crescimento de nanopartículas ferromagnéticas (FM) em um substrato antiferromagnético (AFM)^{8,67,16}. Mesmo com o auxílio de sistemas, acoplamentos substratos AFM, como os anteriormente citados, efeitos superparamagnéticos ainda podem ser encontrados quando as partículas são muito reduzidas. A gravação magnética termicamente auxiliada é uma maneira promissora para driblar o limite superparamagnético que enfrenta a gravação magnética convencional.

O antídoto lógico para o efeito superparamagnético é aumentar significativamente a

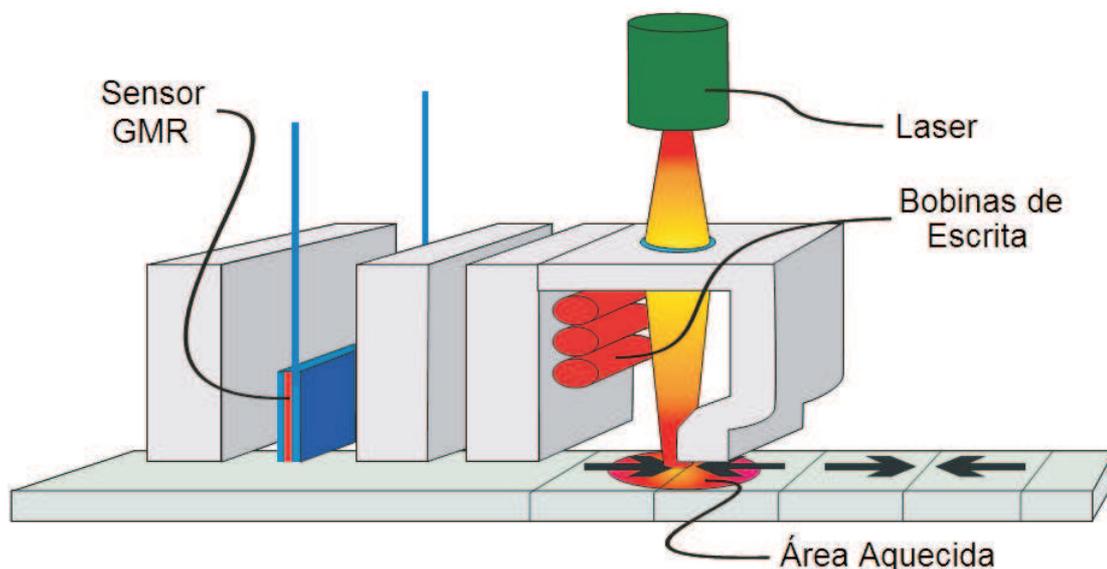


Figura 4.1: Aparato para gravação magnética termicamente auxiliada.

densidade magnética da energia de anisotropia K_U . Entretanto, esta solução leva a uma dificuldade extra para a gravação magnética, necessitando de um campo de gravação maior. O desafio técnico fundamental é que não é possível gerar campos magnéticos grandes bastante para superar o campo de anisotropia magnética, extremamente elevado, necessário para a estabilidade térmica dos meios magnéticos. Assim reduzir temporariamente a anisotropia magnética de um meio através do aumento da sua temperatura leva a uma facilidade na escrita dos dados. Um subsequente resfriamento rápido e o meio congela-se no estado da magnetização desejado como mostrado na Figura 4.1. A gravação magnética termicamente auxiliada ajuda a reduzir o campo de escrita necessário para escrita de dados. Um outro desafio tecnológico é que somente a área a ser gravada não deve ser aquecida para evitar instabilidades térmicas em regiões adjacentes, Figura 4.2.

Matrizes mono-domínio de partículas ferromagnéticas finas estão atualmente sendo investigadas para o desenvolvimento de mídias de armazenamento magnético de alta densidade. A gravação magnética termicamente auxiliada (“Thermally Assisted Magnetic Recording” (TAMR)) permite o uso de materiais de altas anisotropias, exigidos para assegurar estabilidade térmica de partículas de dimensões pequenas, e uso de campos e de

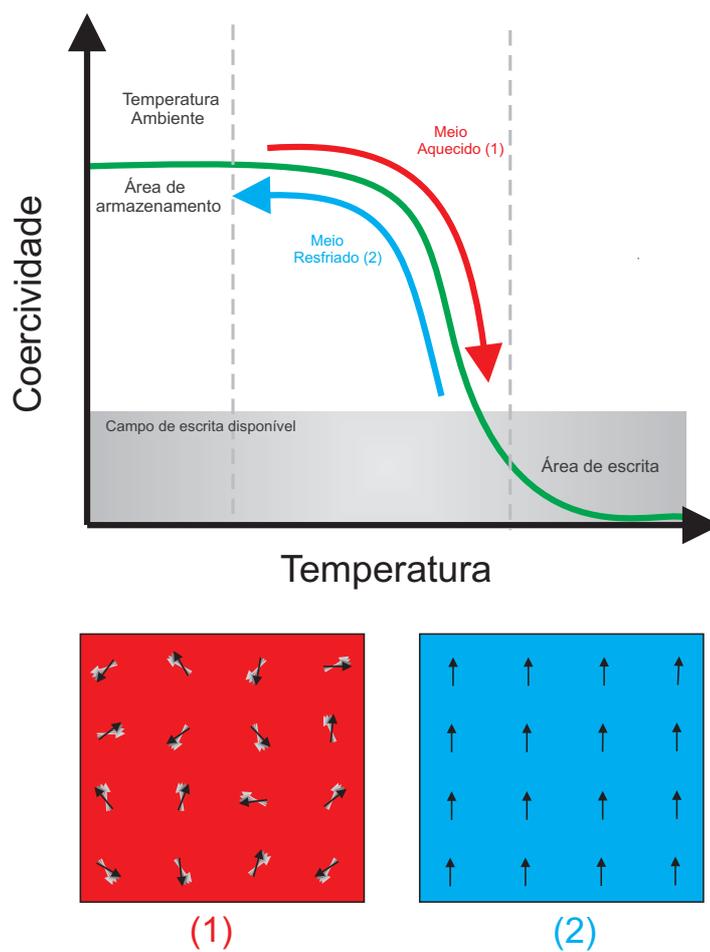


Figura 4.2: Modificação da coercividade dos sistema com a gravação magnética termicamente assistida.

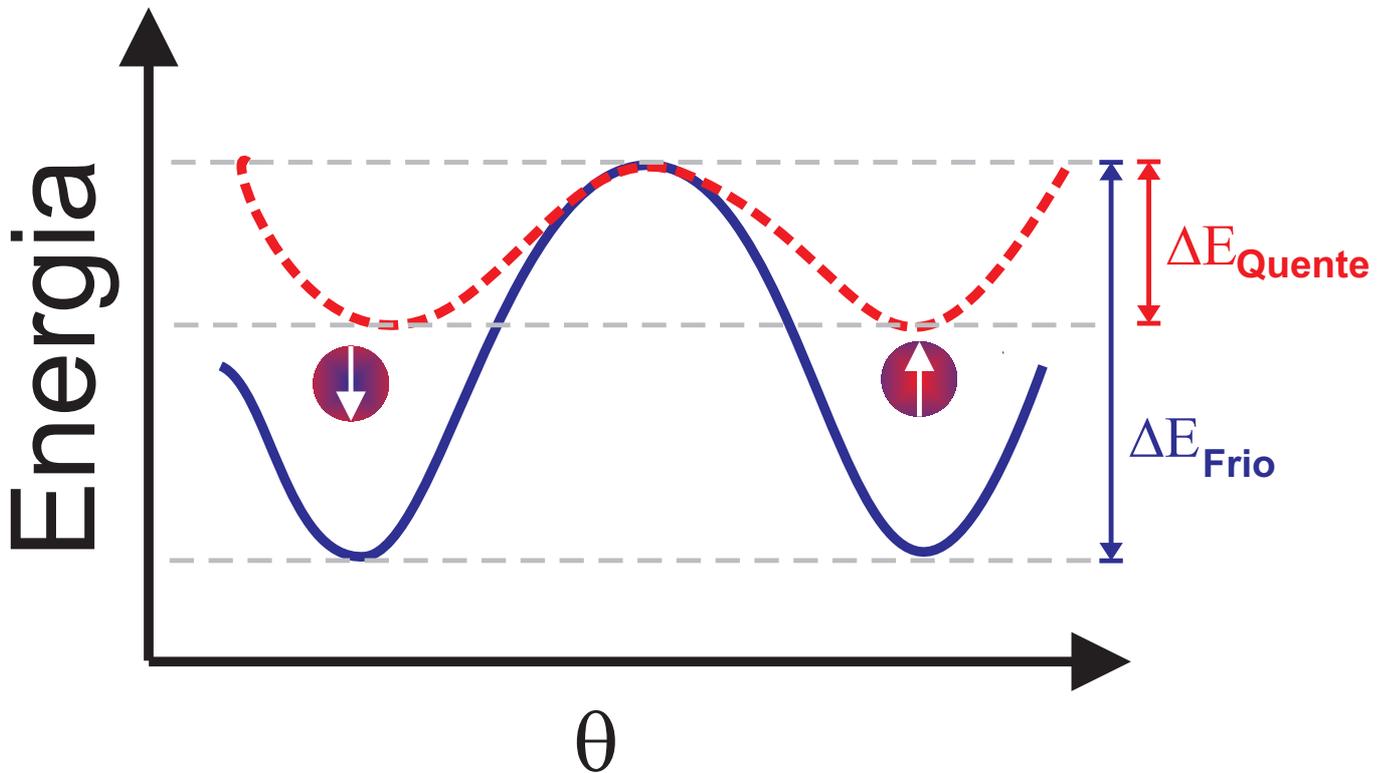


Figura 4.3: Modificação da barreira de energia por efeitos de aumento de temperatura.

escrita (gravação) dentro dos limites técnicos disponíveis para as cabeças de gravação⁹². O processo de TAMR é baseado em aquecer a mídia magnética de alta anisotropia onde se vai guardar a informação, antes de gravar, com um campo magnético.

Efetivamente o que esse aquecimento faz é diminuir a barreira de anisotropia existente entre os estados de magnetização de interesse tecnológico como mostra a Figura 4.3. Com a partícula à temperatura ambiente temos uma barreira de anisotropia ΔE_{Frio} , o que corresponderia ao estado (2), na Figura 4.2, por exemplo. Com o aumento da temperatura, a barreira de anisotropia torna-se menor ΔE_{Quente} , estado (1), na Figura 4.2, facilitando a passagem de um estado para o outro com um valor de campo externo em que esse processo não seria possível.

No nosso problema vamos estudar a possibilidade de enfraquecimento do campo de interface por meio do aumento da temperatura do sistema partícula FM/substrato AFM. Este aumento respeitará os limites impostos pelas temperaturas de ordem dos dois sis-

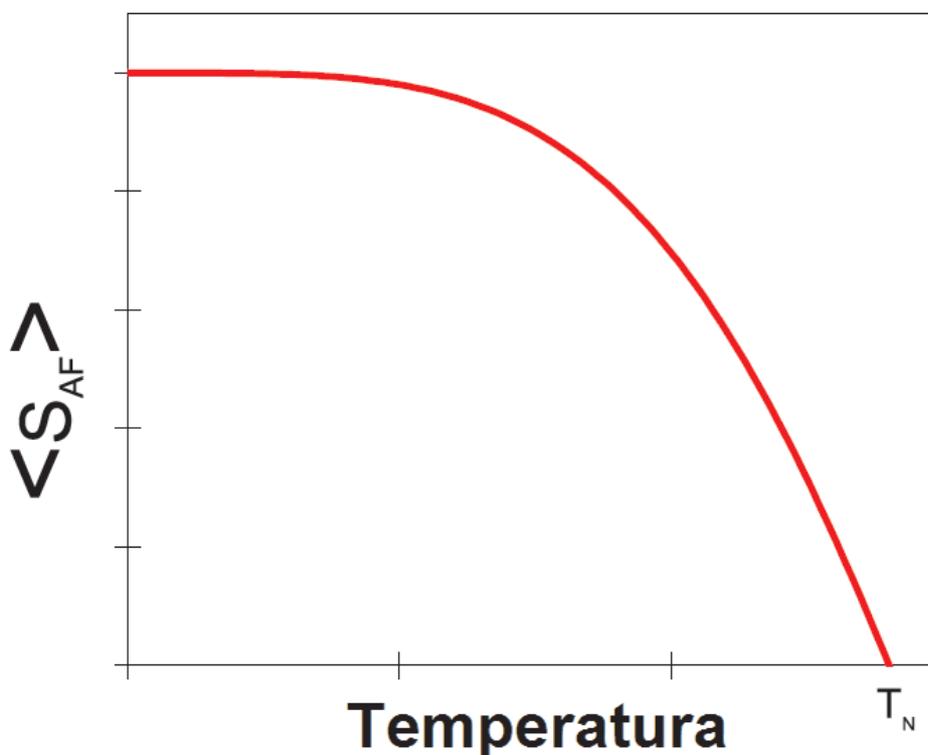


Figura 4.4: Representação esquemática do comportamento do momento magnético da camada de interface do AFM com a temperatura.

temas, Curie da partícula FM e Néel do substrato AF.

Na Figura 4.4 temos a representação esquemática do comportamento do momento magnético médio da camada de interface do AFM com a temperatura. O intervalo de temperatura que vamos trabalhar está entre 80 e 450 K onde o acoplamento de troca dos momentos magnéticos do AFM está enfraquecido por efeito da temperatura e com isso o campo de interface diminui. É válido observar que neste intervalo de temperaturas, abaixo da temperatura de Néel do AFM (NiO), a partícula FM (Fe) ainda está ordenada, pois este intervalo está muito longe da temperatura de Curie do Fe, ficando assim seus momentos magnéticos praticamente inalterados por essa variação de temperatura.

4.2 Histerese térmica

Um problema fundamental de interesse é a histerese térmica. Existem vários estudos recentes de histerese térmica em sistemas magnéticos nanoestruturados. A Histerese térmica nestes sistemas pode acontecer a temperaturas próximas a 200 K podendo ser regulada com campos magnéticos externos modestos. Estudos teóricos e experimentais incluem materiais e sistemas terras raras e metais de transição^{93,94}, trabalho experimental inclui ‘exchange bias’ em estruturas FM-AFM⁹⁵, e trabalho experimental e teórico em ligas e compostos^{96–98}. Recentemente, foram feitos estudos teóricos de histereses térmicas em filmes finos de Dy no intervalo de temperatura de 80 – 179K⁹⁹. A histerese térmica se origina no efeito combinado da forte dependência da magnetização com a temperatura, da anisotropia hexagonal do Dy, e das modificações da fase helicoidal impostas através de efeitos de superfície. A largura do laço de temperatura da histerese térmica pode ser bastante grande, cobrindo o intervalo de temperatura inteiro entre as temperaturas de Curie e Nèel, e pode ser ajustado por campos externos de pequena intensidade.

Neste capítulo nós faremos uma investigação teórica da histerese térmica de uma partícula FM acoplada a um substrato antiferromagnético. Dentro de um intervalo de temperatura acima da temperatura de Nèel do substrato AF, nós calculamos as curvas de aquecimento e resfriamento na presença de um campo externo orientado na direção do campo de interface no sentido oposto. O decaimento térmico desarranja o AFM, quando a temperatura se aproxima do ponto de Nèel, e impõe uma redução no campo de interface efetivo, e conduzem à histerese térmica.

Como nos capítulos anteriores, nós assumimos, em nosso trabalho,¹⁰⁰ que o substrato AFM é não compensado e o plano de interface do AFM consiste de uma superfície uniforme de momentos magnéticos contidos na direção do eixo de anisotropia do AFM. A estrutura magnética da partícula ferromagnética é descrita através de células cúbicas com dimensões menores que o comprimento de troca¹⁰¹. A densidade de energia é determinada por:

$$\begin{aligned}
 E = & \frac{A}{d^2} \sum_j \sum_k (1 - \hat{m}_j \cdot \hat{m}_k) - M_S \vec{H}_{INT} \cdot \sum_i \hat{m}_i - \\
 & M_S \vec{H} \cdot \sum_j \hat{m}_j - K \sum_j (m_j^x)^2 + \\
 & \frac{M_S^2}{2} \sum_j \sum_k \left(\frac{\hat{m}_j \cdot \hat{m}_k}{n_{jk}^3} - \frac{3(\hat{m}_j \cdot \hat{n}_{jk})(\hat{m}_k \cdot \hat{n}_{jk})}{n_{jk}^5} \right)
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Onde, o primeiro termo é a energia de troca entre células vizinhas. O segundo termo é a energia de acoplamento de interface, restrita apenas as células da camada de interface. O campo de interface efetivo, H_{INT} , é proporcional ao valor térmico médio dos momentos magnéticos da interface do AFM, e decai com a temperatura adequadamente. O terceiro termo é a energia Zeeman (campo externo), o quarto termo é a energia de anisotropia e o último termo é a energia de magnetostática. M_S é o magnetização de saturação, \hat{m}_i é a direção do momento magnético da ij -ésima célula e n_{ij} , é a distância entre as células $i - j$ em unidades de tamanho de célula d . Nós usamos $d = 3$ nm (menor que o comprimento de troca do ferro)³⁹.

Consideramos partículas magnéticas de Fe em substrato não compensado de NiO. Para o Fe usamos uma constante de troca $A = 2.5 \times 10^{-11}$ J/m, constante de anisotropia $K = 4.7 \times 10^4$ J/m³, e magnetização de saturação $M_S = 1.7 \times 10^6$ A/m⁷⁶; e a temperatura de Néel para NiO é $T_N = 525$ K¹⁰². O substrato NiO é freqüentemente usado em sistemas tipo “exchange bias”, onde, mesmo a temperaturas altas, os efeitos de relaxamento térmicos requerem algumas horas para terem mudanças apreciáveis produzidas no “exchange bias” efetivo¹⁰³.

Nós usamos um algoritmo de campo local auto-consistente que permite o cálculo das orientações dos momentos magnéticos em cada um das células na partícula magnética^{104–106}. O estado de equilíbrio a cada temperatura é achado buscando uma configuração magnética na qual o torque é zero em todas as células que compõem a partícula ($\vec{m}_i \times \vec{H}_{eff}^i = 0$, onde o campo efetivo é $\vec{H}_{eff} = -(1/M_S)(\partial E / \partial \vec{m}_i)$). Para

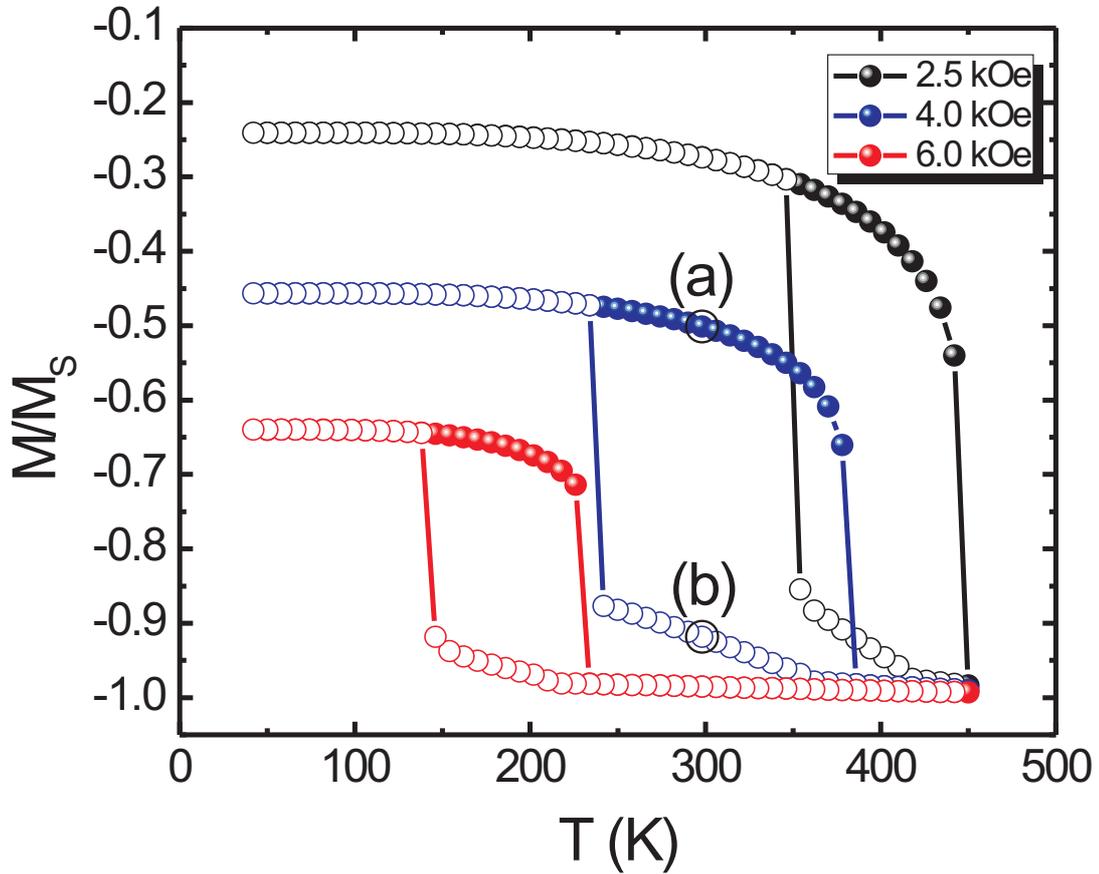


Figura 4.5: Histerese térmica da partícula de Fe($30\text{nm} \times 15\text{nm} \times 15\text{nm}$)/NiO. Ciclo Térmico com campo externo oposto o campo de interface. Aquecimento ao longo de caminho (a) e resfriamento ao longo de caminho (b).

baixa temperatura a intensidade do campo de interface é 16.3 kOe , o mesmo valor do campo de troca intrínseco do ferro que acopla células vizinhas, e decai a zero perto da temperatura de Néel seguindo uma função de Brillouin ($S = 1$).

Na Figura 4.5, mostramos curvas de magnetização ao longo de laços térmicos de uma partícula de Fe com $30\text{nm} \times 15\text{nm} \times 15\text{nm}$. O maior comprimento, 30 nm , está disposto ao longo do eixo $-x$, paralelo ao campo externo aplicado que nesta figura tem três valores definidos 2.5 kOe , 4.0 kOe e 6.0 kOe . O comportamento dos ciclos de histerese é semel-

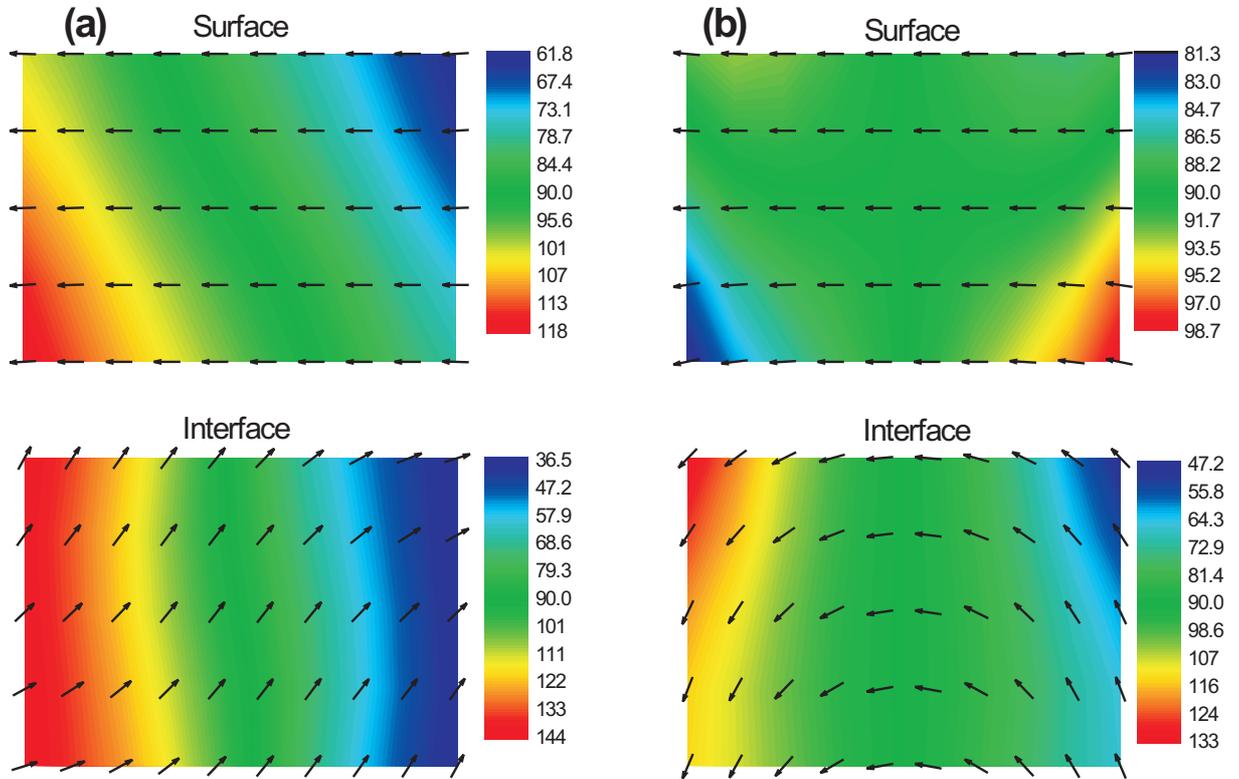


Figura 4.6: Mapas dos momentos magnéticos das células, a temperatura ambiente, das camadas de superfície e de interface, correspondendo aos pontos (a) e (b) indicados na Figura 4.5. As cores do fundo indicam o ângulo entre os momentos magnéticos e o eixo de z .

hante. É notável que as temperaturas de giro da magnetização (“switching”) diminuem quando o campo externo é mais forte.

Para um valor de campo externo $H = 4$ kOe, mostrado na Figura 4.6.(a), em baixas temperaturas (aproximadamente 300 K) há um estado trançado (twisted state), com alinhamento parcial dos momentos magnéticos da partícula com o campo externo. Os momentos magnéticos camada superficial ficam paralelos ao campo externo aplicado, enquanto os da camada de interface mantém um ângulo pequeno em relação ao campo de interface que ainda os domina. Com o aumento da temperatura, a camada de interface

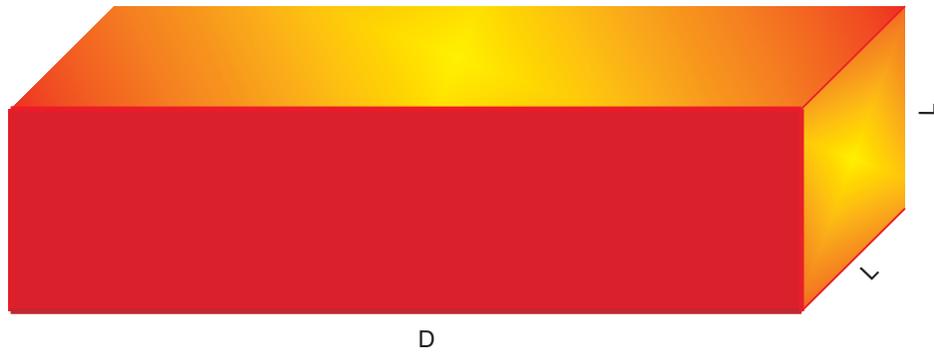


Figura 4.7: Partículas magnéticas mais alongadas na direção do eixo de anisotropia. L corresponde ao valor do lado da face quadrada perpendicular ao eixo de anisotropia da partícula (eixo- x) e D ao lado mais alongado paralelo ao eixo de anisotropia.

gira, gradualmente, na direção do campo externo por causa do enfraquecimento do campo de interface por efeitos térmicos. A uma temperatura $T = 380$ K a partícula magnética gira completamente e alinha-se ao longo do campo externo.

Quando a temperatura é reduzida de seu valor mais alto, os momentos magnéticos da camada de interface organizam em um estado “curling”, como mostrado em Figura 4.6.(b), com a maioria dos momentos magnéticos, no meio da partícula, alinhados ao longo da direção do campo externo e os momentos magnéticos perto dos planos $y - z$ alinham-se perpendiculares à direção do campo externo. Esta fase minimiza a carga de superfície da face $y - z$ e está separado da fase “twisted”, encontrada no processo de aquecimento, por uma barreira de energia de anisotropia. O laço térmico fecha em $T = 239$ K, quando o campo de interface é forte o bastante para superar a barreira de anisotropia.

Um outro ponto investigado foi a histerese térmica de nanopartículas magnéticas mais alongadas, como mostrado na Figura 4.7. Neste tipo de estrutura a magnetização tem mais espaço para se acomodar e com isso o efeitos do campo dipolar são mais intensos sobre a partícula.

Na Figura 4.8 mostramos os laços térmicos de uma partícula de Fe com um comprimento de 30 nm ao longo da direção do eixo de anisotropia uniaxial e três valores de área da face $y - z$ ($12 \text{ nm} \times 12 \text{ nm}$, $15 \text{ nm} \times 15 \text{ nm}$ e $18 \text{ nm} \times 18 \text{ nm}$). Com o aumento das áreas, a anisotropia de forma para a estrutura é reduzida e isto permite os momentos

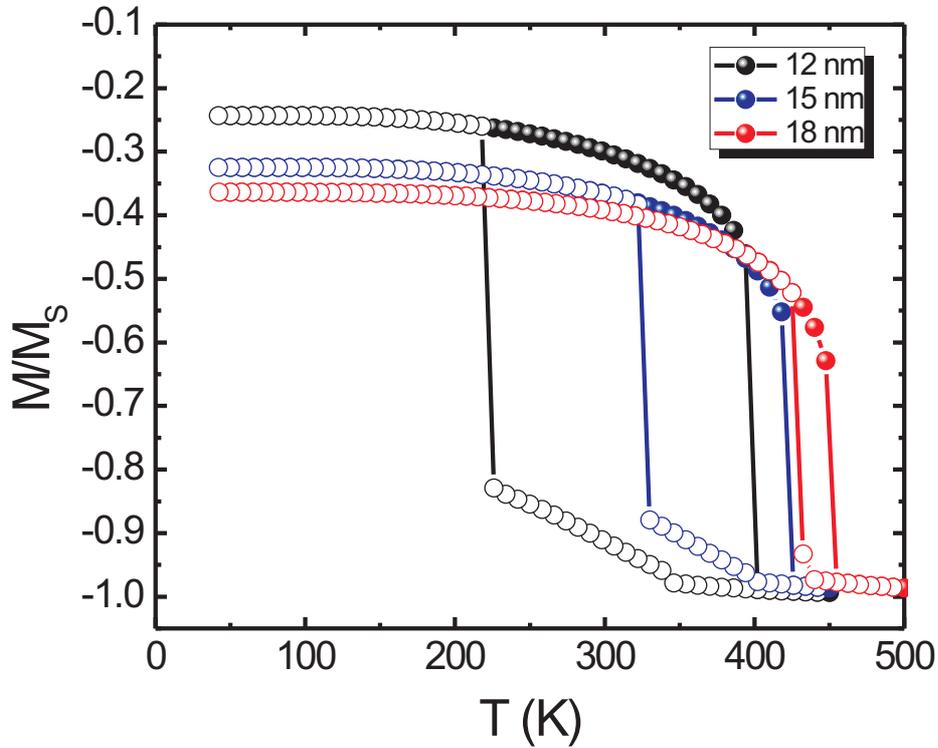


Figura 4.8: Histerese térmica para $H = 3$ kOe de partículas de Fe com dimensões $30 \text{ nm} \times L(\text{nm}) \times L(\text{nm})$. Onde a escala na figura indica os valores de L .

magnéticos da partícula mudem de direção mais facilmente. Observamos também que a largura de temperatura das histereses térmica é significativamente reduzida com o aumento da área da partícula. Este tipo de comportamento onde a histerese torna-se mais larga à medida que a espessura da partícula torna-se menor também foi observado no nosso estudo de histerese magnética, no capítulo 3, seção 3.3.3.

A Figura 4.9 mostra duas possíveis configurações de geometrias para a partícula magnética, $30 \text{ nm} \times 18 \text{ nm} \times 18 \text{ nm}$ (Figura 4.9.(a)) e $30 \text{ nm} \times 12 \text{ nm} \times 12 \text{ nm}$ (Figura 4.9.(b)). Nas suas correspondentes histereses magnéticas notamos o mencionado aumento na histerese, para a partícula com face perpendicular ao eixo de anisotropia de $12 \text{ nm} \times 12 \text{ nm}$ temos grande coercividade apresentando uma largura de laço de 9 kG, enquanto

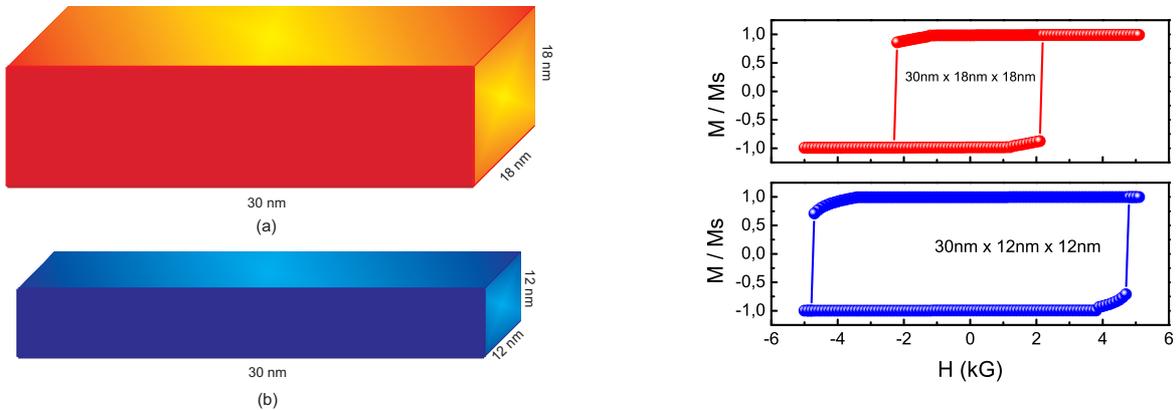


Figura 4.9: Partículas com base de geometria retangular e faces perpendiculares ao eixo de anisotropia quadrada, (a) $30\text{ nm} \times 18\text{ nm} \times 18\text{ nm}$ e (b) $30\text{ nm} \times 12\text{ nm} \times 12\text{ nm}$, com seus respectivos laços de histerese. A partícula de face $12\text{ nm} \times 12\text{ nm}$ apresenta uma maior coercividade.

que para a partícula $18\text{ nm} \times 18\text{ nm}$ temos uma largura de 4 kG . Isto ocorre por causa da anisotropia de forma que é mais intensa na partícula menos espessa.

No caso da histerese térmica, Figura 4.8, representa bem esse fato. As temperaturas de “switching” estão muito mais próximas nas partículas mais espessas, o que demonstra a anisotropia de forma está reduzida e o acoplamento de interface também.

Estudamos também o caso em que as partículas são mais alongadas e largas, tendo uma espessura baixa. Nesta situação observamos que a partícula FM também pode exibir histerese na componente z da magnetização. Na Figura 4.10 mostramos a histerese térmica e mapas de momentos magnéticos que correspondem a uma partícula magnética de Fe com dimensões de $120\text{ nm} \times 60\text{ nm} \times 12\text{ nm}$ em um campo externo de $4kOe$. A componente M_x da magnetização apresenta uma histerese térmica com uma largura de aproximadamente 50 K . As componentes perpendiculares exibem uma histerese larga, correspondendo à formação de vórtices de polaridades opostas nos dois ramos do laço. Os mapas de momentos magnéticos mostram os estados magnéticos nos ramos de (a) aquecimento e (b) resfriamento em uma temperatura de $T = 329\text{ K}$. Estes estados magnéticos têm a mesma configuração no plano diferindo apenas pela polaridade evidenciada pela histerese na componente z , mostrada na Figura 4.10. Estes dois vórtices são estados magnéticos de mesma energia o que mostra que efeitos térmicos podem fazer com que a partícula

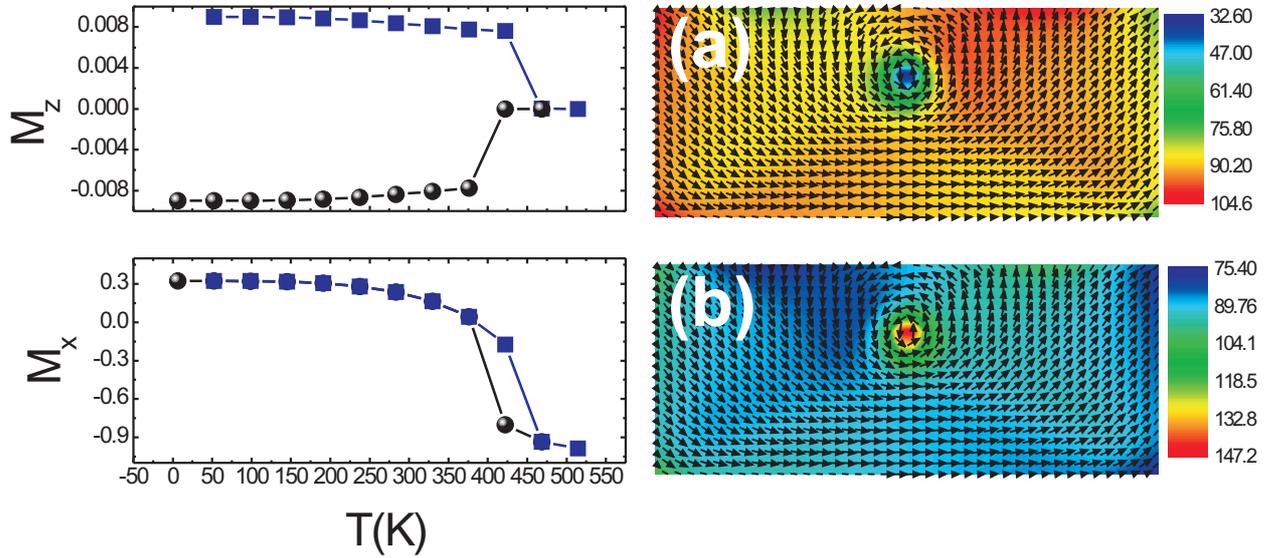


Figura 4.10: Componentes da magnetização nas direções x e z e os respectivos mapas de momentos magnéticos para uma partícula de 120nm x 60nm x 12nm de Fe em um substrato de NiO na presença de um campo externo de 4 kOe.

assuma, por exemplo qualquer um destes estados.

Neste capítulo estudamos o comportamento de partículas FM, de diferentes geometrias, depositadas sobre um substrato AFM não compensado. Observamos que efeitos térmicos podem mudar completamente os possíveis estados magnéticos para estas partículas na presença de um campo externo aplicado e que com pequenos valores de campo externo podemos modificar o estado magnético de uma partícula se ela estiver a uma temperatura em que a ordem do substrato AFM se desconfigure. Um outro aspecto importante é que a configuração geométrica da partícula, como no caso da histerese magnética, pode também afetar a estabilidade da partícula FM.

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho fizemos um estudo de fases magnéticas, histereses magnéticas e térmicas, de partículas ferromagnéticas crescidas sobre um substrato antiferromagnético. A abordagem que utilizamos nesta tese foi de explorar os efeitos que um campo de interface provoca na estabilização dos primeiros planos de momentos magnéticos de uma matriz de partículas magnéticas. Para tal abordagem trabalhamos com uma partícula magnética constituída de ferro³⁹ sobre um substrato antiferromagnético não compensado. Observamos que existem alguns pontos importantes que podem ajudar a explicar alguns aspectos importantes na densidade de armazenamento em meios magnéticos, bem como, na estabilidade das nanopartículas magnéticas que constituem estas matrizes. Neste trabalho fizemos a análise da densidade de carga magnética superficial em uma das faces de uma partícula e a modificação causada na histerese magnética por esta carga de superfície bem como estudo de propriedades magnéticas como “exchange bias”, coercividade e remanência da partícula explorando características geométricas da mesma.

No Capítulo 2 fizemos um estudo relacionando a influência da densidade de carga magnética superficial nas faces de uma partícula magnética estabilizada por um substrato antiferromagnético. Para isso, construímos um formalismo de células (Blocos de momentos magnéticos) para podermos acelerar o procedimento computacional. Utilizando células, com os momentos magnéticos no seu interior orientados em uma mesma direção, a simulação torna-se muito mais rápida. A confiabilidade desta aproximação é garantida quando consideramos que os lados destas células são menores que o comprimento de

troca Equação 2.1. Um ponto abordado neste capítulo de muita importância científica e que norteou a escolha das estruturas nanomagnéticas a serem estudadas nesta tese é o fenômeno do superparamagnetismo⁴⁷.

A investigação fundamentou-se no fato de que precisamos diminuir cada vez mais o tamanho das estruturas magnéticas onde podemos gravar informações lógicas, entretanto existe um limite de tamanhos de partículas que se tornam instáveis quando seu volume diminui muito e sua energia de anisotropia aproxima-se da energia de agitação térmica, tornando esta partícula instável e imprópria para o uso em gravação magnética. Com esse formalismo fizemos o estudo da densidade de carga magnética média em uma das faces da partícula. Esta grandeza é de grande importância nestes sistemas, pois, a leitura da informação armazenada na partícula é feita pela fuga de fluxo magnético nas faces da partícula. Este estudo da densidade de carga magnética média leva em conta a competição entre o efeito estabilizante do campo de interface, regulado por α_J , e o efeito do campo dipolar, regulado por α_D , que tende a diminuir a densidade de cargas magnética nas superfícies da partícula para diminuir a energia magnetostática. Os resultados mostram que na medida em que a partícula torna-se mais alta a densidade de carga magnética diminui.

Mostramos o estudo do comportamento da densidade de carga média variando com a altura z de uma partícula de base quadrada para o campo de interface nulo, curva verde) onde observamos que o comportamento da densidade de carga magnética é decrescente com uma queda mais acentuada para partículas com espessura maiores que 70 nm. Para partículas com um valor mais intenso de campo de interface observamos uma forte mudança no comportamento da carga magnética, onde partículas menos espessas retêm mais a densidade de carga magnética e partículas mais espessa apresentam queda abrupta da mesma indicando um comportamento que é fruto da competição entre duas tendências, o campo de interface alinhar os momentos da interface e campo dipolar tende a diminuir a energia magnetostática. A densidade de carga média de partículas que possuem base retangular, também decrescente só que de forma mais intensa já para partículas de menor espessura. Um resultado muito importante obtido nessa tese é que um campo de inter-

face muito intenso não implica em uma partícula magnética mais estável, se esta partícula tiver uma espessura considerável ela pode reter menos carga que uma partícula menor.

No capítulo 2 também fizemos a apresentação de algumas simulações onde encontramos para as geometrias quadrada e retangular alguns estados que pudemos associar aos resultados encontrados para a densidade de carga magnética. Como também observamos que comportamentos podem assumir a magnetização no interior da partícula para se acomodar diante da competição entre as tendências impostas pelo campo dipolar e o campo de interface. Apresentamos estados de grande interesse tecnológico (estados remanentes) e os estados que efetivamente não tem uma configuração de magnetização favorável a sua aplicabilidade tecnológica (estados não remanentes).

No capítulo 3 apresentamos um estudo sobre a histerese magnética em partículas nanométricas motivados pelo trabalho experimental de J. Nogués e Ivan K. Schuller⁸⁷ que propuseram uma explicação qualitativa para a interação de troca na interface FM/AFM. Os laços da histerese magnética exibem uma assimetria existente devido a um processo de rotação da magnetização no ramo de subida do laço de histerese como mostra a Figura 3.4.

Nossos resultados mostram um comportamento semelhante para partículas magnéticas finas, com espessuras da ordem de dezenas de nanômetros. Também mostramos que partículas com espessuras da ordem de alguns comprimentos de troca apresentam uma coercividade elevada. Este fato tem explicação originada na direção do campo dipolar médio sobre os momentos magnéticos da partícula que aponta na direção do eixo fácil, oposto do que se espera já que sua tendência natural é minimizar a energia magnetostática. Quanto à carga magnética e a remanência estas decrescem bruscamente à medida que as partículas vão ficando mais espessas, pois o maior volume favorece o aparecimento de vórtices que diminuem consideravelmente a intensidade destas grandezas. A mudança de geometria também foi estudada na medida em que escolhemos trabalhar com partículas mais alongadas na direção perpendicular ao eixo fácil da partícula. A maior área favorece a tendência do campo dipolar de diminuir a carga magnética diminuindo a energia magnetostática, com isso coercividade, remanência e carga magnética diminuem conside-

ravelmente.

O capítulo final da tese, capítulo 4, apresentamos um estudo de histerese térmica em dots F/AF. Consideramos uma competição entre o campo de interface e o campo externo aplicado durante o ciclo térmico, aquecimento e resfriamento. Nossos resultados mostram que em um intervalo de temperatura até próximo à temperatura de Néel do substrato AF, foram calculadas curvas de aquecimento e resfriamento na presença de um campo externo orientado na direção do campo de interface no sentido oposto. A diminuição da temperatura diminui a ordem magnética do AFM, em temperaturas próximas do ponto de Néel o campo de interface efetivo fica reduzido e acontece a histerese térmica. Nossas observações nos levam à conclusão de que efeitos térmicos podem mudar completamente os possíveis estados magnéticos para estas partículas na presença de um campo externo aplicado e que com pequenos valores de campo externo podemos modificar o estado magnético de uma partícula se ela estiver a uma temperatura que desordene o substrato AFM. Com isso o aquecimento da partícula onde vai ser feita a gravação pode favorecer a retirada desta partícula de um estado ou a escolha de outro. Outro aspecto importante é que a configuração geométrica da partícula que pode afetar a estabilidade magnética da partícula onde a componente z da magnetização pode também exibir um comportamento histerético.

Apêndice A

Aproximação com Células

A.1 Definição de célula

Levando em conta que a célula c_1 tem momento magnético \vec{S}_1 e a célula c_2 tem momento magnético \vec{S}_2 (Figura A.1), vamos considerar a célula c_1 :

$$l_x = N_x a_0 \quad (\text{A.1})$$

Como a célula é cúbica:

$$V_c = N_x N_y N_z a_0^3 \quad (\text{A.2})$$

logo,

$$V_c = N_T a_0^3 \quad (\text{A.3})$$

O número total de spins é dado por:

$$N_{ST} = 2N_T \quad (\text{A.4})$$

então,

$$\vec{S}_n = 2N_x N_y N_z \vec{s}_n \quad (\text{A.5})$$

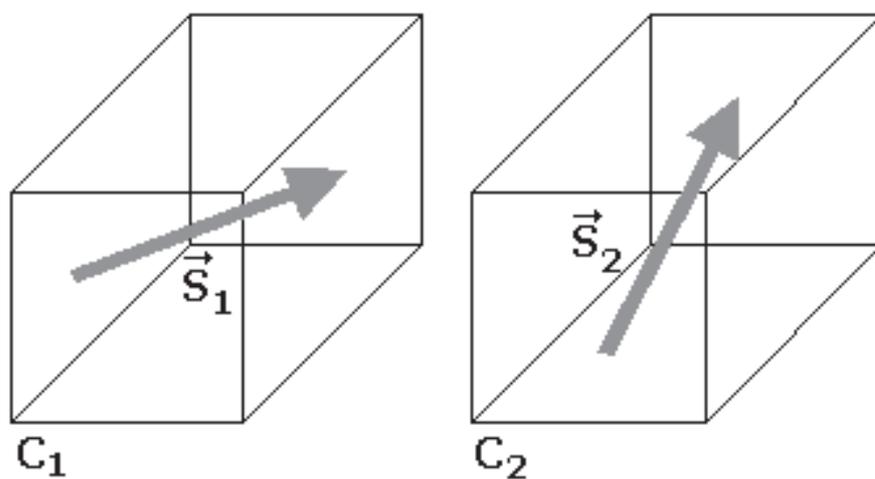


Figura A.1: Duas células c_1 e c_2 , com seus respectivos momentos magneticos.

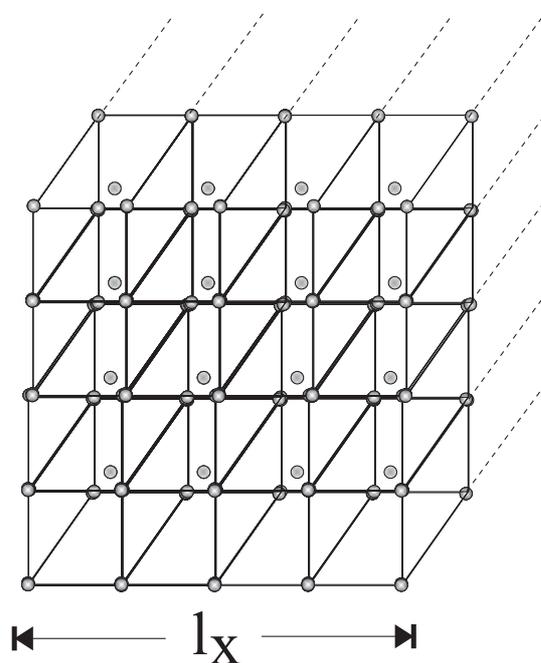
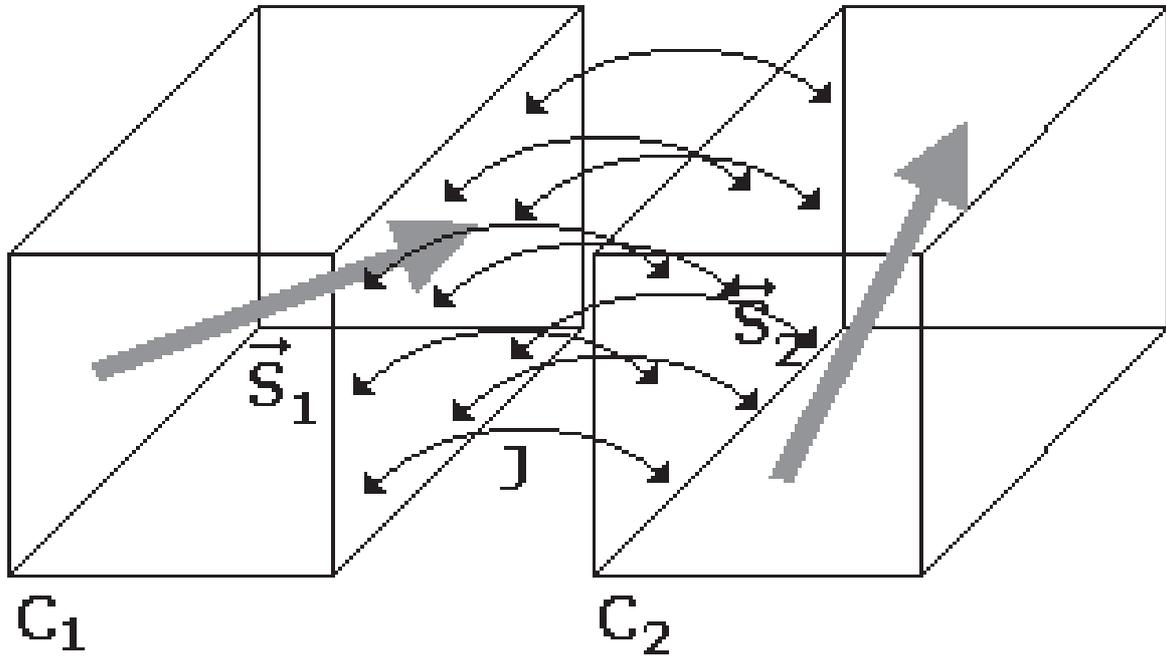


Figura A.2: Estrutura BCC do ferro.


 Figura A.3: Interação de troca entre duas células vizinhas c_1 e c_2 .

A.2 Cálculo das energias

A.2.1 Energia de Troca

Intrinsecamente (Figura A.3) temos:

$$E_{Troca} = N_y N_z J (\vec{s}_n \cdot \vec{s}_{n+1}) \quad (\text{A.6})$$

de A.5 e A.6 temos

$$E_{Troca} = N_y N_z J \left(\frac{\vec{S}_n}{2N_x N_y N_z} \cdot \frac{\vec{S}_{n+1}}{2N_x N_y N_z} \right) \quad (\text{A.7})$$

$$E_{Troca} = -\frac{J}{4N_x^2 N_y N_z} (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1})$$

$$E_{Troca} = -J_{eff} (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}) \quad (\text{A.8})$$

onde,

$$J_{eff} = \frac{J}{4N_x^2 N_y N_z} \quad (\text{A.9})$$

A.2.2 Energia de Anisotropia

$$E_{Anis} = -\frac{K}{2} V_c \cos^2(\theta) \text{sen}^2(\varphi) \quad (\text{A.10})$$

sendo:

$$s_x = s \cos(\theta) \text{sen}(\varphi) \quad (\text{A.11})$$

então:

$$E_{Anis} = -\frac{K}{2} V_c \left(\frac{s_x}{s} \right)^2 \quad (\text{A.12})$$

substituindo A.11 em A.12 temos,

$$E_{Anis} = -\frac{K}{2} V_c \frac{\left(\frac{S_n^x}{2N_x N_y N_z} \right)^2}{s^2}$$

$$E_{Anis} = -\frac{K a_0^3}{8s^2 N_x N_y N_z} (S_n^x)^2$$

$$E_{Anis} = -K_{eff} (S_n^x)^2 \quad (\text{A.13})$$

$$K_{eff} = \frac{K a_0^3}{8s^2 N_x N_y N_z} \quad (\text{A.14})$$

A.2.3 Energia de Interface

A energia de interface é dada por:

$$E_{Int} = -g\mu_B N_x N_y (\vec{s}_n \cdot \vec{H}_J) \quad (\text{A.15})$$

onde

$$\vec{H}_J = H_J \hat{x} \quad (\text{A.16})$$

logo

$$E_{Int} = -g\mu_B N_x N_y \left(\frac{\vec{S}_n}{2N_x N_y N_z} \right) \cdot (H_J \hat{x})$$

$$E_{Int} = \frac{g\mu_B H_J}{2N_z} S_n^x$$

$$E_{Int} = -H_{Int} S_n^x \quad (\text{A.17})$$

$$H_{Int} = -\frac{g\mu_B H_J}{2N_z} \quad (\text{A.18})$$

A.2.4 Energia Dipolar

$$E_{Dip} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3(\vec{\mu}_1 \cdot \vec{r}')(\vec{\mu}_2 \cdot \vec{r}')}{r'^5} - \frac{\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2}{r'^3} \right] \quad (\text{A.19})$$

$$r_x = N_x a_0$$

$$\vec{r}' = r_x \hat{x} + r_y \hat{y} + r_z \hat{z}$$

logo,

$$\vec{r} = N_x a_0 \hat{x} + N_y a_0 \hat{y} + N_z a_0 \hat{z} \quad (\text{A.20})$$

como a célula é cúbica

$$N_x = N_y = N_z \quad (\text{A.21})$$

então,

$$\vec{r}_n = N_x a_0 \hat{r}_n \quad (\text{A.22})$$

logo a Equação A.19 torna-se

$$E_{Dip} = -\frac{g^2 \mu_0 \mu_B^2}{4\pi N_x^3 a_0^3} \left[\frac{3 (\vec{S}_1 \cdot \vec{r}) (\vec{S}_2 \cdot \vec{r})}{r^5} - \frac{\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2}{r^3} \right] \quad (\text{A.23})$$

Resultado compatível com Dieter Sues e Nowak,

$$E_{Dip} = -D \left[\frac{3 (\vec{S}_1 \cdot \vec{r}) (\vec{S}_2 \cdot \vec{r})}{r^5} - \frac{\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2}{r^3} \right] \quad (\text{A.24})$$

$$D = \frac{g^2 \mu_0 \mu_B^2}{4\pi N_x^3 a_0^3} \quad (\text{A.25})$$

A.2.5 Energia Total

Para uma célula a energia é dada por:

$$E_{Total} = E_{Troca} + E_{Anis} + E_{Int} + E_{Dip} \quad (\text{A.26})$$

$$E_{Total} = -J_{eff} (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}) - K_{eff} (S_n^x)^2 - H_{Int} S_n^x - D \left[\frac{3 (\vec{S}_1 \cdot \hat{r}) (\vec{S}_2 \cdot \hat{r})}{r^5} - \frac{\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2}{r^3} \right]$$

onde,

$$\begin{aligned}
 J_{eff} &= \frac{J}{4N_x^2 N_y N_z}; K_{eff} = \frac{K a_0^3}{8s^2 N_x N_y N_z}; \\
 H_{Int} &= -\frac{g\mu_B H_J}{2N_z}; D = \frac{g^2 \mu_0 \mu_B^2}{4\pi N_x^3 a_0^3}
 \end{aligned}$$

A.2.6 Cálculo do Campo Efetivo

$$\vec{H}_{eff}^n = -\frac{1}{g\mu_B} \frac{\partial E_{Total}}{\partial \vec{S}_n} \quad (A.27)$$

logo:

$$H_{eff}^{x,n} = -\frac{1}{g\mu_B} \frac{\partial E_{Total}}{\partial S_n^x} \quad (A.28)$$

$$\begin{aligned}
 H_{eff}^{x,n} &= \frac{J_{eff}}{g\mu_B} \{ S_{i+1,j,k} \text{sen} \varphi_{i+1,j,k} \cos \theta_{i+1,j,k} \\
 &+ S_{i,j+1,k} \text{sen} \varphi_{i,j+1,k} \cos \theta_{i,j+1,k} \\
 &+ S_{i,j,k+1} \text{sen} \varphi_{i,j,k+1} \cos \theta_{i,j,k+1} \} \\
 &+ \frac{K_{eff}}{g\mu_B} \{ S_{i,j,k} \text{sen} \varphi_{i,j,k} \cos \theta_{i,j,k} \} \\
 &+ \frac{H_{Int}}{g\mu_B} \\
 &+ \frac{D}{g\mu_B} \sum_{i_0=1}^{N_x} \sum_{j_0=1}^{N_y} \sum_{k_0=1}^{N_z} \{ 3[S_{i_0,j_0,k_0} \text{sen} \varphi_{i_0,j_0,k_0} \cos \theta_{i_0,j_0,k_0} (i - i_0) \\
 &+ S_{i_0,j_0,k_0} \text{sen} \varphi_{i_0,j_0,k_0} \cos \theta_{i_0,j_0,k_0} (j - j_0) \\
 &+ S_{i_0,j_0,k_0} \cos \varphi_{i_0,j_0,k_0} (k - k_0)] \left[\frac{(i - i_0)}{((i - i_0) + (j - j_0) + (k - k_0))^{\frac{5}{2}}} \right] \\
 &- \frac{S_{i_0,j_0,k_0} \text{sen} \varphi_{i_0,j_0,k_0} \cos \theta_{i_0,j_0,k_0}}{((i - i_0) + (j - j_0) + (k - k_0))^{\frac{3}{2}}} \}
 \end{aligned}$$

$$H_{eff}^{y,n} = -\frac{1}{g\mu_B} \frac{\partial E_{Total}}{\partial S_n^y} \quad (A.29)$$

$$\begin{aligned}
 H_{eff}^{y,n} = & \frac{J_{eff}}{g\mu_B} \{ S_{i+1,j,k} \text{sen} \varphi_{i+1,j,k} \text{sen} \theta_{i+1,j,k} \\
 & + S_{i,j+1,k} \text{sen} \varphi_{i,j+1,k} \text{sen} \theta_{i,j+1,k} \\
 & + S_{i,j,k+1} \text{sen} \varphi_{i,j,k+1} \text{sen} \theta_{i,j,k+1} \} \\
 & + \frac{D}{g\mu_B} \sum_{i_0=1}^{N_x} \sum_{j_0=1}^{N_y} \sum_{k_0=1}^{N_z} \{ 3 [S_{i_0,j_0,k_0} \text{sen} \varphi_{i_0,j_0,k_0} \cos \theta_{i_0,j_0,k_0} (i - i_0) \\
 & + S_{i_0,j_0,k_0} \text{sen} \varphi_{i_0,j_0,k_0} \text{sen} \theta_{i_0,j_0,k_0} (j - j_0) \\
 & + S_{i_0,j_0,k_0} \cos \varphi_{i_0,j_0,k_0} (k - k_0)] \left[\frac{(j - j_0)}{((i - i_0) + (j - j_0) + (k - k_0))^{\frac{5}{2}}} \right] \\
 & - \frac{S_{i_0,j_0,k_0} \text{sen} \varphi_{i_0,j_0,k_0} \text{sen} \theta_{i_0,j_0,k_0}}{((i - i_0) + (j - j_0) + (k - k_0))^{\frac{3}{2}}} \}
 \end{aligned}$$

componente z

$$H_{eff}^{z,n} = - \frac{1}{g\mu_B} \frac{\partial E_{Total}}{\partial S_n^x} \tag{A.30}$$

$$\begin{aligned}
 H_{eff}^{z,n} = & \frac{J_{eff}}{g\mu_B} \{ S_{i+1,j,k} \cos \varphi_{i+1,j,k} \\
 & + S_{i,j+1,k} \cos \varphi_{i,j+1,k} \\
 & + S_{i,j,k+1} \cos \varphi_{i,j,k+1} \} \\
 & + \frac{D}{g\mu_B} \sum_{i_0=1}^{N_x} \sum_{j_0=1}^{N_y} \sum_{k_0=1}^{N_z} \{ 3 [S_{i_0,j_0,k_0} \text{sen} \varphi_{i_0,j_0,k_0} \cos \theta_{i_0,j_0,k_0} (i - i_0) \\
 & + S_{i_0,j_0,k_0} \text{sen} \varphi_{i_0,j_0,k_0} \text{sen} \theta_{i_0,j_0,k_0} (j - j_0) \\
 & + S_{i_0,j_0,k_0} \cos \varphi_{i_0,j_0,k_0} (k - k_0)] \left[\frac{(k - k_0)}{((i - i_0) + (j - j_0) + (k - k_0))^{\frac{5}{2}}} \right] \\
 & - \frac{S_{i_0,j_0,k_0} \cos \varphi_{i_0,j_0,k_0}}{((i - i_0) + (j - j_0) + (k - k_0))^{\frac{3}{2}}} \}
 \end{aligned}$$

A.2.7 No programa

O campo de troca é dado por:

$$H_{Troca} = \frac{6J_{eff}S}{g\mu_B} \quad (A.31)$$

$$EXCH = \frac{\frac{J_{eff}S}{g\mu_B}}{\frac{6J_{eff}S}{g\mu_B}} = \frac{1}{6} \quad (A.32)$$

$$\begin{aligned} ALFA &= \frac{\frac{K_{eff}}{g\mu_B}}{\frac{6J_{eff}S}{g\mu_B}} = \frac{\left[\frac{\frac{Ka_0^3}{8s^2N_xN_yN_z}}{g\mu_B} \right]}{\left[\frac{6\left(\frac{J}{4N_x^2N_yN_z}\right)S}{g\mu_B} \right]} \\ &= \left[\frac{\frac{Ka_0^3}{8s^2N_xN_yN_z}}{g\mu_B} \right] \left[\frac{g\mu_B}{6\left(\frac{J}{4N_x^2N_yN_z}\right)S} \right] \\ &= \left[\frac{Ka_0^3}{g\mu_B 4s^2N_xN_yN_z} \right] \left[\frac{g\mu_B 4N_x^2N_yN_z}{6JS} \right] \\ &= \left[\frac{Ka_0^3}{g\mu_B 4s^2N_xN_yN_z} \right] \left[\frac{g\mu_B 4N_x^2N_yN_z}{6JS} \right] \end{aligned}$$

logo,

$$ALFA = \left[\frac{Ka_0^3N_x}{6Js^2} \right] \quad (A.33)$$

$$\begin{aligned} HJ &= \frac{\frac{H_{Int}S}{g\mu_B}}{\frac{6J_{eff}S}{g\mu_B}} = \frac{\frac{g\mu_B H_J S}{2N_z}}{6\frac{J}{4N_x^2N_yN_z}} \\ HJ &= \frac{g\mu_B H_J S}{2N_z} \frac{4N_x^2N_yN_z}{6JS} \end{aligned}$$

$$HJ = \frac{g\mu_B H_J N_x^2 N_y}{3J} \quad (A.34)$$

$$ALFAD = \frac{\frac{D}{g\mu_B}}{\frac{6J_{eff}S}{g\mu_B}} = \frac{\frac{\frac{g^2\mu_0\mu_B^2}{4\pi N_x^3\alpha_0^3}}{g\mu_B}}{\frac{6JS}{4N_x^2N_yN_z g\mu_B}}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\frac{g^2 \mu_0 \mu_B^2}{4\pi N_x^3 a_0^3 g \mu_B}}{\frac{6JS}{4N_x^2 N_y N_z g \mu_B}} = \frac{g^2 \mu_0 \mu_B^2}{4\pi N_x^3 a_0^3 g \mu_B} \frac{4N_x^2 N_y N_z g \mu_B}{6JS} \\
 &= \frac{g^2 \mu_0 \mu_B^2}{6\pi J a_0^3} \frac{N_y N_z}{N_x}
 \end{aligned}$$

$$ALFAD == \frac{g^2 \mu_0 \mu_B^2}{6\pi J a_0^3} \frac{N_y N_z}{N_x} \quad (A.35)$$

Considerações:

Temos que considerar uma célula com uma dimensão lateral menor que o comprimento de troca l_{Troca} :

$$l_{Troca} = 10, 2nm = 1.02 \times 10^{-8}m \quad (A.36)$$

Considerando o parâmetro de rede do Ferro $a_0 = 2.87 \times 10^{-10}m$ então o número máximo de espaços na lateral x de uma célula será:

$$N_x = \frac{l_{Troca}}{a_0} = \frac{1.02 \times 10^{-8}m}{2.87 \times 10^{-10}m} \quad (A.37)$$

$$N_x \cong 35 \quad (A.38)$$

Sendo cúbicas as células temos:

$$N_x = N_y = N_z = 35$$

$$g = 2$$

$$\mu_B = 9.274015 \times 10^{-24} \frac{J}{T}$$

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \frac{Tm}{A}$$

$$A = 2.11 \times 10^{-11} \frac{J}{m}$$

Sendo,

$$\begin{aligned}
 J &= \frac{2a_0 A}{s^2} \\
 J &= \frac{2 \times 2.87 \times 10^{-10} m \cdot 2.11 \times 10^{-11} \frac{J}{m}}{(2.2)^2} \\
 J &= \frac{1.21 \times 10^{-20}}{4.84} J \\
 J &= 2.50 \times 10^{-21} J
 \end{aligned}$$

$$EXCH = \frac{\frac{J_{eff} S}{g\mu_B}}{\frac{6J_{eff} S}{g\mu_B}} = \frac{1}{6} \quad (A.39)$$

$$\begin{aligned}
 ALFA &= \frac{4.76 \times 10^5 \frac{J}{m^3} (2.87 \times 10^{-10} m)^3}{6 (2.50 \times 10^{-21} J) (2.2)^2} 35 \\
 ALFA &= \frac{3.94 \times 10^{-22}}{7.26 \times 10^{-20}} \implies ALFA = 0.005415
 \end{aligned}$$

HJ é "livre "

$$\begin{aligned}
 HJ &= \frac{2 \times 9.274015 \times 10^{-24} \frac{J}{T}}{3 \times 2.50 \times 10^{-21} J} 35^3 H_J \\
 HJ &= \frac{1854803 \times 10^{-23} \frac{1}{T}}{7.5 \times 10^{-21}} \times 42875 \times H_J \\
 HJ &= 5.76 \times 10^{-8} \frac{1}{T} \times H_J
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 ALFAD &= \frac{g\mu_0\mu_B^2 N_y N_z}{6\pi J a_0^3 N_x} \\
 ALFAD &= \frac{2^2 \left(4\pi \times 10^{-7} \frac{Tm}{A}\right) \left(9.274015 \times 10^{-24} \frac{J}{T}\right)^2}{6\pi \times 2.50 \times 10^{-21} J (2.87 \times 10^{-10} m)^3} \frac{35 \times 35}{35} \\
 ALFAD &= \frac{16 \times 10^{-7} \frac{Tm}{A} 8.600725 \times 10^{-47} \frac{J^2}{T^2}}{6 \times 2.50 \times 10^{-21} J \times 2.87 \times 10^{-10} m^3} 35 \\
 ALFAD &= \frac{16 \times 10^{-7} \frac{Tm}{A} 8.600725 \times 10^{-47} \frac{J^2}{T^2}}{6 \times 2.50 \times 10^{-21} J \times 2.363990 \times 10^{-29} m^3} 35
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}ALFAD &= \frac{1.373118 \times 10^{-52} \frac{m J^2}{A T}}{3.545985 \times 10^{-49} J m^3} \times 35 \\ALFAD &= 3.880776 \times 10^{-4} \frac{1}{A m^2} \frac{J}{T} \times 35 \\ALFAD &= 0.01358 \frac{1}{A m^2} \frac{J}{T} \\&\quad \left[\frac{1}{A m^2} = \frac{J}{T} \right] \\ALFAD &= 0.01358\end{aligned}$$

Apêndice B

Modificação no Parâmetro de Troca

B.1 A interação da troca

O Hamiltoniano de troca de um átomo dado i com seus vizinhos é dado por

$$H = - \sum_j J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (\text{B.1})$$

onde a soma é feita sobre os primeiros vizinhos do átomo i . Se a integral da troca for isotrópica J_e , nós temos

$$H = -J_e \sum_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (\text{B.2})$$

Finalmente, o Hamiltoniano de um cristal inteiro é encontrado somando a equação B.2 sobre todos os átomos do cristal; isto é,

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (\text{B.3})$$

Em determinados problemas, particularmente na teoria de domínios, é apropriado e conveniente considerar os spins da Equação B.2 como vetores clássicos. Esta aproximação é razoavelmente válida quando spins vizinhos têm ângulos pequenos um em relação ao outro. Logo, a Equação B.2 pode ser reescrita como

$$H = E = -J_e S^2 \sum_j \cos \phi_{ij} \quad (\text{B.4})$$

onde ϕ_{ij} é o ângulo entre os vetores clássicos momentum angular de spin.

Se o ângulo entre spins vizinhos for muito pequeno, podemos fazer à aproximação:

$$\cos \phi_{ij} = 1 - \frac{\phi_{ij}^2}{2} \quad (\text{B.5})$$

A parte variável da energia da troca é dada então perto

$$E = -\frac{J_e S^2}{2} \sum_j \phi_{ij}^2 \quad (\text{B.6})$$

A equação B.4 é expressa frequentemente de outra maneira. Tomando \hat{u}_i e \hat{u}_j como sendo vetores unitários paralelos aos vetores clássicos de spin dos átomos adjacentes i e j , e tomando

$$\vec{r}_{ij} = x_{ij}\hat{i} + y_{ij}\hat{j} + z_{ij}\hat{k} \quad (\text{B.7})$$

como sendo o vetor do deslocamento entre estes átomos, Figura B.1

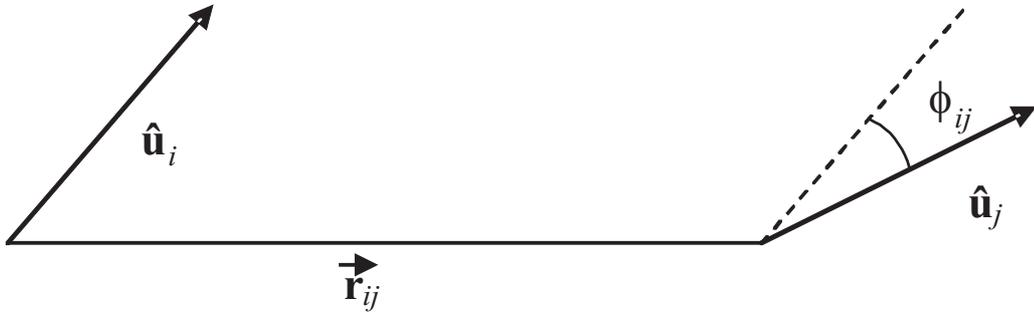


Figura B.1: Representação de spins vizinhos separados por uma distância r_{ij} .

$$\cos \phi_{ij} = \hat{u}_i \cdot \hat{u}_j = \alpha_{1i}\alpha_{1j} + \alpha_{2i}\alpha_{2j} + \alpha_{3i}\alpha_{3j} \quad (\text{B.8})$$

onde α_1 , α_2 , e α_3 são os co-senos diretores de um vetor unitário relativo aos eixos \hat{x} , \hat{y} , e \hat{z} respectivamente. Desde o ângulo entre os vetores unitários \hat{u}_i e \hat{u}_j é pequeno, os

co-senos diretores de \hat{u}_j podem ser expandidos em uma série de Taylor. Por exemplo, o primeiro termo da Equação B.8 é

$$\alpha_{1i}\alpha_{1j} = \alpha_{1i} \left(\alpha_{1i} + \vec{r}_{ij} \nabla \alpha_{1i} + \frac{1}{2} (\vec{r}_{ij} \nabla)^2 \alpha_{1j} + \dots \right) \quad (\text{B.9})$$

Em seguida, a soma é feita sobre os primeiros vizinhos j . Para o cristal cúbico, os termos como $\sum_j \vec{r}_{ij} \nabla \alpha_{1i}$ e os termos cruzados como $\sum_j \frac{1}{2} (\vec{r}_{ij} \nabla)^2 \alpha_{1j}$, tipo, $\sum x_{ij} y_{ij} \left(\frac{\partial^2 \alpha_{1j}}{\partial x_{ij} \partial y_{ij}} \right)$ são nulos por causa da simetria do cristal. Temos então,

$$\begin{aligned} \sum_j \cos \phi_{ij} &= z + \frac{1}{2} \alpha_{1j} \frac{\partial^2 \alpha_{1j}}{\partial x_{ij}^2} \sum x_{ij}^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha_{1j} \frac{\partial^2 \alpha_{1j}}{\partial y_{ij}^2} \sum y_{ij}^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha_{1j} \frac{\partial^2 \alpha_{1j}}{\partial z_{ij}^2} \sum z_{ij}^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha_{2j} \frac{\partial^2 \alpha_{2j}}{\partial x_{ij}^2} \sum x_{ij}^2 \\ &\quad + \dots \end{aligned}$$

desde que,

$$\sum_j x_{ij}^2 = \sum_j y_{ij}^2 = \sum_j z_{ij}^2 = \frac{1}{3} \sum_j r_{ij}^2 \quad (\text{B.10})$$

obtemos,

$$\sum_j \cos \phi_{ij} = z + \frac{1}{6} \sum_j r_{ij}^2 \hat{u}_i \cdot \nabla^2 \hat{u}_i \quad (\text{B.11})$$

considerando a parte variável da energia, a energia de troca é dada por,

$$H = E = -\frac{J_e S^2}{6} \sum_j r_{ij}^2 \hat{u}_i \cdot \nabla^2 \hat{u}_i \quad (\text{B.12})$$

mas,

$$\nabla^2 (\hat{u}_i \cdot \hat{u}_i) = 2 \left[(\nabla \alpha_1)^2 + (\nabla \alpha_2)^2 + (\nabla \alpha_3)^2 \right] + 2 (\hat{u}_i \nabla^2 \hat{u}_i) = 0 \quad (\text{B.13})$$

$$\hat{u}_i \nabla^2 \hat{u}_i = - [(\nabla \alpha_1)^2 + (\nabla \alpha_2)^2 + (\nabla \alpha_3)^2] \quad (\text{B.14})$$

assim,

$$H = E = \frac{J_e S^2}{6} \sum_j r_{ij}^2 [(\nabla \alpha_1)^2 + (\nabla \alpha_2)^2 + (\nabla \alpha_3)^2] \quad (\text{B.15})$$

para uma estrutura cúbica, tipo corpo centrado (bcc) ou (fcc) temos

$$\sum_j r_{ij}^2 = 6a_0^2 \quad (\text{B.16})$$

então finalmente temos

$$\frac{E}{a^3} = \frac{A}{2} [(\nabla \alpha_1)^2 + (\nabla \alpha_2)^2 + (\nabla \alpha_3)^2] \quad (\text{B.17})$$

onde

$$A = \frac{2J_e S^2}{a} \quad (\text{B.18})$$

A energia de troca no cálculo micromagnético para uma partícula cúbica de lado D que tem N pequenas partículas todas com um lado δ , ou seja, $D = N\delta$ pode ser reescrita como,

$$E = \sum_{mnk} \frac{A}{2} \left[\left(\frac{d\alpha_{1m}}{dx} \right)^2 + \left(\frac{d\alpha_{2m}}{dx} \right)^2 + \left(\frac{d\alpha_{3m}}{dx} \right)^2 + \dots \right] D^3 \quad (\text{B.19})$$

os primeiros tres termos são:

$$\begin{aligned} & \sum_{mnk} \left[\left(\frac{d\alpha_{1m}}{dx} \right)^2 + \left(\frac{d\alpha_{2m}}{dx} \right)^2 + \left(\frac{d\alpha_{3m}}{dx} \right)^2 \right] = \\ & = \sum_{mnk} \left[\left(\frac{\alpha_{1m+1,n,k} - \alpha_{1m,n,k}}{\delta} \right)^2 \right. \\ & \quad + \left(\frac{\alpha_{2m+1,n,k} - \alpha_{2m,n,k}}{\delta} \right)^2 \\ & \quad \left. + \left(\frac{\alpha_{3m+1,n,k} - \alpha_{3m,n,k}}{\delta} \right)^2 \right] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{\delta^2} \sum_{mnk} [\alpha_{1m+1,n,k}^2 - 2\alpha_{1m+1,n,k}\alpha_{1m,n,k} + \alpha_{1m,n,k}^2 \\
 &\quad + \alpha_{2m+1,n,k}^2 - 2\alpha_{2m+1,n,k}\alpha_{2m,n,k} + \alpha_{2m,n,k}^2 \\
 &\quad + \alpha_{3m+1,n,k}^2 - 2\alpha_{3m+1,n,k}\alpha_{1m,n,k} + \alpha_{3m,n,k}^2]
 \end{aligned}$$

sendo que

$$= \sum_{ijk} [\alpha_{i,j,k}^2] = \frac{1}{3} \tag{B.20}$$

assim podemos reescrever a equação B.19 como,

$$\frac{E}{D^3} = \frac{A}{\delta^2} \sum_{ij} [1 - \hat{u}_i \cdot \hat{u}_j] \tag{B.21}$$

Bibliografia

- ¹ Jackson J. David, *Classical Eletrodynamics, Third Edition* (John Wiley and Sons Ltd, ADDRESS, 1998).
- ² J. R. Reitz e F. J. Milford., *Fundamentos da Teoria Eletromagnética*, Vol. 1 of 2 (Addison-Wesley, Rio de Janeiro, 1982).
- ³ Steve Schoenherr, <http://history.acusd.edu/gen/recording/notes.html>origins (2003).
- ⁴ Finn Jorgensen, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **193**, 17 (1999).
- ⁵ T. Noyes e W. E. Dickinson, *IBM J. Res. Develop.* **44**, 16 (2000).
- ⁶ R. M. White, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **226-230**, 2042 (2001).
- ⁷ M. N. Baibich, J. M. Broto e A. Fert et. al., *Physical Review Letters* **61**, 24722475 (1988).
- ⁸ J.I. Martín, J. Nogués, Kai Liu, J.L. Vicente e Ivan K. Schuller, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **256**, 449501 (2003).
- ⁹ S. Y. Chou, *Proceedings of the IEEE* **85**, 652 (1997).
- ¹⁰ M. Farhoud, Henry I. Smith, M. Hwang e C. A. Rossa, *Journal of Applied Physics* **87**, 5120 (2000).
- ¹¹ F. Rousseaux, D. Decanini, , F. Carcenac, E. Cambril, M. F. Ravet, C. Chappert, N. Bardou, B. Bartenlian e P. Veillet, *Journal of Vacuum Science and Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* **13**, 2787 (1995).

- ¹² Linshu Kong, Lei Zhuang e Stephen Y. Chou, IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS **33**, 3019 (1997).
- ¹³ S. Matsui, Proceedings of the IEEE **85**, 629 (1997).
- ¹⁴ K. Liu, MRSBULLETIN 530 (2003).
- ¹⁵ Chang-Peng Lia, Igor V. Roshchin, Xavier Batlle, Michel Viret, Frédéric Ott e Ivan K. Schuller, JOURNAL OF APPLIED PHYSICS **100**, 074318 (2006).
- ¹⁶ Kai Liu, J. Nogue's, C. Leighton, H. Masuda, K. Nishio, I. V. Roshchin e Ivan K. Schuller, APPLIED PHYSICS LETTERS **81**, 4434 (2002).
- ¹⁷ Zoltan Racz, Jianli He, Srivatsan Srinivasan, Wei Zhao, Alan Seabaugh, Keping Han, Paul Ruchhoeft e Jack Wolfe, Journal of Vacuum Science and Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures **22**, 74 (2004).
- ¹⁸ J. D. Livingston e C. P. Bean, Journal of Applied Physics **30**, S318 (1959).
- ¹⁹ Günter Reiss e Andreas Hütten, Nature Materials, News and Views **4**, 725726 (2005).
- ²⁰ Andreas Moser, Kentaro Takano, David T Margulies, Manfred Albrecht, Yoshiaki Sonobe, Yoshihiro Ikeda, Shouheng Sun² e Eric E Fullerton, JOURNAL OF PHYSICS D: APPLIED PHYSICS **35**, R157R167 (2002).
- ²¹ B D Terris e T Thomson, JOURNAL OF PHYSICS D: APPLIED PHYSICS **38**, R199R222 (2005).
- ²² M. Albrecht, C.T. Rettner, T. Thomson, G.M. McClelland, M.W. Hart, S. Anders, M.E. Best e B.D. Terris, Joint NAPMRC 2003. Digest of Technical Papers, Perpendicular Magnetic Recording Conference 2003 (2003).
- ²³ Margriet J. Van Bael et. al., Physica C **332**, 12 (2000).
- ²⁴ L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Mechanics, Course of Theoretical Physics*, 3 ed. (Butterworth-Heinenann, ADDRESS, 1976), Vol. 1.

- ²⁵ P.L.M. de Maupertuis, *Accord de différentes lois de la nature qui avaient jusqu'ici paru incompatibles* (Mém. As. Sc. Paris, ADDRESS, 1744).
- ²⁶ P.L.M. de Maupertuis, *Le lois de mouvement et du repos, déduites d'un principe de métaphysique* (Mém. Ac. Berlin, ADDRESS, 1746).
- ²⁷ Herbert Goldstein, Charles P. Poole e John L. Safko, *Classical Mechanics* (Prentice Hall, ADDRESS, 2002).
- ²⁸ J.B. Marion e S.T. Thornton, *Classical Dynamics of Particles and Systems*, 5a ed. (Saunders College Publishing, ADDRESS, 2004).
- ²⁹ A. M. Portis, *Eletromagnetic Field, Sources and Media* (John Wiley Sons, New York, 1978).
- ³⁰ Ashcroft Neil W e David N. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishers, New York, 1976).
- ³¹ C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley Sons, New York, 1971).
- ³² A. H. Morrish, *Principles of Magnetism* (John Wiley Sons, Huntington, 1965).
- ³³ C. Binns, M. J. Maher, Q. A. Pankhurst, D. Kechrakos e K. N. Trohidou, *Physical Review B* **66**, 1 (2002).
- ³⁴ G. Bertotti, *Hysteresis in Magnetism for Physicists, Material Scientists, and Engineers* (Academic Press, San Diego, 1998).
- ³⁵ Charles Kittel, *Rev. Mod. Phys.* **21**, 541 (1949).
- ³⁶ G. Burns, *Solid State Physics* (Academic Press, Orlando, 1985).
- ³⁷ L. Néel, *Ann. Geophys* **5**, (1949).
- ³⁸ L. Néel, *C. R. Acad. Science* **228**, (1949).

- ³⁹ O. Fruchart, M. Klaua, J. Barthel e J. Kirschner, *Physical Review Letters* **83**, 2769 (1999).
- ⁴⁰ Craik D.J., *Magnetism: Principles and applications/ Derek Craik* (John Wiley and Sons Ltd, Great Britain, 1995).
- ⁴¹ B. D. Cullity, *Introduction to Magnetic Materials*, 2 nd ed. (Addison-Wesley Publishing, California, 1975).
- ⁴² Dennis E. Spetiotis, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **193**, 29 (1999).
- ⁴³ Fujitsu, <http://www.fujitsu.com/us/services/computing/storage/hdd/> (Acesso: 08/01/2007).
- ⁴⁴ Hitach, <http://www.hitachigst.com/portal/site/en/menuitem.1f7b81d26c496489760062f6aac4f0a0/> (Acesso: 08/01/2007).
- ⁴⁵ Samsung, <http://www.samsung.com/Products/HardDiskDrive/index.htm> (Acesso: 08/01/2007).
- ⁴⁶ Seagate, <http://www.seagate.com/www/en-us/> (Acesso: 08/01/2007).
- ⁴⁷ D. Goll, G. Schütz e H. Kronmüller, *Physical Review B* **67**, (2003).
- ⁴⁸ Dieter Weller, Andreas Moser, Liesl Folks, Margaret E. Best, Wen Lee, Mike F. Toney, M. Schwickert, Jan-Ulrich Thiele e Mary F. Doerner, *IEEE Transactions on Magnetism* **36**, (2000).
- ⁴⁹ S. Iwasaki, *IEEE Transactions on Magnetism* **20**, (1984).
- ⁵⁰ J. P. Wang, Y. Y. Zou, C. H. Hee, T. C. Chong e Y. F. Zheng, *IEEE Transactions on Magnetism* **39**, 1930 (2003).
- ⁵¹ Roy D. Cideciyan, Evangelos Eleftheriou e Thomas Mittelholzer, *IEEE Transactions on Magnetism* **38**, 1698 (2002).

- ⁵² A. Hubert e R.Schäfer, *Magnetic Domains* (Springer, Berlin, 1998).
- ⁵³ L. Torres, L. Lopez Dias, E. Moro, C. de Francisco e O Alejos, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **226-230**, 1242 (2001).
- ⁵⁴ M. Maicas, M. Rodríguez, E. López, M.C. Sánchez, C. Aroca e P. Sánchez, *Computational Materials Science* **25**, 525530 (2002).
- ⁵⁵ A.E. LaBonte, *JOURNAL OF APPLIED PHYSICS* **40**, 2450 ((1969)).
- ⁵⁶ R.P. Cowburn, *J. Phys. D* **33**, R1R16 (2000).
- ⁵⁷ A. S. Arrott, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **215-216**, 6 (2000).
- ⁵⁸ J. A. Ewing, *Magnetic induction in Iron and Orther Metals* (The Electrician, Printing an Publishing Company, London, 1892).
- ⁵⁹ Alex Hubert e Rudolf Schäfer, *Magnetic Domains. The analysis of Magnetic Microstructures with 400 figures.* (Spring, Berlin, 1998).
- ⁶⁰ LLG Micromagnetics *SimulatorTM* developed by Prof. Michael Scheinfein, <http://llgmicro.home.mindspring.com/index.htm> (Acesso: 24/01/2007).
- ⁶¹ S. Sindhu, M.A.M. Haast, K. Ramst.ock, L. Abelmann e J.C. Lodder, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **238**, 246251 (2002).
- ⁶² V. Raposo, J.M. Garcia, J.M. González e M. Vázquez, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **222**, 227 (2000).
- ⁶³ Kai Liu et. al., *Physical Review B* **63**, 060403 (2002).
- ⁶⁴ P. J. Jensen, *Applied Physics Letters* **78**, 2190 (2001).
- ⁶⁵ Johannes Eisenmenger e Ivan K. Schuller, *Nature materials*, www.nature.com/naturematerials **2**, 437 (2003).

- ⁶⁶ J. Nogués e Ivan K. Schuller, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **203** (1999).
- ⁶⁷ V. Skumryev et al, *Nature* **423**, 850 (2003).
- ⁶⁸ M. E. Schabes e H. N. Bertran, *Journal of Applied Physics* **64**, 1347 (1988).
- ⁶⁹ Paolo Politi e Maria Gloria Pini, *arXiv:cond-mat/0208097* **1**, 1 (2002).
- ⁷⁰ G. Herzer, *IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS* **26**, 1397 (1990).
- ⁷¹ O. Fruchart, B. Kevorkian e J. C. Toussaint, *Physical Review B* **63**, 174418 (2001).
- ⁷² R. E. Camley, *Physical Review B* **35**, 36083611 (1987).
- ⁷³ C. Santamaria e H. T. Deep, *IEEE Transaction on Magnetics* **34**, 1051 (1998).
- ⁷⁴ C. Santamaria e H. T. Deep, *Jornal of Applied Physics* **91**, 6872 (2002).
- ⁷⁵ O. Fruchart, J. P. Nozières, W. Wernsdorfer, D. Givord, F. Rousseaux e D. Decanini, *Physics Review Letters* **82**, 1305 (1999).
- ⁷⁶ F. Porrati e M. Huth, *Journal of Applied Physics* **85**, 3157 (2004).
- ⁷⁷ R.E. Camley, *Physical Review B* **35**, 3608 (1987).
- ⁷⁸ R.E. Camley, J. Kwo, M. Hong e C.L. Chien, *Physics Review Letters* **64**, 2703 (1990).
- ⁷⁹ A.S. Carrico e R.E. Camley, *Physical Review B* **45**, 13117 (1992).
- ⁸⁰ A. L. Dantas e A. S. Carrico, *Physical Review B* **59**, 1223 (1999).
- ⁸¹ M. L. Silva, A. L. Dantas e A. S. Carrico, *Solid State Commun.* **135**, 769 (2005).
- ⁸² M. L. Silva, A. L. Dantas e A. S. Carrico, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **269**, 453 (2005).
- ⁸³ A. L. Dantas, G. O. G. Rebouças, A. S. W. T. Silva e A. S. Carrico, *Journal of Applied Physics* **97**, 10K105 (2005).

- ⁸⁴ A. L. Dantas, G. O. G. Rebouças, J. C. P. Barbosa, H. T. Souza, I. S. Queiroz Jr e A. S. Carriço, *Physica B* **353**, (2004).
- ⁸⁵ D. Weller e A. Moser, *Magnetics*, *IEEE Transactions* **35**, 4423 (1999).
- ⁸⁶ W. H. Meiklejohn e C. P. Bean, *Physical Review* **105**, 904 (1957).
- ⁸⁷ J. Nogués e Ivan K. Schuller, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **192**, 203 (1999).
- ⁸⁸ M. Grimsditch, G. K. Leaf, H. G. Kaper, D. A. Karpeev e R. E. Camley, *Physical Review B* **69**, 174428 (2004).
- ⁸⁹ R. M. Hornreich, *Journal of Applied Physics* **34**, 1071 (1963).
- ⁹⁰ E.C. Stoner e E.P. Wolfart, *Proc. Phys. Soc. A* **240**, 540 (1948).
- ⁹¹ E. Popova, H. Loosvelt, M. Gierlings, L.H.A. Leunissen, R. Jonckheere, C. Van Haesendonck e K. Temst, *THE EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL B* **44**, 491500 (2005).
- ⁹² K. Matsumoto et al, *FUJITSU Sci. Tech. J.* **42**, 1 (2006).
- ⁹³ R. E. Camley et al, *J.Magn.Magn.Mater.* **286**, 65 (2005).
- ⁹⁴ S. Demirtas et al, *Phys. Rev. B* **72**, 184433 (2005).
- ⁹⁵ Zhi-Pan Li et al, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 137201 (2006).
- ⁹⁶ S. Maat et al, *Phys. Rev. B* **72**, 214432 (2005).
- ⁹⁷ J. Dho et al, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 187201 (2001).
- ⁹⁸ S. Demirtas et al, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 202111 (2005).
- ⁹⁹ Ana L. Dantas et al, *IEEE Trans. Magn.* **42**, 2942 (2006).

- ¹⁰⁰ Ana L. Dantas, G. O. G. Rebouças A. S. W. T. Silva, A. S. Carriço e R. E. Camley, J. Appl. Phys. **102**, , 123907 (2007).
- ¹⁰¹ M. E. Schabes et al, J. Appl. Phys. **64**, 1347 (1988).
- ¹⁰² M. J. Carey et al, Phys. Rev. B **47**, 9952 (1993).
- ¹⁰³ P. A. A. Heijden et al, Appl. Phys. Lett. **72**, 492 (1998).
- ¹⁰⁴ A.S. Carriço et al, Phys. Rev. B **45**, 13117 (1992).
- ¹⁰⁵ A. L. Dantas et al, Phys. Rev. B **59**, 1223 (1999).
- ¹⁰⁶ A. L. Dantas et al, J. Appl. Phys. **97**, 10K105 (2005).

Índice Alfabético

- comprimento de troca, 55
- exchange bias , 108
- switching , 103
- temperatura
 - de ordem, 103
- Thermally Assisted Magnetic Recording (TAMR), 104
- acoplamento
 - de interface, 27
 - de troca, 70
- algoritmo
 - auto consistente de campo local, 54, 72
- anisotropia, 8, 13, 17
 - uniaxial, 10
- armazenamento de dados, 30, 41
- Arrhenius-like, 18
- Arrott, A. S., 20
- ativação térmica, 10
- barreira de energia, 25
- bits, 27
- blocking temperature, 11, 27, 28
- células, 16, 18, 23, 31, 53, 70
- cabeças de leitura magnetoresistivas, 66
- campo
 - coercivo, 66
 - de Exchange Bias, 67, 76
 - de interface, 31, 41, 75, 77
 - de troca, 75
 - dipolar, 15, 41, 70, 77, 80
 - efetivo, 54, 70, 72
 - externo, 65
- carga magnética
 - densidade de, 43
- cargas magnéticas, 6, 13, 31
 - de superfície, 6
 - de volume, 81
- closure magnetic domains, 63
- Cobalto, 17
- coercividade, 11, 27, 65, 66, 70
- comprimento de troca, 7, 9, 17, 32, 53, 54, 60, 71
- configuração de equilíbrio, 16, 31
- constante de troca, 8
- curling, 112
- Data Storage, 4, 28

- densidade de armazenamento, 12, 15, 24, 70
- diâmetro crítico, 12
- discos rígidos, 66
- domínios magnéticos, 7, 32
 - monodomínio, 7, 8
 - multidomínio, 7
- dureza magnética, 17
- efeito
 - dipolar, 13, 72
- efeitos térmicos, 112
- Elementos Finitos, 16
- energia
 - de anisotropia, 31, 71
 - de troca, 16, 31, 71
 - interação de troca, 132
 - Modificação no Parâmetro de Troca, 132
 - dipolar, 71
 - do acoplamento da interface, 71
 - livre de Gibbs, 16
 - magnetocristalina, 16
 - magnetostática, 7
 - térmica, 8, 10
 - efeitos térmicos, 12
 - Zeeman, 71
- energia térmica, 55
- estado magnético uniforme, 31
- estados
 - estado 0, 13
 - estado 1, 13
 - estado antiferromagnético, 70
 - estado down, 10
 - estado up, 10
- Ewing, J.A., 20
- Exchange Bias, 27, 66, 68, 70, 73, 74
- Fases Magnéticas em Nanopartículas, 13
 - fases magnéticas, 15
 - high-remanent, 15, 16
 - low-remanent, 15, 16
 - high-remanent
 - C-State, 15, 16, 18
 - Flower-State, 15, 16, 20, 22
 - S-State, 15, 16, 18
 - low-remanent
 - Vortex-State, 16, 19, 20, 23
- Filmes finos, 3
- filmes finos, 15, 16
- fuga de fluxo, 41
- geometrias, 13
 - base circular, 13
 - base quadrada, 13, 15, 16, 19, 21
 - base retangular, 13, 16
- Gravação Magnética, 1
 - gravação magnética longitudinal, 14
 - gravação magnética perpendicular, 14
- gravação magnética, 24, 41, 68, 70

- densidade de, 55
- histerese magnética, 23, 64
 - assimetria na, 68, 70, 77, 97
- histerese térmica, 108
- ímãs permanentes, 65
- indústria de armazenamento de dados, 13
- instabilidade temporal, 24
- interação
 - de troca, 32, 67, 74
 - dipolar, 31
- Introdução, 1
- Labonte, A. E., 19
- Landau Lifschitz Gilbert, 18
- Langevin, 18
- leaf, 20
- Lei da Indução de Faraday, 1
- lift-off, 4
- Litografia, 3
 - Técnicas nanolitográficas, 3, 68
 - Electron Beam, 3
 - Electron beam lithography, 3, 4
 - Interference lithography, 3
 - Sputtering, 3
 - X-ray lithography, 3
- Liu, K., 68
- LLG Micromagnetics *SimulatorTM*, 22
- máscaras, 4
 - mascaras porosas de alumínio, 4
- magnetização de saturação, 8, 54, 71
- magneto-resistência anisotrópica, 66
- magneto-resistência gigante, 30
- magneto-resistência gigante (MRG), 3
- Matriz de nanodots, 5, 6
 - Dots, 6
- Meiklejohn e Bean, 66
- monodomínio, 32
- nanoestruturas AF/FM, 68
- Nanopartículas Magnéticas, 3
 - Nano-estruturas magnéticas, 3
 - Nanopartículas, 3
- nanowires, 24
- Nogués, J., 67
- parede de domínio, 8, 12, 32
- Patterned Media, 6
- permalloy, 16, 17
- permeabilidade magnética, 8
- Princípio da Mínima Ação, 6
- RAMAC, 2
- Remanência, 64
- reversão da magnetização, 69
- S-state, 57
- série de Taylor, 134
- saturação, 64, 65, 69
- Schuller, I. K., 27, 67

- sensores de leitura, 30
- Simulação magnética, 17, 18
- simulações micromagnéticas, 53
- stray field, 16
- substrato antiferromagnético, 24
- substrato antiferromagnético (AFM), 13, 23, 25, 67, 70
- Superparamagnetismo, 6, 28
 - estado superparamagnético, 10, 66
 - Limite superparamagnético, 4, 10, 12, 68, 70
 - partículas superparamagnéticas, 70
- switching, 114
- Tamanho Crítico, 7, 9
- Telegraphone, 1
- temperatura
 - ambiente, 70
 - de Curie, 107
 - de Néel, 67, 107
- tempo computacional, 31, 32
- twisted state, 111
- válvulas de spin, 66
- vórtices, 114
- Valdemar Poulsen, 1

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](#)