

**UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO GRANDE DO NORTE
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM FÍSICA
MESTRADO EM FÍSICA**

ADAN SADY DE MEDEIROS SILVA

**NANOELEMENTOS FERROMAGNÉTICOS ACOPLADOS A
SUBSTRATOS ANTIFERROMAGNÉTICO**

**MOSSORÓ
2011**

ADAN SADY DE MEDEIROS SILVA

**NANOELEMENTOS FERROMAGNÉTICOS ACOPLADOS A
SUBSTRATO ANTIFERROMAGNÉTICO**

Dissertação apresentada à
Universidade do Estado do
Rio Grande do Norte, como
um dos pré-requisitos para a
obtenção do título de Mestre em
Física

ORIENTADORA: Prof.^a Dr.^a Ana Lúcia Dantas

**MOSSORÓ
2011**

ADAN SADY DE MEDEIROS SILVA

**NANOELEMENTOS FERROMAGNÉTICOS ACOPLADOS A
SUBSTRATO ANTIFERROMAGNÉTICO**

Dissertação apresentada à
Universidade do Estado do
Rio Grande do Norte, como
um dos pré-requisitos para a
obtenção do título de Mestre
em Física

Aprovado em 28/02/2011

Banca Examinadora

Orientadora
Prof.^a Dr.^a Ana Lúcia Dantas
UERN

Examinador Externo
Prof. Dr. Gustavo de Oliveira Gurgel Rebouças
UFERSA

Examinador Interno
Prof. Dr. Nilson Sena de Almeida
UERN

Agradecimentos

À *Prof.^a. Ana Lúcia Dantas*, Pela orientação segura, pelo incentivo constante, pelas palavras constantes de motivação e pela confiança em minha capacidade, mesmo quando eu não a tinha.

Ao *Prof. Artur da Silva Carriço*. Pela orientação nos tempos de iniciação científica e co-orientação neste trabalho, pelo grande aprendizado que ele proporciona, pelo entusiasmo constante ao trabalhar e ao viver, e por ser um exemplo a todos os que com ele convivem.

A todos os professores e funcionários do departamento de física da *UERN-Mossoró*, que contribuíram imensamente para minha formação neste mestrado.

A todos os professores e funcionários do departamento de física da *UFRN*, pelos maravilhosos anos vividos no tempo de graduação.

A todos os funcionários do campus *UERN-Natal*, pela convicência e paciência neste ultimo ano de mestrado.

Aos colegas do mestrado em física **UERN-UFERSA**, pela convivência e aprendizado mútuo.

Aos *Amigos Artur, Laiza, Gian, Estefânia, Camila, Soraya, Simone, Rina, Rozi, Joyce, Carol, Margarete, Cesar, Rubens, Diassis*, e a muitos outros, por serem minha segunda família, por sempre acreditarem em mim, e pela convivência constante. Amo todos vocês.

À minha família em Mossoró *Ana Lúcia, Ana Katia, Heloíse e Dayane*, por terem me acolhido com tanto carinho e dedicação.

A todos os estudantes do Grupo de Magnetismo da UFRN *Prof. Artur Carriço, Professora Ana Lúcia Dantas, Gustavo, Fábio Gracinha, Ana Karollina, Júlio César, Rodolfo, Érica, Juliana, Thales, Rafael, Thiago Rafael e Felipe Fávaro, Carlos, Rafaela, César, Leonardo, e Natan*, pela convivência não só científica, mas extremamente afetiva.

A **CAPES**, ao **CNPq** e à **UERN** pelo apoio financeiro concedido.

Resumo

Apresentamos um estudo teórico das fases magnéticas de nano-partículas de ferro e permalloy sujeitas a acoplamento de interface com um substrato antiferromagnético. Investigamos as fases magnéticas do estado remanente de nano-elementos circulares e a nucleação de pares de vórtices ao longo da curva de histerese magnética de nano-elementos de base com formato elíptico. A descrição é baseada na teoria micromagnética. Algoritmos auto-consistentes, baseados nas equações de Landau-Lifshitz, foram desenvolvidos para descrever as fases magnéticas de equilíbrio ao longo da curva de histerese. Construimos o diagrama de fases (estados magnéticos dos spins do material antiferromagnético) de nano-elementos circulares, descrevendo a fase magnética de remanência como função do diâmetro e da altura, desde 21nm até 81nm. Mostramos que o acoplamento de interface estabiliza estados com magnetização uniforme de nano-elementos finos. Para partículas com diâmetro da ordem de 30nm, a altura limiar para a nucleação de estados aproximadamente uniformes (de alta magnetização) aumenta por um fator ao redor de dois pelo efeito do acoplamento de interface. Para nano-elementos de ferro e permalloy com diâmetro menor que 81nm, os valores limiares de altura para a estabilização de estado monodomínio são de 10nm e 8nm. Esses valores aumentam para 20nm e 15nm

por efeito de acoplamento de interface. Mostramos também que estados contendo vórtices fora do plano da interface são favorecidos sobre estados contendo vórtices no plano da interface. Nossos resultados reproduzem medidas feitas recentemente em nano-elementos de supermalloy [1]. Apresentamos também um estudo do impacto do acoplamento de interface na ordem magnética de nano-elementos cilíndricos de ferro e permalloy, com base elíptica. Mostramos que, ao contrário do que requer a intuição, o aprisionamento parcial de momentos magnéticos da região de interface favorece a nucleação de estados magnéticos contendo pares de vórtices, ao longo da curva de histerese. O acoplamento de interface afeta tanto a distância entre núcleos dos vórtices quanto ao sentido de rotação relativo do par de vórtices. Com dimensões laterais acima de alguns comprimentos de troca, nano-elementos finos de ferro e permalloy podem nuclear pares de vórtices de mesma chiralidade, separados por um anti-vortex. O acoplamento de interface favorece a nucleação de pares de vórtices com chiralidade oposta, separados por um domínio uniforme.

Palavras-chave: Nanoelemento, Histerese, Vórtice, Ferro e Permalloy.

Abstract

We present a theoretical investigation of the magnetic phases of interface biased iron and permalloy ferromagnetic nanoelements. We have investigated both the magnetic phases of circular nanoelement in the remanent state, and the nucleation of vortex pairs along the hysteresis curve of exchange biased elliptical nanoelements. The description is based on micromagnetic theory. Self-consistent local field algorithms, based on the Landau-Lifshitz torque equations, were used to find the equilibrium states along the magnetic hysteresis loop. We have built the magnetic phase diagram of circular nanoelements, describing the remanent state as a function of the values of the diameter and height, from a few nanometers up to 81nm. We have shown that the interface field stabilizes the uniform state of flat nanoelements. For a given value of the diameter of the nanoelement, the threshold height for nearly uniform states (with large values of the magnetization) increases by a factor of approximately two as a result of interface pinning. For unbiased permalloy and iron nanoelements with diameter smaller than 81nm, the threshold heights are 10nm and 8nm, while for interface biased nanoelements the threshold heights increase to 20nm and 15nm. We have also found that the perpendicular vortex phase

is favored over the vortex in plane state for permalloy and iron biased nanoelements. Our results reproduce satisfactorily recent experimental data of supermalloy nano-elements [1]. We also report a theoretical investigation of interface effects in the magnetic order of interface biased iron and Permalloy elliptical nano-elements. Contrary to intuition, the partial pinning of the interface layer favors the nucleation of double vortex states along the hysteresis loop. Interface biasing affects the relative chirality and the core-to-core distance of the vortices. For lateral dimensions larger than a few exchange lengths, unbiased flat nanoelements may nucleate vortex pairs with the same chirality separated by an antivortex. Interface bias favors the nucleation of vortex pairs with opposite chirality separated by a magnetic domain.

Índice

| | |
|--|----------|
| Agradecimentos | ii |
| Agradecimentos | i |
| Resumo | vi |
| Abstract | viii |
| Lista de Figuras | ix |
| 1 Introdução | 1 |
| 2 Magnetismo de Nanoestruturas | 4 |
| 2.1 Introdução | 4 |
| 2.2 <i>Exchange Bias</i> | 7 |
| 2.3 Energias Magnéticas | 8 |
| 2.3.1 Energia de Interface | 14 |
| 2.3.2 Energia total | 15 |
| 2.4 Cálculo do Campo Efetivo | 15 |
| 2.4.1 Campo de troca | 16 |
| 2.4.2 Campo Zeeman | 16 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 2.4.3 | Campo de interface | 17 |
| 2.4.4 | Campo de anisotropia uniaxial | 17 |
| 2.4.5 | Campo dipolar | 18 |
| 2.5 | Cálculo auto-consistente | 19 |
| 3 | Nanoelementos Cilíndricos | 21 |
| 3.1 | Introdução | 21 |
| 3.2 | Estados Magnéticos Remanentes e Processos de Magnetização | 23 |
| 3.3 | Fases Magnéticas de Nanocilindros Magnéticos | 24 |
| 3.3.1 | Fase Uniforme | 25 |
| 3.3.2 | Estado C no plano | 26 |
| 3.3.3 | Fase vórtice no plano | 27 |
| 3.3.4 | Fase vórtice Perpendicular | 28 |
| 3.3.5 | Fase Perpendicular | 30 |
| 3.3.6 | Fase C Perpendicular | 30 |
| 3.4 | Diagramas de fase | 31 |
| 3.5 | Conclusões | 35 |
| 4 | Nanoelementos Elipticos | 41 |
| 4.1 | Introdução | 41 |
| 4.2 | Modelo | 42 |
| 4.3 | Resultados | 44 |
| 4.4 | Conclusões | 48 |
| 5 | Conclusões e Perspectivas | 50 |
| | Bibliografia | 53 |

Lista de Figuras

| | | |
|-----|---|----|
| 2.1 | Evolução dos sistemas de informação, e a relação destes com as densidades de gravação associadas(Fonte IBM) | 5 |
| 2.2 | Deslocamento da histerese em uma interface F/AF. | 6 |
| 3.1 | Curva de histerese magnética de um material ferromagnético. | 23 |
| 3.2 | Figura esquemática de uma matriz de nanoelementos ferromagnéticos crescidos sobre substratos antiferromagnéticos. | 24 |
| 3.3 | Exemplo de fase magnética onde a magnetização tem a configuração uniforme, ao longo do eixo fácil. Os eixos indicam as posições dos momentos magnéticos e as setas indicam a direção da magnetização nesta posição. | 25 |
| 3.4 | Exemplo de fase magnética onde a magnetização tem a forma tipo it C. Os eixos indicam as posições dos momentos magnéticos e as setas indicam a direção da magnetização nesta posição. | 26 |

- 3.5 Exemplo de fase magnética onde a magnetização toma a forma de um vórtice no plano xy . Nanoelemento de Fe com dimensões $d = 69nm$ e $h = 30nm$. Os eixos indicam as posições dos momentos magnéticos e as setas indicam a direção da magnetização nesta posição. 27
- 3.6 Exemplo da fase vórtice, com a presença do campo de interface. Vista lateral(I), do topo (II) e da base (III) do nanoelemento com dimensões $d = 45nm$ e $h = 81nm$. Os eixos indicam as posições dos momentos magnéticos e as setas indicam a direção da magnetização nesta posição. . . 28
- 3.7 Configuração de um plano vertical que passa pelo centro do nanoelemento. As cores indicam a componente y da magnetização. 29
- 3.8 Configuração do topo do nanoelemento que apresenta o estado vórtice perpendicular. As cores indicam a componente z da magnetização 30
- 3.9 Configuração da base do nanoelemento no estado vórtice perpendicular. As cores indicam a componente z da magnetização 31
- 3.10 Configuração da magnetização do nanoelemento no estado perpendicular. Nanoelemento de Fe com dimensões $d = 27nm$ e $h = 81nm$. Os eixos indicam as posições dos momentos magnéticos e as setas indicam a direção da magnetização nesta posição. 32

| | | |
|------|---|----|
| 3.11 | Configuração da lateral do nanoelemento no estado c-perpendicular. Os eixos indicam as posições dos momentos magnéticos e as setas indicam a direção da magnetização nesta posição. | 33 |
| 3.12 | Diagrama de fase para o ferro, sem o acoplamento com o substrato antiferromagnético | 34 |
| 3.13 | Diagrama de fase para o ferro, com o acoplamento com o substrato antiferromagnético | 35 |
| 3.14 | Tabela com os valores das constantes utilizadas em nosso trabalho | 36 |
| 3.15 | Diagrama de fase para o permalloy, sem o acoplamento com o substrato antiferromagnético | 37 |
| 3.16 | Diagrama de fase para o permalloy, com o acoplamento com o substrato antiferromagnético | 38 |
| 3.17 | Diagrama de fase experimental para o permalloy, sem o acoplamento com o substrato antiferromagnético, encontrado por [1]. Os resultados foram analisados por microscopia eletrônica, e os resultados obtidos mostram os símbolos azuis correspondendo ao estado uniforme no plano, os vermelhos ao estado uniforme fora do plano e os verdes ao estado vórtice. | 39 |
| 3.18 | Comparação dos resultados obtidos por nós 3.15 e os resultados obtidos no artigo [1]. | 40 |

| | | |
|-----|--|----|
| 4.1 | Figura esquemática. Nanoelementos elípticos crescidos sobre um substrato antiferromagnético. Onde a (b) é o eixo maior (menor) da elipse no plano xy | 42 |
| 4.2 | Histereses e mapas de spins de um nanoelemento de ferro acoplado (fora) e não acoplado (dentro) a um substrato antiferromagnético. | 46 |
| 4.3 | Mapas de spins de um nanoelemento de ferro acoplado a um substrato antiferromagnético, com diferentes valores de campo externo. | 47 |
| 4.4 | Histereses e mapas de spins de um nanoelemento de permalloy acoplado (fora) e não acoplado (dentro) a um substrato antiferromagnético. | 48 |

Capítulo 1

Introdução

Nos dias atuais, sistemas magnéticos são imprescindíveis em várias aplicações das quais o homem moderno não se vê sem, dentre elas se destacam a gravação magnética (Discos rígidos modernos), memórias magnéticas e cabeçotes de leitura magnética de dados presentes nos discos rígidos modernos. Cada vez mais se busca aumentar a densidade de gravação de dados, ou seja, gravar uma maior quantidade de dados em um menor espaço possível. Um fator relevante neste aumento da capacidade de armazenar dados é o avanço das técnicas de construção de estruturas magnéticas cada vez menores, conduzindo a um relevante 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. Um fato que revolucionou o mundo das estruturas magnéticas foi a descoberta do efeito magnetoresistivo gigante [2], que deu origem ao dispositivo denominado válvula de spins [3, 4]. Este consiste em uma camada de um material ferromagnético fixo (camada de referência), acoplada a um substrato antiferromagnético de alta anisotropia, e fracamente acoplada a uma segunda camada também ferromagnética (camada livre), através de um espaçador não magnético. O efeito consiste passar uma corrente elétrica através do dispositivo.

Quando as magnetizações das duas camadas ferromagnéticas estão alinhadas (opostas) a resistência elétrica é baixa (alta) e a informação binária lida é associada aos *bits* “0” ou “1” presentes nos discos rígidos modernos.

Uma propriedade bastante estudada hoje pelos grupos ao redor do mundo é o acoplamento de um material ferromagnético a outro antiferromagnético, fenômeno que tem como característica predominante o deslocamento da histerese foi primeiramente observado em 1956 [5] e é parte essencial dos dispositivos da spintrônica [3, 4] e de junção de tunelamento magnético (MTJ) [6, 7, 8, 9], que consiste em dois filmes ferromagnéticos separados por material não magnético e é caracterizado por apresentar uma mudança abrupta na resistência elétrica quando a orientação magnética relativa dos dois filmes muda de paralelo para anti-paralelo. Com a finalidade de aumentar a densidade de gravação magnética de dados, surge como perspectiva a estabilização via acoplamento com um antiferromagnético de uma nanopartícula ferromagnética. Nesse caso, seria dada uma ”anisotropia extra” ao material ferromagnético, garantindo que ele teria uma magnetização uniforme. Entretanto, essa característica de estabilizar a magnetização nem sempre é regra.

Mostramos que o acoplamento com a camada antiferromagnética pode induzir estados tipo vórtice em nanoelementos de simetria cilíndrica e, surpreendentemente, duplo vórtice em nanoelementos de simetria elíptica, como podemos ver nos capítulos 3 e 4. Nanoelentos magnéticos com simetria cilíndrica [1, 10] e elíptica [11, 12] de materiais ferromagnéticos com baixa anisotropia e dimensões de até 100 nm têm sido de grande interesse de grupos da área. Esses nanoelementos apresentam propriedades magnéticas únicas comparadas com ferromagnetos micrométricos ou com suas propriedades volumétricas.

O nosso trabalho se baseia especialmente nessas motivações. Apresentamos os resultados obtidos a partir do cálculo micromagnético, com detalhes descritos no capítulo 2. Inicialmente, fizemos a simulação com o nanoelemento tendo simetria cilíndrica, e encontramos os estados remanentes para nanoelementos acoplados ou não a um substrato antiferromagnético (cap. 3). Apresentamos diagramas indicando as fases magnéticas encontradas em função do diâmetro d e da altura h do nanoelemento.

No capítulo 4, mostramos os resultados obtidos através da simulação feita com simetria elíptica de nanoelementos ferromagnéticos acoplados ou não a um substrato antiferromagnético. Mostramos curvas de histerese encontradas para dimensões da ordem de centenas de nanômetros. Contrário à intuição (onde espera-se que o estado uniforme seja favorecido no nanoelemento acoplado ao antiferromagneto), o acoplamento com o material antiferromagnético induz a formação de estados de fechamento fluxo de magnetização, em particular estado de duplo vórtice ao longo das curvas de histerese para o ferro e para o permalloy.

Capítulo 2

Magnetismo de Nanoestruturas

2.1 Introdução

Materiais magnéticos são de suma importância para uma gama de aplicações tecnológicas nos dias atuais, dentre as quais se destacam os meios de gravação magnética e os cabeçotes de leitura de dados. Tal tecnologia, hoje denominada por spintrônica, teve início com a primeira observação do efeito magnetoresistivo gigante observado, em 1988, pelo professor Mário Baibich [2], quando trabalhava no laboratório do professor Albert Fert, prêmio nobel de 2008. Três anos após a descoberta da magnetoresistência gigante, surgiu o dispositivo denominado válvula de spins[3].

A válvula de spin é constituída por uma camada de um material ferromagnético fixo, acoplada a um substrato antiferromagnético de alta anisotropia, e fracamente acoplada a uma segunda camada também ferromagnética, através de um espaçador não magnético. O efeito consiste passar uma corrente elétrica através do dispositivo. Quando as magnetizações das duas camadas ferromagnéticas estão alinhadas (opostas) a resistência elétrica é baixa (alta) e a informação binária lida é associada aos *bits* “0” ou “1”. Esse dispositivo promoveu uma revolução na indústria de gravação magnética, e ainda é a tecnologia usada no mercado nos dias atuais, pois propiciou a leitura de campos de fuga da ordem de dezenas de kG.

O meio de gravação magnética é um meio granular, e a cada unidade de gravação é associada um número fixo de grãos. Nesse contexto, uma forma de aumentar a densidade de gravação magnética é diminuir o tamanho dos grãos. Há, contudo, um limite físico para a diminuição indefinida de grãos, que é o limite superparamagnético. Isto é o limite em que sua energia de anisotropia é comparável a energia térmica, não sendo viável para gravação. Nessa vertente, pode-se acoplar tal nanopartícula a um substrato antiferromagnético, fazendo com que ela tenha uma estabilidade magnética maior.

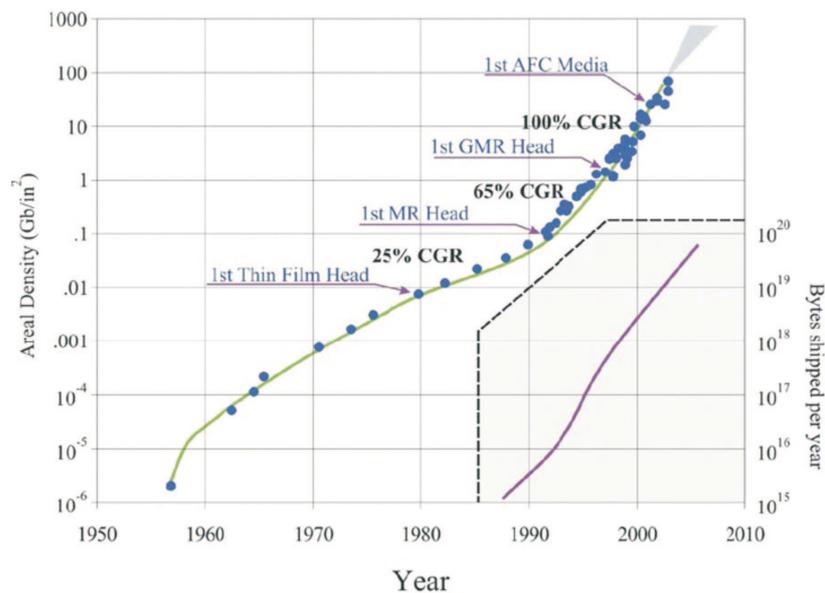


Figura 2.1: Evolução dos sistemas de informação, e a relação destes com as densidades de gravação associadas(Fonte IBM)

Uma proposta que tem sido investigada é associação de um bit a magnetização de uma nanopartícula ferromagnética. A primeira condição é que a intensidade do campo de fuga seja suficiente para ser lida pelo sensor de leitura; a segunda é que o limite superparamagnético da partícula seja diminuída, para ser possível aumentar a densidade de gravação; e finalmente que a gravação possa ser feita com campos relativamente baixos,

sem contudo que esta partícula seja “desgarrada” pelo campo de suas vizinhas ou mesmo pelo campo magnético da terra. Esse projeto apresenta o comportamento magnético de nanopartículas ferromagnéticas crescidas sobre substratos antiferromagnéticos.

Estes sistemas apresentam uma rica variedade de propriedades magnéticas. Uma de suas mais atraentes propriedades é a polarização de troca, de $H = 0$, do ferromagneto devido a uma anisotropia unidirecional, conhecida na literatura científica por *Exchange Bias*. também para nanopartícula muito pequena, esta pode entrar no limite superparamagnético, ou seja, sua energia de anisotropia é comparável a energia térmica, não sendo viável para gravação.

Nessa vertente, pode-se acoplar tal nanopartícula a um substrato antiferromagnético, fazendo com que ele tenha uma estabilidade magnética maior.

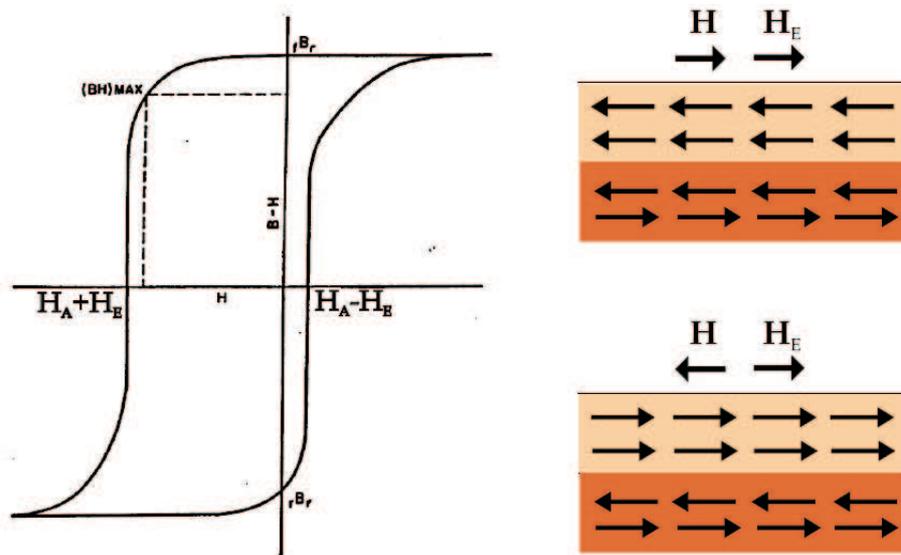


Figura 2.2: Deslocamento da histerese em uma interface F/AF.

2.2 *Exchange Bias*

O fenômeno do *exchange bias* foi primeiro observado em 1956 [5]. Na época este fenômeno ficou conhecido como “nova anisotropia magnética”, posteriormente chamada de anisotropia de interface.

Esta anisotropia é induzida pela interação de troca, através da interface entre o material ferromagnético e o antiferromagnético depois que a amostra é resfriada sob efeito de um campo magnético a partir da temperatura de Néel do antiferromagneto. Este fenômeno foi primeiro exibido em pequenas partículas de Co revestida por seu óxido, CoO. O primeiro modelo para explicar o comportamento observado, considerou o material ferromagnético acoplado uniformemente a uma sub-rede do antiferromagnético (veja Fig.2.2). Neste caso, se a interface gera um campo positivo (H_E), então a reversão da magnetização ocorre quando

$$H + H_E = H_A \quad (2.1)$$

ou

$$H = H_A - H_E \quad (2.2)$$

No outro limite do ciclo da histerese o campo que reverte a magnetização negativamente, é dado por

$$H = -H_A - H_E \quad (2.3)$$

onde H é o campo aplicado e H_A é o campo coercivo intrínseco do ferromagneto, dado por:

ou

$$H_A = \frac{2K}{M_S} \quad (2.4)$$

Exchange Bias é observado nos mais diversos sistemas magnéticos, estando sempre presente no acoplamento de um material ferromagnético com

um material antiferromagnético ou ferrimagnético, seja esse acoplamento de revestimento ou de interface. O estudo deste fenômeno é importante devido a este sistema estar presente em dispositivos de válvula de spins citados anteriormente.

A modelagem numérica de sistemas magnéticos em escalas nanométricas tem sido baseada no que até hoje chamamos teoria micromagnética.

2.3 Energias Magnéticas

Neste capítulo apresentamos uma descrição das energias envolvidas em nosso cálculo numérico e de como as descrevemos de modo a otimizá-lo. Para sistemas magnéticos com dimensões de cerca de centenas de nanômetros, as energias envolvidas podem ser calculadas através do conceito de células de simulação, a fim de diminuir o tempo da simulação computacional de tais sistemas. Usando uma célula de simulação com aresta d e considerando uma estrutura cristalina do tipo bcc, o número de átomos por célula de simulação é dado pela expressão $N = 2x(d^3/a_0^3)$, onde a_0 é o parâmetro de rede do material. Se fizermos uma conta rápida, podemos facilmente ver que o cálculo com a aproximação por células se faz necessário. Se considerarmos uma célula de simulação de $3nm$ de lado para o Ferro, temos que, em uma célula de simulação, são contemplados 2284 átomos. Essa aproximação deve respeitar o comprimento de troca intrínseco do material, medida abaixo da qual a interação de troca se sobressai sobre a interação magnetostática, ou seja, desde que a aresta da célula de simulação seja menor do que o comprimento de troca do material, podemos garantir que todos os momentos magnéticos atômicos têm, em média, uma mesma direção, ou seja, são monodomínio. Assim sendo, passamos a calcular a interação não entre átomos subsequentes, e sim entre células subsequentes. A seguir, apresentaremos as energias associadas aos

sistemas magnéticos considerados e as correções feitas para utilizarmos o cálculo numérico por células.

Energia de troca

O Hamiltoniano de troca de um átomo qualquer em uma rede cristalina i com seus vizinhos é dado pela expressão:

$$H = - \sum_j J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.5)$$

Onde J_{ij} é a constante de troca e S_i e S_j são os vetores que representam os momentos magnéticos de cada célula. Se a integral de troca é isotrópica igual a J_e , temos:

$$H = -J_e \sum_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.6)$$

O hamiltoniano sobre todos os átomos de um cristal é encontrado pela soma da equação anterior sobre todos os átomos do cristal

$$H = -J_e \sum_{j,i} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (2.7)$$

Em certos problemas, é conveniente considerar o operador matriz de spin da equação 2.6 como um vetor clássico. A equação 2.6 pode então ser escrita como

$$H = -J_e S^2 \sum_j \cos \phi_{i,j} \quad (2.8)$$

com

$$\cos \phi_{i,j} = \hat{u}_i \cdot \hat{u}_j = \alpha_{1i}\alpha_{1j} + \alpha_{2i}\alpha_{2j} + \alpha_{3i}\alpha_{3j} \quad (2.9)$$

onde α_1 , α_2 e α_3 são os cossenos diretores de um vetor unitário em relação aos eixos x , y , e z , respectivamente e o versor \hat{u} representa a direção da magnetização na célula considerada. Quando o ângulo entre os vetores unitários \hat{u}_i e \hat{u}_j tende a zero, os cossenos diretores de \hat{u}_i podem ser expandidos por série de Taylor em cossenos diretos \hat{u}_j . Por exemplo para o primeiro termo da equação 2.9:

$$\alpha_{1i}\alpha_{1j} = \alpha_{1i} \left(\alpha_{1i} + \vec{r}_{i,j} \cdot \nabla \alpha_{1i} + \frac{1}{2} (\vec{r}_{i,j} \cdot \nabla \alpha_{1i})^2 \alpha_{1i} + \dots \right) \quad (2.10)$$

Na soma da expressão anterior sobre todos os vizinhos j , Para um cristal cúbico, termos como $\sum_j \vec{r}_{i,j} \cdot \nabla \alpha_{1i}$ e termos cruzados com $\sum_j 1/2(\vec{r}_{i,j} \cdot \nabla \alpha_{1i})^2$ como $\sum x_{i,j}y_{i,j}(\partial^2 \alpha_{i,j}/\partial x_{i,j}\partial y_{i,j})$ se tornam zero, por simetria. Logo:

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

sendo $\sum_j x_{i,j}^2 = \sum_j y_{i,j}^2 = \sum_j z_{i,j}^2 = \frac{1}{3} \sum_j r_{i,j}^2$, segue:

$$\sum_j \cos \phi_{i,j} = z + \frac{1}{6} \sum_j r_{i,j}^2 \hat{u} \cdot \nabla^2 \hat{u}$$

Considerando apenas a parte variável da energia, a energia de troca se torna:

$$E = H = -\frac{J_e S^2}{6} \sum_j r_{i,j}^2 \hat{u} \cdot \nabla^2 \hat{u} \quad (2.11)$$

com a ajuda da identidade vetorial,

$$\begin{aligned}\nabla^2(\hat{u} \cdot \hat{u}) &= 2[(\nabla\alpha_1)^2 + (\nabla\alpha_2)^2 + (\nabla\alpha_3)^2] + 2(\hat{u} \cdot \nabla^2\hat{u}) \\ &= 0\end{aligned}$$

a última equação pode ser escrita como

$$H = E = \frac{J_e S^2}{6} \sum_j r_{i,j}^2 [(\nabla\alpha_1)^2 + (\nabla\alpha_2)^2 + (\nabla\alpha_3)^2] \quad (2.12)$$

Para estruturas cúbicas simples como *bcc* ou *fcc* a expressão $\sum_j r_{i,j}^2$ é igual a $6a^2$, onde a é o parâmetro de rede. Finalmente temos:

$$H = E = J_e S^2 a^2 [(\nabla\alpha_1)^2 + (\nabla\alpha_2)^2 + (\nabla\alpha_3)^2]$$

Consideramos uma pequena partícula cúbica de lado δ . A partícula consiste em N partículas menores, com a de lado, em cada lado. $N = \delta^3/a^3$.

$$\begin{aligned}E &= N J S^2 a^2 \\ &\sum_{mnk} \left[\left(\frac{d\alpha_1(m, n, k)}{dx} \right)^2 + \left(\frac{d\alpha_2(m, n, k)}{dx} \right)^2 + \left(\frac{d\alpha_3(m, n, k)}{dx} \right)^2 \right. \\ &+ \left(\frac{d\alpha_1(m, n, k)}{dy} \right)^2 + \left(\frac{d\alpha_2(m, n, k)}{dy} \right)^2 + \left(\frac{d\alpha_3(m, n, k)}{dy} \right)^2 \\ &\left. + \left(\frac{d\alpha_1(m, n, k)}{dz} \right)^2 + \left(\frac{d\alpha_2(m, n, k)}{dz} \right)^2 + \left(\frac{d\alpha_3(m, n, k)}{dz} \right)^2 \right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{E}{\delta^3} = & \frac{A}{2} \sum_{mnk} \left[\left(\frac{\alpha_1^2(m+1, n, k) + \alpha_1^2(m, n, k) - 2\alpha_1(m+1, n, k)\alpha_1(m, n, k)}{\delta^2} \right) \right. \\
& + \left(\frac{\alpha_2^2(m+1, n, k) + \alpha_2^2(m, n, k) - 2\alpha_2(m+1, n, k)\alpha_2(m, n, k)}{\delta^2} \right) \\
& + \left(\frac{\alpha_3^2(m+1, n, k) + \alpha_3^2(m, n, k) - 2\alpha_3(m+1, n, k)\alpha_3(m, n, k)}{\delta^2} \right) \\
& + \left(\frac{\alpha_1^2(m, n+1, k) + \alpha_1^2(m, n, k) - 2\alpha_1(m, n+1, k)\alpha_1(m, n, k)}{\delta^2} \right) \\
& + \left(\frac{\alpha_2^2(m, n+1, k) + \alpha_2^2(m, n, k) - 2\alpha_2(m, n+1, k)\alpha_2(m, n, k)}{\delta^2} \right) \\
& + \left(\frac{\alpha_3^2(m, n+1, k) + \alpha_3^2(m, n, k) - 2\alpha_3(m, n+1, k)\alpha_3(m, n, k)}{\delta^2} \right) \\
& + \left(\frac{\alpha_1^2(m, n, k+1) + \alpha_1^2(m, n, k) - 2\alpha_1(m, n, k+1)\alpha_1(m, n, k)}{\delta^2} \right) \\
& + \left(\frac{\alpha_2^2(m, n, k+1) + \alpha_2^2(m, n, k) - 2\alpha_2(m, n, k+1)\alpha_2(m, n, k)}{\delta^2} \right) \\
& \left. + \left(\frac{\alpha_3^2(m, n, k+1) + \alpha_3^2(m, n, k) - 2\alpha_3(m, n, k+1)\alpha_3(m, n, k)}{\delta^2} \right) \right]
\end{aligned}$$

onde o parâmetro A é conhecido na literatura como o *exchange stiffness*:

$$A = \frac{2JS^2}{a} \quad (2.13)$$

Somando os termos positivos, temos:

$$\begin{aligned}
\frac{E}{\delta^3} = & \frac{A}{2\delta^2} \sum_{mnk} \left[6 - 2\hat{\mu}(m+1, n, k) \cdot \hat{\mu}(m, n, k) \right. \\
& - 2\hat{\mu}(m, n+1, k) \cdot \hat{\mu}(m, n, k) \\
& \left. - 2\hat{\mu}(m, n, k+1) \cdot \hat{\mu}(m, n, k) \right]
\end{aligned}$$

$$\frac{E}{\delta^3} = \frac{A}{2\delta^2} \sum_{mnk} \left[2 - 2\hat{\mu}(m+1, n, k) \cdot \hat{\mu}(m, n, k) + \right. \\ \left. 2 - 2\hat{\mu}(m, n+1, k) \cdot \hat{\mu}(m, n, k) + \right. \\ \left. 2 - 2\hat{\mu}(m, n, k+1) \cdot \hat{\mu}(m, n, k) \right]$$

A energia de troca por unidade de volume entre duas células cúbicas de lado δ fica:

$$\frac{E}{\delta^3} = \frac{A}{\delta^2} \sum_{i,j} \left[1 - \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j \right]$$

onde a soma em i representa a soma sobre todas as células do sistema e a soma j é a soma sobre todas as células primeiras vizinhas da célula i .

Energia de Anisotropia

A energia de anisotropia magnética dos materiais depende intimamente de qual é a orientação da sua magnetização em relação aos eixos cristalinos, conhecida como anisotropia magnética. Um material é dito “duro” quando essa anisotropia magnética tem valor muito alto, ou seja, a orientação da magnetização é mais estável nos eixos favoráveis, enquanto que um material magnético é dito “mole” quando sua anisotropia magnética tem valor baixo.

A densidade de energia de anisotropia é função da constante de anisotropia K , de modo que:

$$\frac{E_A}{\delta^3} = K \sin^2 \theta \quad (2.14)$$

onde θ é o ângulo entre o momento magnético e o eixo de anisotropia. Nossos materiais apresentam anisotropia uniaxial.

Energia Zeeman

A energia zeeman é aquela que representa a interação entre o material e o campo externo aplicado a este, de modo que a densidade de energia é dada pela expressão:

$$\frac{E_{Zeeman}}{\delta^3} = M_S \sum \hat{\mu}_i \cdot \vec{H} \quad (2.15)$$

Onde M_S é a chamada magnetização de saturação, que depende do material e \vec{H} é o campo externo aplicado ao material.

2.3.1 Energia de Interface

A energia de interface utilizada no nosso sistema é representada por um campo local que atua somente nas células de simulação da interface de contato entre o ferromagneto e o antiferromagneto. Em particular, consideraremos o limite em que a anisotropia do substrato antiferromagnético é muito maior do que a anisotropia do nanoelemento ferromagnético. Portanto, nesse caso, consideramos o antiferromagnético congelado em um estado não compensado. Como consequência a expressão para a energia de interface se assemelha bastante a energia Zeeman vista anteriormente, com a diferença que a energia Zeeman atua sobre todos os momentos magnéticos do material, sendo que esta energia atua somente na interface.

$$\frac{E_{Interface}}{\delta^3} = M_S \sum \hat{\mu}_i \cdot \vec{H}_{INT} \quad (2.16)$$

Energia Dipolar

A energia dipolar por célula é dada pela seguinte expressão:

$$E_{dip} = \frac{M_S^2 V^2}{2} \sum_i \sum_k \left(\frac{\hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_k}{r_{ik}^3} - \frac{3(\hat{\mu}_i \cdot \vec{r}_{ik})(\hat{\mu}_k \cdot \vec{r}_{ik})}{r_{ik}^5} \right) \quad (2.17)$$

onde \vec{r}_{ik} é o vetor que representa a distância entre os momentos magnéticos das células i e k . Nesse caso o vetor \vec{r}_{ik} é dado em função da dimensão lateral de uma célula (δ). Reescrevemos \vec{r} como: $\vec{r} = \delta\vec{n}$, onde \vec{n} é um vetor adimensional que representa a distância entre células de simulação em função de suas arestas. Desse modo, a equação anterior pode ser reescrita como:

$$E_{dip} = \frac{M_S^2 V^2}{2\delta^3} \sum_i \sum_k \left(\frac{\hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_k}{n_{ik}^3} - \frac{3(\hat{\mu}_i \cdot \vec{n}_{ik})(\hat{\mu}_k \cdot \vec{n}_{ik})}{n_{ik}^5} \right) \quad (2.18)$$

onde i representa agora a localizações das células unitárias na rede do sistema e admite todas as posições, e k seus vizinhos dipolares, todo o sistema. O fator $1/2$ na equação 2.18 corrige a somatória, para evitar contagem dupla das energias do sistema.

2.3.2 Energia total

Sabendo agora todas as energias envolvidas no sistema, podemos escrever a energia total, como sendo a soma de todas as energias. Desse modo:

$$\begin{aligned} E_T^V = & \frac{A}{d^2} \sum_j \sum_k (i - \hat{\mu}_j \cdot \hat{\mu}_k) - M_S \vec{H}_I \cdot \sum_i \hat{\mu}_i - \\ & M_S \vec{H} \cdot \sum_j \hat{\mu}_j - K \sum_j (\hat{\mu}_j^x)^2 + \\ & \frac{M_S^2}{2} \sum_i \sum_k \left(\frac{\hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_k}{n_{ik}^3} - \frac{3(\hat{\mu}_i \cdot \vec{n}_{ik})(\hat{\mu}_k \cdot \vec{n}_{ik})}{n_{ik}^5} \right) \end{aligned}$$

2.4 Cálculo do Campo Efetivo

Conhecendo a energia total vista anteriormente, podemos calcular o campo local sob uma célula de simulação através do divergente da energia de cada célula de simulação em relação a seu momento magnético local.

$$\vec{H}_i^p = -\frac{1}{M_S} \frac{\partial E_T}{\partial \hat{\mu}_i^p} \quad (2.19)$$

onde p indica as direções x , y e z do campo local. Como vimos na seção anterior, podemos calcular separadamente cada campo usando a energia por unidade de volume.

2.4.1 Campo de troca

O campo de troca que atua em uma célula i na direção p será dado por:

$$\begin{aligned} \vec{H}_{i,exc}^p &= -\frac{1}{M_S} \frac{\partial E_e}{\partial \hat{\mu}_i^p} \\ \vec{H}_{i,exc}^p &= \frac{1}{M_S} \frac{\partial}{\partial \hat{\mu}_i^p} \left[\frac{A}{d^2} \sum_j (1 - \hat{\mu}_i^p \cdot \hat{\mu}_j) \right] \\ \vec{H}_{i,exc}^p &= \frac{A}{M_S d^2} \sum_j \hat{\mu}_j^p \end{aligned}$$

Onde j corresponde as células de primeiros vizinhos às células i .

2.4.2 Campo Zeeman

$$\begin{aligned} \vec{H}_{i,zee}^p &= -\frac{1}{M_S} \frac{\partial}{\partial \hat{\mu}_i^p} \left[-\vec{H} \cdot M_S \sum_i \hat{\mu}_i^p \right] \\ \vec{H}_{i,zee}^p &= \vec{H} \end{aligned}$$

Que corresponde ao campo externo aplicado ao material, apresenta-se por igual em todas as células do sistema.

2.4.3 Campo de interface

Como ja foi dito, o acoplamento de interface entre o ferromagneto e o anti-ferromagneto é do tipo troca, e será representado por um campo chamado campo de interface, H_{INT} , que atua somente na primeira camada de células de simulação. Em contato com o substrato antiferromagnético, o valor desse campo será:

$$\vec{H}_{i,INT}^p = -\frac{1}{M_S} \frac{\partial}{\partial \hat{\mu}_i^p} \left[-\vec{H}_{INT} \cdot M_S \sum_i \hat{\mu}_i^p \right]$$

$$\vec{H}_{i,INT}^p = \vec{H}_{INT}^i$$

2.4.4 Campo de anisotropia uniaxial

O campo de anisotropia uniaxial apresenta valores máximos para magnetização da célula sobre o eixo chamado fácil. E conseqüentemente este alinhamento dá o mínimo da energia de anisotropia. O campo de anisotropia sobre cada célula de simulação será dado por:

$$\vec{H}_{i,anis}^p = -\frac{1}{M_S} \frac{\partial}{\partial \hat{\mu}_i^p} [-K \mu^{x2}]$$

$$\vec{H}_{i,anis}^p = \frac{2K}{M_S} \hat{\mu}^x$$

Considerando x como o eixo fácil, este campo só existe para $p = x$. Este campo é bastante conhecido na literatura e indica o campo de reversão de um filme com valor de K elevado, comparado com a densidade de energia magnetostática, que é proporcional ao parâmetro M_S . Neste caso, o campo de anisotropia é uma boa aproximação do campo coercivo. Para materiais com K de baixa intensidade, por exemplo o Permalloy, os efeitos dipolares

representados pelo parâmetro M_S dominam a conformação magnética dos elementos desse material.

2.4.5 Campo dipolar

O campo dipolar é um campo de longo alcance. Cada célula i atua sobre todas as outras do sistema k , e sua direção e sentido não é tão trivial quanto as direções e sentidos dos campos vistos anteriormente. Neste caso, escreveremos todas as componentes do campo dipolar. Primeiro, a componente $p = x$ deste campo:

$$\begin{aligned}\vec{H}_{i,dip}^x &= -M_S \frac{\partial}{\partial \hat{\mu}_i^x} \sum_k \left(\frac{\hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_k}{n_{ik}^3} - \frac{3(\hat{\mu}_i \vec{n}_{ik})(\hat{\mu}_k \vec{n}_{ik})}{n_{ik}^5} \right) \\ \vec{H}_{i,dip}^x &= M_S \frac{\partial}{\partial \hat{\mu}_i^x} \sum_k \left(\frac{3(\mu_i^x n_{ik}^x + \mu_i^y n_{ik}^y + \mu_i^z n_{ik}^z)(\mu_k^x n_{ik}^x + \mu_k^y n_{ik}^y + \mu_k^z n_{ik}^z)}{n_{ik}^5} \right) \\ &\quad - M_S \frac{\partial}{\partial \hat{\mu}_i^x} \sum_k \left(\frac{\mu_i^x \mu_k^x + \mu_i^y \mu_k^y + \mu_i^z \mu_k^z}{n_{ik}^3} \right)\end{aligned}$$

onde n_{ik} é a distância entre a célula de simulação i e a célula de simulação k . Assim sendo, o campo dipolar na direção x se torna:

$$\vec{H}_i^{x,dip} = M_S \sum_k \left(\frac{3n_{ik}^x (\mu_k^x n_{ik}^x + \mu_k^y n_{ik}^y + \mu_k^z n_{ik}^z)}{n_{ik}^5} - \frac{\mu_k^x}{n_{ik}^3} \right)$$

Por analogia, escrevemos facilmente os termos para as direções y e z :

$$\vec{H}_i^{y,dip} = M_S \sum_k \left(\frac{3n_{ik}^y (\mu_k^x n_{ik}^x + \mu_k^y n_{ik}^y + \mu_k^z n_{ik}^z)}{n_{ik}^5} - \frac{\mu_k^y}{n_{ik}^3} \right)$$

$$\vec{H}_i^{z,dip} = M_S \sum_k \left(\frac{3n_{ik}^z (\mu_k^x n_{ik}^x + \mu_k^y n_{ik}^y + \mu_k^z n_{ik}^z)}{n_{ik}^5} - \frac{\mu_k^z}{n_{ik}^3} \right)$$

Assim, descrevemos todos os campos envolvidos na configuração de equilíbrio de uma estrutura ferromagnética. O arranjo magnético da estrutura que dá o mínimo de energia do sistema é o arranjo em que os momentos magnéticos locais se alinham com o campo magnético local sobre cada célula expostos acima, como veremos na seção a seguir.

2.5 Cálculo auto-consistente

Cada célula de simulação sofre a ação de um campo efetivo, o qual é determinado pela soma vetorial de todos os campos já apresentados sobre a mesma. A configuração de equilíbrio da estrutura acontecerá quando o momento magnético de cada célula estiver alinhado com o somatório destes campos locais, ou seja, a configuração de menor torque entre a direção do momento magnético de cada célula e o campo médio local que atua sobre ela.

O cálculo auto-consistente[13, 14, 15, 16, 17] é usado para encontrar esta configuração. Este cálculo consiste na seguinte sequência.

1. Inicializamos o sistema com uma configuração magnética.
2. Calculamos o campo médio local sobre cada célula e comparamos este valor calculado com a configuração magnética através do torque entre a direção dos momentos magnéticos de cada célula e a direção do campo médio local destas.
3. Se o torque for menor que um valor baixo previamente estabelecido, chamado valor de tolerância, então aceitamos esta configuração como sendo a configuração de equilíbrio do sistema.
4. Caso contrário, os momentos são alinhados com o campo médio calculado previamente, e fazemos um novo cálculo do campo médio sobre cada célula.

Este processo se repete até que o torque seja menor que a tolerância,

ou até que extrapole o número máximo de interações previamente estabelecido.

Capítulo 3

Nanoelementos Cilíndricos

3.1 Introdução

O espectro de aplicações de sistemas magnéticos nanométricos é amplo. Abrange desde a produção de materiais para sistemas de gravação magnética de alta densidade até o desenvolvimento de técnicas avançadas na área biomédica, particularmente na vetorização de fármacos, na hipertermia, em sistemas para a separação celular, e em ferrofluidos usados como contrastes injetáveis para melhorar a definição das imagens em exames de ressonância magnética.

A estabilidade térmica tem papel relevante no potencial tecnológico de nanopartículas magnéticas. Curiosamente há dois limites: em aplicações magneto-eletrônicas se buscam partículas termicamente estáveis, ao passo que grande número de aplicações biomédicas faz uso de partículas que são necessariamente instáveis termicamente.

A busca pelo desenvolvimento de novas tecnologias na indústria de gravação magnética tem proporcionado o desenvolvimento de novos materiais, onde as propriedades possam ser controladas e mesmo projetadas previamente. Neste contexto, o nanomagnetismo é uma área que trata dos fenômenos magnéticos presentes em estruturas com dimensões nanométricas (10^{-9} m).

A área da nanociência está intimamente ligada a novos desafios tecnológicos, que começou com a descoberta do efeito da magnetoresistência gigante [2] em 1988, permitindo grande avanço em sistemas computacionais. Com o aumento do entendimento e controle dos fenômenos nanomagnéticos, importantes aplicações têm sido propostas, tais como a produção de ímãs permanentes ultra-fortes, sistemas de armazenamento de informações magnéticas com altíssima densidade, nanosensores biomagnéticos, eletrônica baseada no momento magnético do elétron, etc. [18].

Na escala nanométrica, efeitos de tamanho, como confinamento de superfície passam a ter grande influência nas propriedades do sistema, o que pode ter consequências tanto positivas como negativas dependendo do tipo de aplicação [19]. Um exemplo é o regime superparamagnético que surge quando a redução de tamanho da nanopartícula é suficiente para que o seu momento magnético não fique estável no eixo magnético preferencial durante um tempo típico de medida [20]. Para aplicações em meios de gravação essa questão vem sendo cuidadosamente abordada, pois representa um fator limitante na busca ao menor área para gravação de um *bit* de informação possível. Por outro lado, a influência das interações magnéticas nesses sistemas também pode ser outro fator limitante.

O entendimento do comportamento magnético de nanoestruturas é de grande relevância para a indústria de gravação magnética. Tem sido , sendo importante observar o formato dessas nanoestruturas bem como os materiais usados. Em especial, nanoelementos cilíndricos com dimensões menores do que 100nm têm sido bastante estudados pelos pesquisadores da área, pois dentre outras características, sua forma pode favorecer os mais variados estados da magnetização [1, 10, 21, 22, 23].

3.2 Estados Magnéticos Remanentes e Processos de Magnetização

Antes de apresentarmos nossos resultados, o conceito de remanência e processos de magnetização se fazem fundamentais. Uma relação fundamental em magnetismo é dada pela dependência da magnetização M como função de um campo externo aplicado H , como mostrado na Figura 3.1. À medida que o material ferromagnético é submetido a um campo aplicado com valores cada vez maiores, a magnetização total aumenta até que o material fica saturado (trecho ab na Figura 3.1). Observa-se que (no ponto c) embora o campo aplicado H seja nulo a magnetização não o é, ela tem valor igual a M_r .

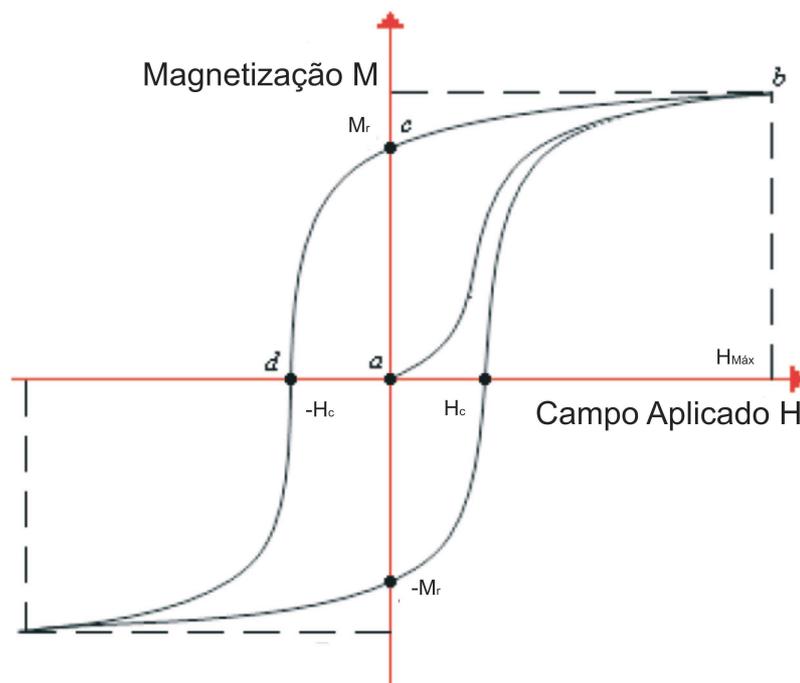


Figura 3.1: Curva de histerese magnética de um material ferromagnético.

Esse valor M_r é conhecido como magnetização remanente ou remanência. Ao passo que se diminui H gradualmente, M varia ao longo

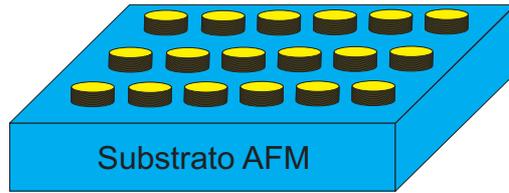


Figura 3.2: Figura esquemática de uma matriz de nanoelementos ferromagnéticos crescidos sobre substratos antiferromagnéticos.

de bc (para um dado valor de H , o valor de M será maior, que no trecho ab , quando H diminuir do que quando aumentar). Diz-se que M se atrasa com relação a H . Esta característica dos materiais ferromagnéticos é conhecida como histerese[24, 25].

Baseado no método de campo local autoconsistente [13, 14, 15, 16, 17] e utilizando a teoria micromagnética apresentaremos um estudo das fases magnéticas de nanocilindros magnéticos crescidos sobre substratos antiferromagnéticos, conforme figura esquemática figura3.2.

3.3 Fases Magnéticas de Nanocilindros Magnéticos

Os efeitos da forma geométrica do nanoelemento são de fundamental importância para as fases magnéticas que se apresentam sob o mesmo, como veremos adiante. Os estados magnéticos que apresentaremos a seguir compõem os diagramas de fases magnéticas de nanoelementos ferromagnéticos. Identificamos os modos de magnetização de estruturas para campo $H = 0$, remanência. O processo consiste de saturar o nanoelemento ferromagnético em campo alto (H_S) e, em seguida, remover o campo gradualmente. A configuração magnética do nanoelemento nesse ponto será chamada magnetização remanente, e os estados característicos observados em nanoelementos cilíndricos com dimensões que variam de 21nm até 81nm de diâmetro (d) e/ou altura (h) serão descritos nas subseções abaixo.

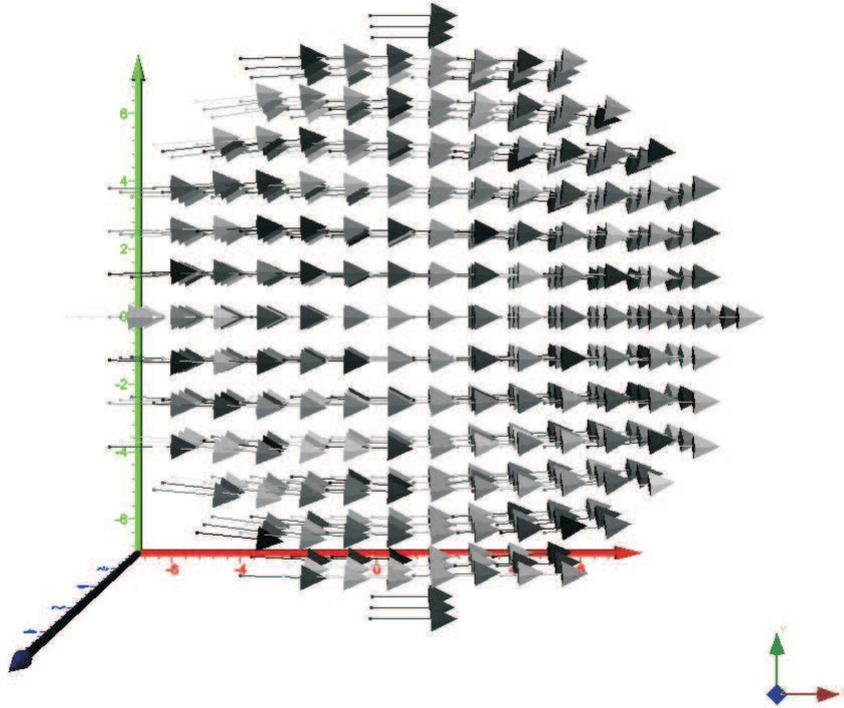


Figura 3.3: Exemplo de fase magnética onde a magnetização tem a configuração uniforme, ao longo do eixo fácil. Os eixos indicam as posições dos momentos magnéticos e as setas indicam a direção da magnetização nesta posição.

3.3.1 Fase Uniforme

O estado magnético é dito uniforme quando os momentos magnéticos estão alinhados entre si (ver figura 3.3). Nossos resultados indicam que essa fase é favorecida para os casos em que o nanoelemento é baixo, com altura da ordem de seu comprimento de troca ($\lambda_{exc}(Fe) \approx 11nm$), a ausência de espaço suficiente para mudanças consideráveis da magnetização ao longo da altura facilita com que permaneça no plano xy . Nesse caso, a remanência tem um valor alto, pois a magnetização está orientada na direção do eixo x .

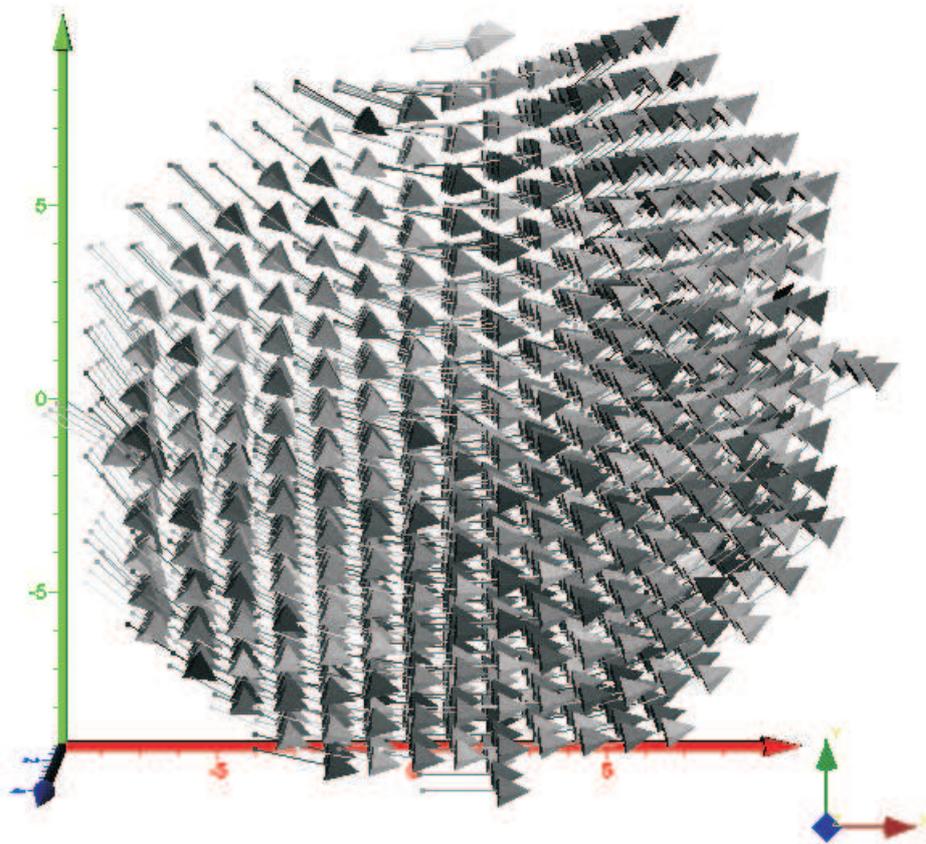


Figura 3.4: Exemplo de fase magnética onde a magnetização tem a forma tipo C . Os eixos indicam as posições dos momentos magnéticos e as setas indicam a direção da magnetização nesta posição.

O substrato antiferromagnético tem sido usado para garantir a maior estabilidade do nanoelemento no estado magnético uniforme, embora a ação do antiferromagneto seja localizada na interface. Veremos nos diagramas de fase essa tendência.

3.3.2 Estado C no plano

Quando os momentos magnéticos se arranjam de modo a formar um C , claramente visto na Figura 3.4. Essa fase ainda é uma fase de alta remanência, mas possui um valor menor do que os valores encontrados na fase uniforme. Ainda é favorecida quando o diâmetro do nanoelemento

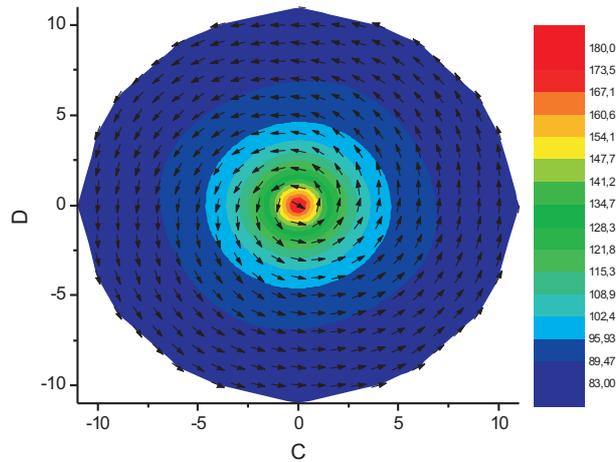


Figura 3.5: Exemplo de fase magnética onde a magnetização toma a forma de um vórtice no plano xy . Nanoelemento de Fe com dimensões $d = 69nm$ e $h = 30nm$. Os eixos indicam as posições dos momentos magnéticos e as setas indicam a direção da magnetização nesta posição.

cilindrico d é maior do que a altura h , e a magnetização se encontra totalmente no plano.

3.3.3 Fase vórtice no plano

O estado vórtice se dá quando há fechamento de fluxo dos momentos magnéticos ao longo do corpo do nanoelemento. Devido a presença do campo dipolar, a magnetização se curva de modo a não haver carga magnética de superfícies, resultado do compromisso entre as energias e as fontes de carga magnética de volume e de superfície, presente no nanoelemento como um todo. Estados magnéticos uniforme, por exemplo, tem alta carga magnética de superfície, o que é desfavorável do ponto de vista dipolar. Como resultado da minimização local da energia total, a magnetização pode formar um vórtice, ou seja, tomar uma forma circular. O campo dipolar é diretamente proporcional a magnetização de saturação do material M_S , logo material que possuir maior valor da magnetização de

saturação tem a fase vórtice favorecida. Um outro fator que favorece a fase vórtice no plano são as dimensões do nanoelemento, uma vez que estamos estudando nanoelementos com simetria cilíndrica figura 3.5. É também observado que os vórtices possuem sempre chiralidade no sentido horário, porém a polaridade (sentido da magnetização no centro do vórtice) pode variar, de acordo com as dimensões do nanoelemento.

3.3.4 Fase vórtice Perpendicular

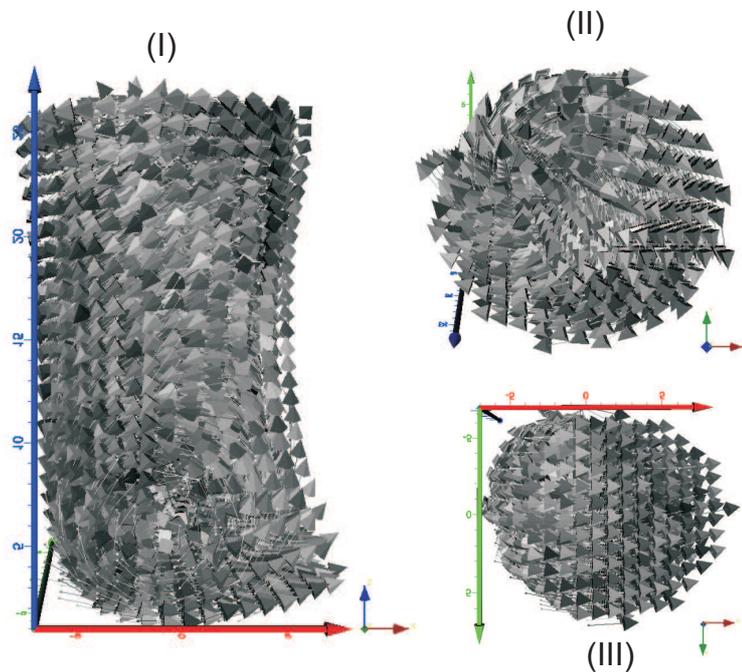


Figura 3.6: Exemplo da fase vórtice, com a presença do campo de interface. Vista lateral(I), do topo (II) e da base (III) do nanoelemento com dimensões $d = 45nm$ e $h = 81nm$. Os eixos indicam as posições dos momentos magnéticos e as setas indicam a direção da magnetização nesta posição.

Uma variação do estado magnético de vórtice no plano aparece quando há o acoplamento do substrato antiferromagnético com o nanoelemento. Dependendo da intensidade do campo de interface e das dimensões físicas do nanoelemento ferromagnético, os momentos magnéticos da camada da interface entre o antiferromagneto e o nanoelemento se alinham na direção

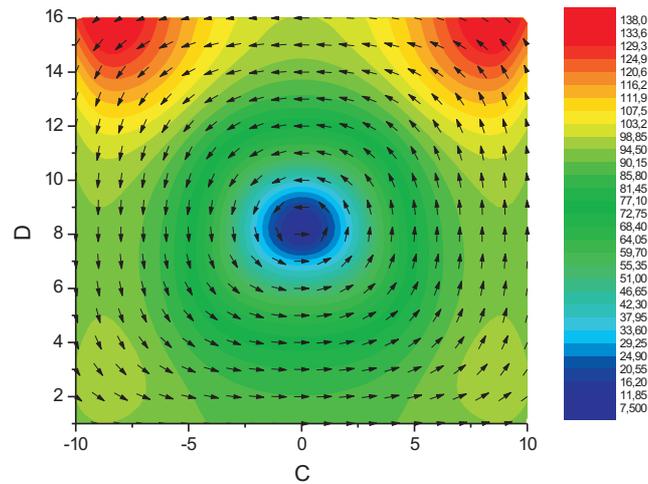


Figura 3.7: Configuração de um plano vertical que passa pelo centro do nanoelemento. As cores indicam a componente y da magnetização.

do campo de interface, ver figura 3.6. Para um nanoelemento de Fe que tem a interface com os momentos alinhados na direção do campo de interface, podemos ver a formação de vórtices no plano e perpendiculares. A Figura 3.6.I mostra o estado magnético, formação de vórtice perpendicular, do nanoelemento como um todo. A figura3.6.II evidencia um vórtice formado na superfície do nanoelemento, enquanto que a figura3.6.III mostra que a interface fica alinhado com o campo de troca na interface FM/AFM.

A fase vórtice perpendicular também é favorecida quando o diâmetro do nanoelemento é da ordem da sua altura. Nessa fase, a magnetização mais uma vez se fecha em um vórtice com a finalidade de diminuir a carga de superfície. A magnetização na camada da interface toma uma direção do acoplamento Antiferromagnético, ou seja, a direção do campo de interface. A Figura 3.7 mostra a configuração da magnetização num plano vertical que corta o centro do nanoelemento).

Ainda para essas dimensões, mostramos na Figura3.8 a configuração da magnetização na camada do topo do nanoelemento que toma a direção

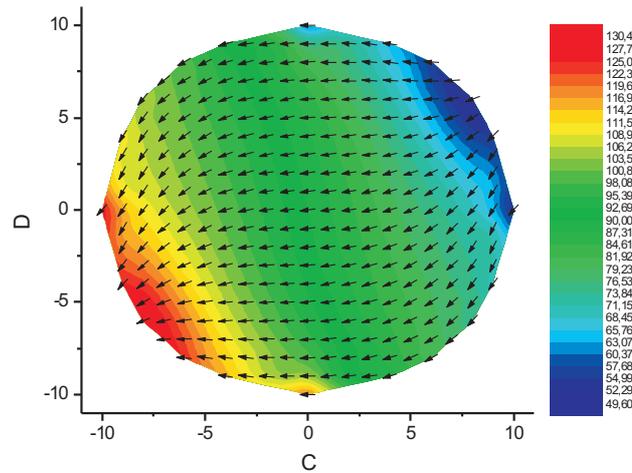


Figura 3.8: Configuração do topo do nanoelemento que apresenta o estado vórtice perpendicular. As cores indicam a componente z da magnetização

contrária a encontrada na base (ver Figura 3.9). Desse modo, no centro do nanoelemento, há o surgimento do vórtice ao longo do eixo perpendicular (eixo z . Ver figura 3.7).

3.3.5 Fase Perpendicular

Essa fase se apresenta predominantemente quando a altura do nanoelemento é muito maior do que seu diâmetro. Nesse caso, predomina a anisotropia de forma onde a magnetização tende a se alinhar na direção em que o nanoelemento está alongado, ver Figura 3.10. Como a altura (eixo z) é maior do que o diâmetro, a magnetização do nanoelemento inteiro sai do plano, direcionada para cima, ao longo do eixo z do nanoelemento.

3.3.6 Fase C Perpendicular

Poderíamos dizer que essa fase é uma variação da fase perpendicular. Nesse caso, a magnetização também sai do plano, com a diferença que a interface está "presa" ao substrato, formando um c na configuração da magnetização,

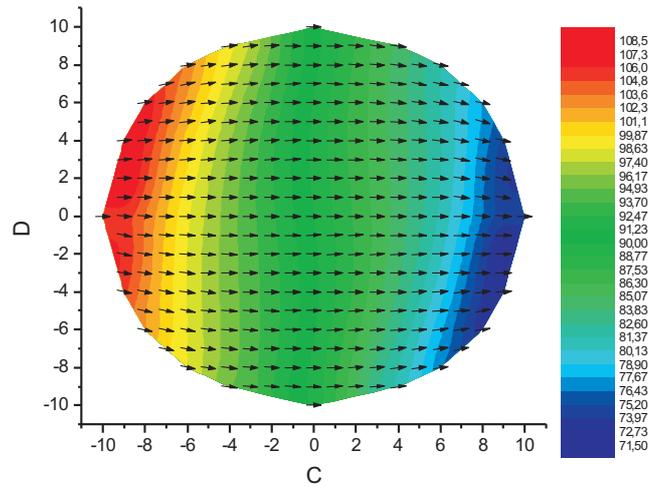


Figura 3.9: Configuração da base do nanoelemento no estado vórtice perpendicular. As cores indicam a componente z da magnetização

conforme podemos ver na Figura 3.11.

Tendo um conhecimento global as fases que se apresentam em nanoelementos cilíndricos de Fe e Py com dimensões de até 81nm de diâmetro e/ou de altura, podemos agora analisar seus diagramas de fases magnéticas.

3.4 Diagramas de fase

Os diagramas de fases magnéticas exibem os estados magnéticos estáveis em remanência. Consideramos nanoelementos cilíndricos de Fe[17, 23, 26] e Py[17, 27, 28]. Baseados na teoria de micromagnetismo descrita anteriormente para a descrição de sistemas magnéticos nanométrico, temos que a densidade de energia magnética total do sistema é dada por:

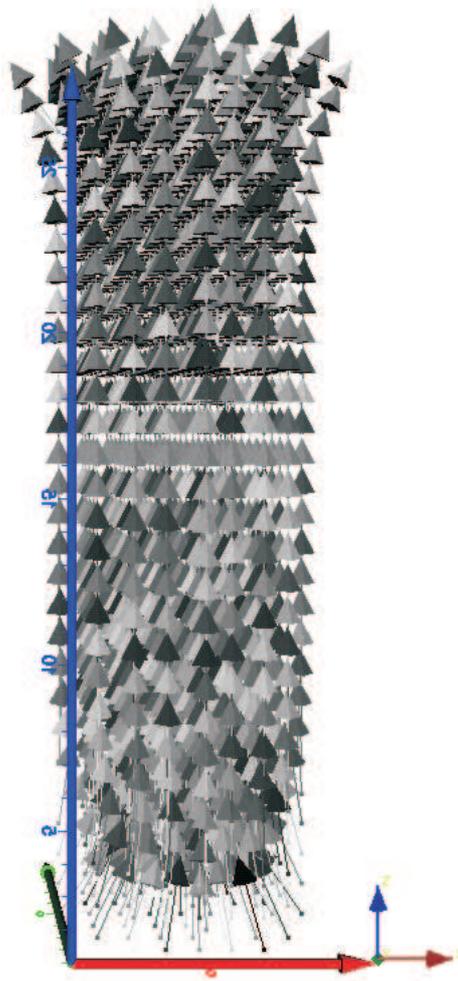


Figura 3.10: Configuração da magnetização do nanoelemento no estado perpendicular. Nanoelemento de Fe com dimensões $d = 27nm$ e $h = 81nm$. Os eixos indicam as posições dos momentos magnéticos e as setas indicam a direção da magnetização nesta posição.

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

onde o primeiro termo corresponde a energia de troca entre as células primeiras vizinhas; o segundo termo é o termo de energia de interface, devido ao campo de troca com o substrato antiferromagnético; o terceiro

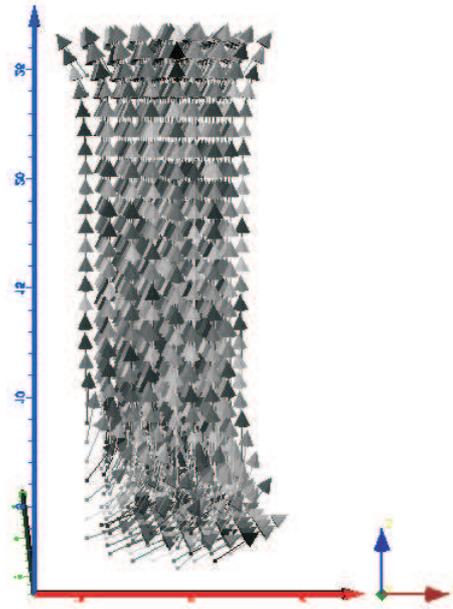


Figura 3.11: Configuração da lateral do nanoelemento no estado c-perpendicular. Os eixos indicam as posições dos momentos magnéticos e as setas indicam a direção da magnetização nesta posição.

termo corresponde a energia Zeeman devido ao campo externo aplicado; o quarto corresponde a energia de anisotropia uniaxial; e finalmente o último termo que corresponde a energia de interação dipolar, entre todos os momentos de todas as células.

A descrição teórica é baseada no modelo efetivo local auto-consistente, onde o campo efetivo é dado por:

$$\vec{H}_i = -\frac{1}{M_S} \frac{\partial \epsilon}{\partial \hat{\mu}_i}. \quad (3.2)$$

Os estados magnéticos apresentados foram obtidos a partir do estado de remanência dos nanoelementos ferromagnéticos. Os parâmetros utilizados nas simulações estão apresentados na Figura 4.2:

O diagrama de fase mostrado na figura 3.12 corresponde ao Fe, na ausência do campo de interface. Notamos que, para o ferro, a faixa de estado vórtice no plano é maior do que para o permalloy (figura 3.15). Isso se dá devido a magnetização de saturação do ferro ser maior do que a do

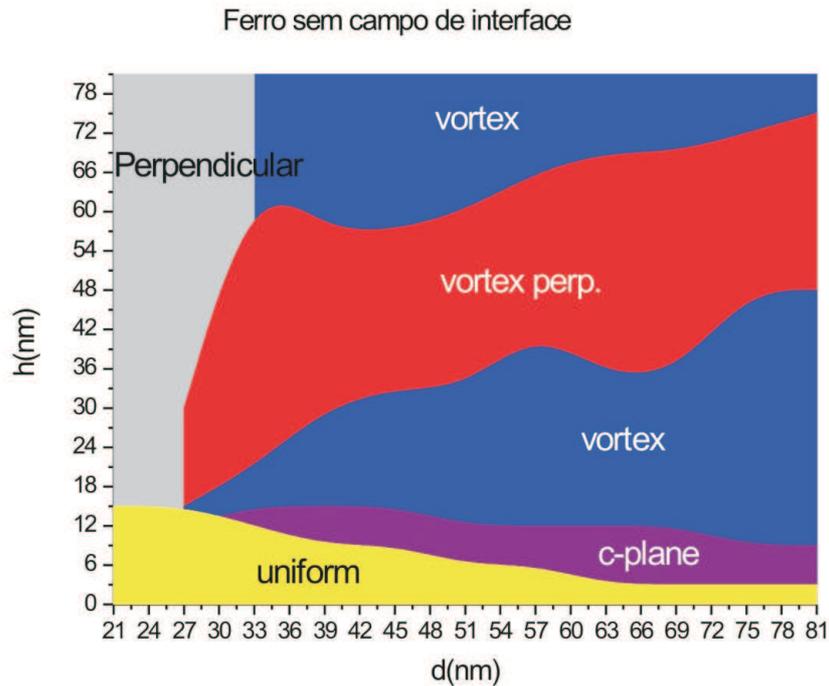


Figura 3.12: Diagrama de fase para o ferro, sem o acoplamento com o substrato antiferromagnético

permalloy, ou seja, para o ferro, os efeitos dipolares são maiores, fazendo com que o estado vórtice se forme com mais facilidade.

Já a figura 3.13 mostra que para o ferro acoplado ao substrato antiferromagnético, a fase uniforme é favorecida em relação ao nanoelemento sem acoplamento, como já dito anteriormente. Outro detalhe é que, com a presença do campo de interface, há uma tendência maior de aparecer o estado de vórtice perpendicular, uma vez que a camada da interface está fixa, e para diminuir a carga de superfície a magnetização toma a direção oposta no topo do nanoelemento, formando o vórtice perpendicular.

No permalloy, figura 3.15 os efeitos dipolares são menores, já que o M_S do permalloy é menor do que o do ferro. Outro fato marcante desse material é que ele possui anisotropia muito baixa (desprezada em nosso cálculo), fato que faz com que a magnetização saia mais facilmente do

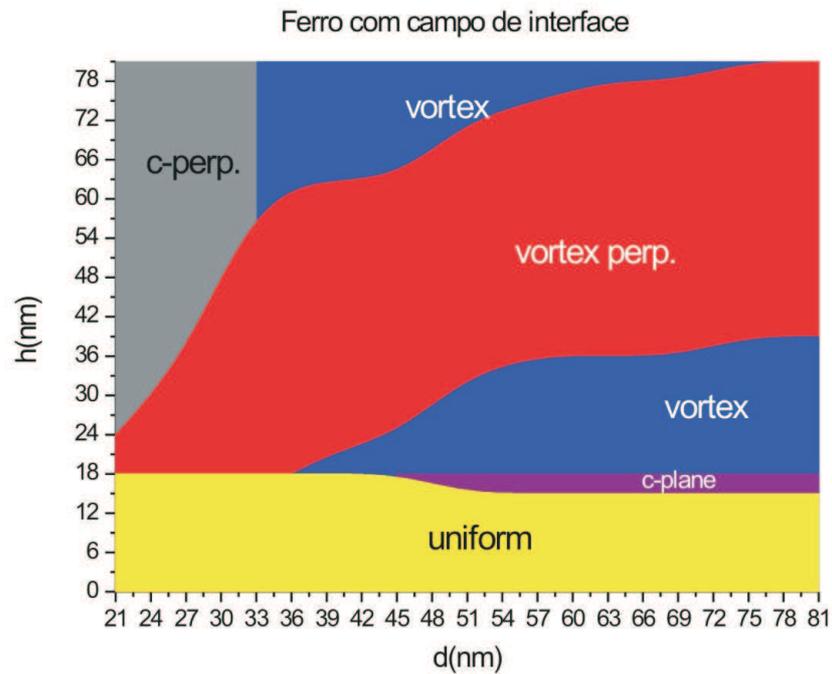


Figura 3.13: Diagrama de fase para o ferro, com o acoplamento com o substrato antiferromagnético

plano, outro fator que favorece o estado vórtice perpendicular.

Na figura 3.17, apresentamos resultados obtidos na referência [1]. Este consiste de um diagrama de fase de permalloy em função do diâmetro (d) e da altura (h). Os dados experimentais apresentam três fases: Monodomínio no plano, fora do plano e vórtice. No mesmo trabalho é feita uma aproximação numérica usando o OOMMF [29, 30]. Comparando os resultados da referência [1] com os nossos (figura 3.15, vê-se uma boa correlação. A figura 3.18 mostra essa correlação.

3.5 Conclusões

Mostramos que a magnetização remanente de um nanoelemento ferromagnético cilíndrico pode ter várias conformações, devido a sua forma

| | Fe | Py |
|---|-----------------------|-----------------------|
| $M_S(A/m)$ | $1,7 \times 10^6$ | $0,8 \times 10^6$ |
| $A(J/m)$ | $2,5 \times 10^{-11}$ | $1,3 \times 10^{-11}$ |
| $H_{EXC}(T) = A/M_S d^2$ | $14,7/d_{nm}^2$ | $16,25/d_{nm}^2$ |
| $K(J/m^3)$ | $4,7 \times 10^4$ | <i>zero</i> |
| $H_{anis} = 2K/M_S(10^4 G)$ | 0,055 | <i>zero</i> |
| $l_{EXC} = \pi \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}}$ | 11,65nm | 17,86nm |

Figura 3.14: Tabela com os valores das constantes utilizadas em nosso trabalho

geométrica e dimensões (diâmetro e altura). A energia dipolar é fundamental na formação destas fases, uma vez que ela tenta diminuir a carga de superfície que se faz presente em nanoelementos com o estado uniforme. Mostramos também que o acoplamento de interface induz o surgimento de novas fases magnéticas, pois a interface está estabilizada pelo substrato. Nesse caso, vimos que a fase uniforme aparece em uma faixa maior no diagrama de fase, o que era de se esperar, pois o acoplamento com o substrato dá uma anisotropia extra ao material, fazendo com que haja uma tendência da magnetização de se manter fixa na direção do campo de interface. Outro fato interessante é que, fases como vórtices no plano e perpendicular, sofrem leves modificações em suas configurações, pois agora a interface está estabilizada.

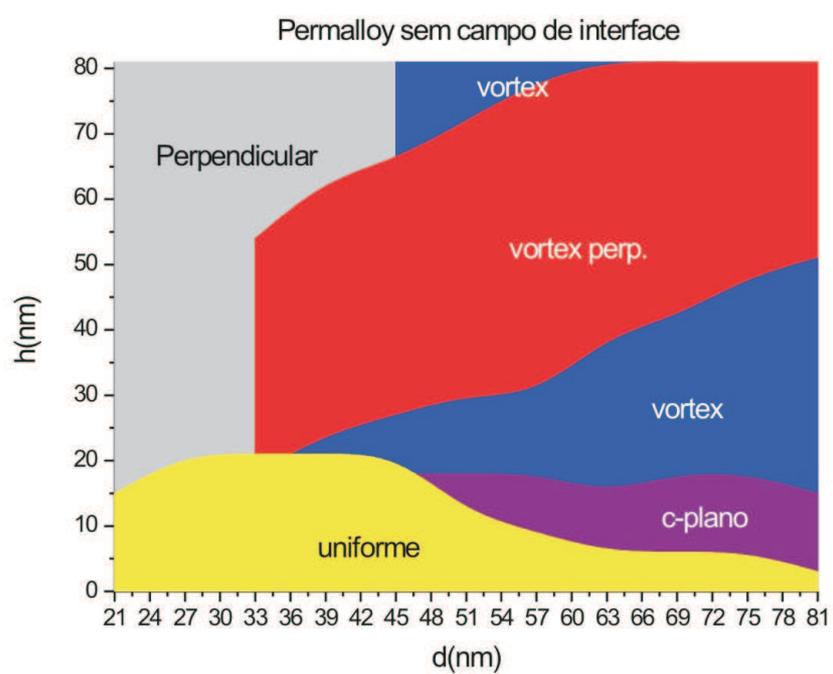


Figura 3.15: Diagrama de fase para o permalloy, sem o acoplamento com o substrato antiferromagnético

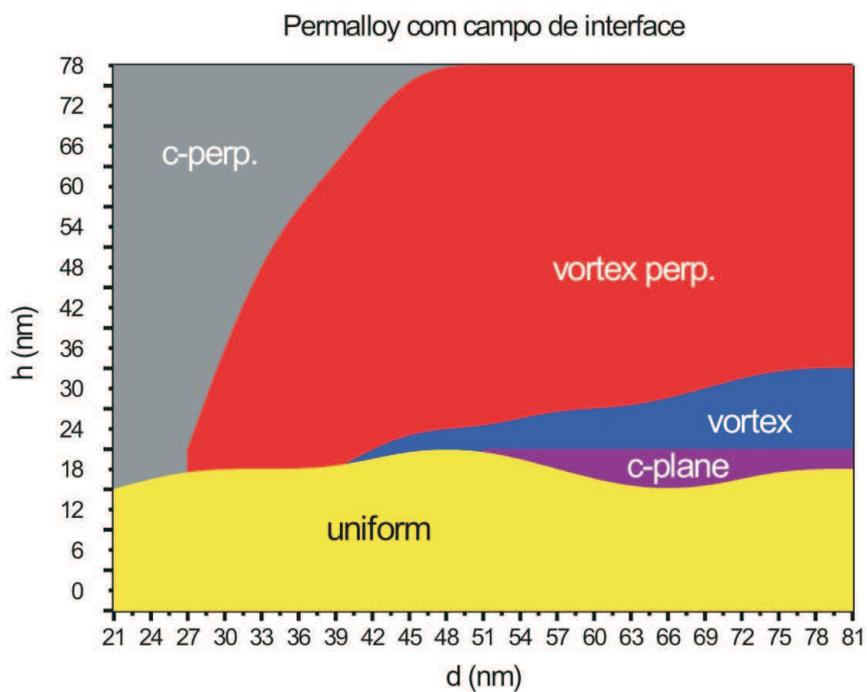


Figura 3.16: Diagrama de fase para o permalloy, com o acoplamento com o substrato antiferromagnético

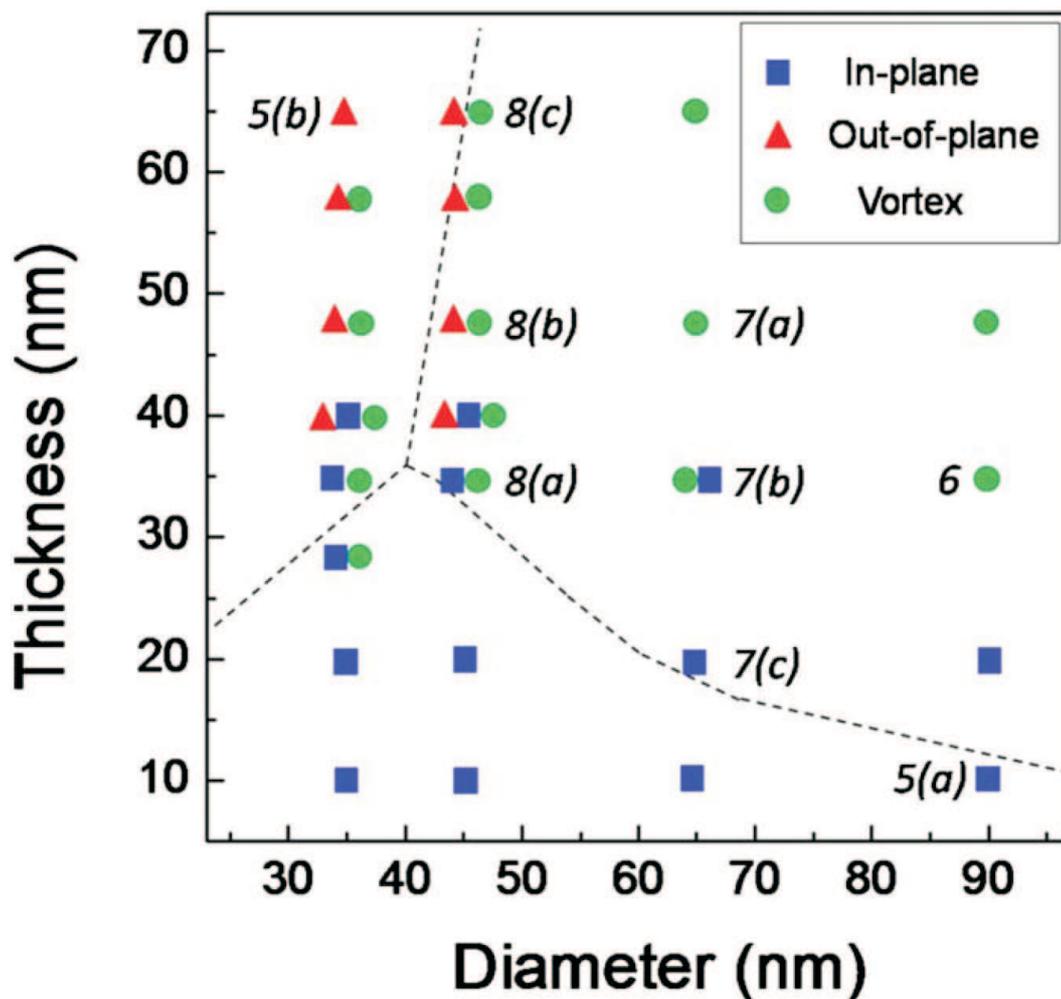


Figura 3.17: Diagrama de fase experimental para o permalloy, sem o acoplamento com o substrato antiferromagnético, encontrado por [1]. Os resultados foram analisados por microscopia eletrônica, e os resultados obtidos mostram os símbolos azuis correspondendo ao estado uniforme no plano, os vermelhos ao estado uniforme fora do plano e os verdes ao estado vórtice.

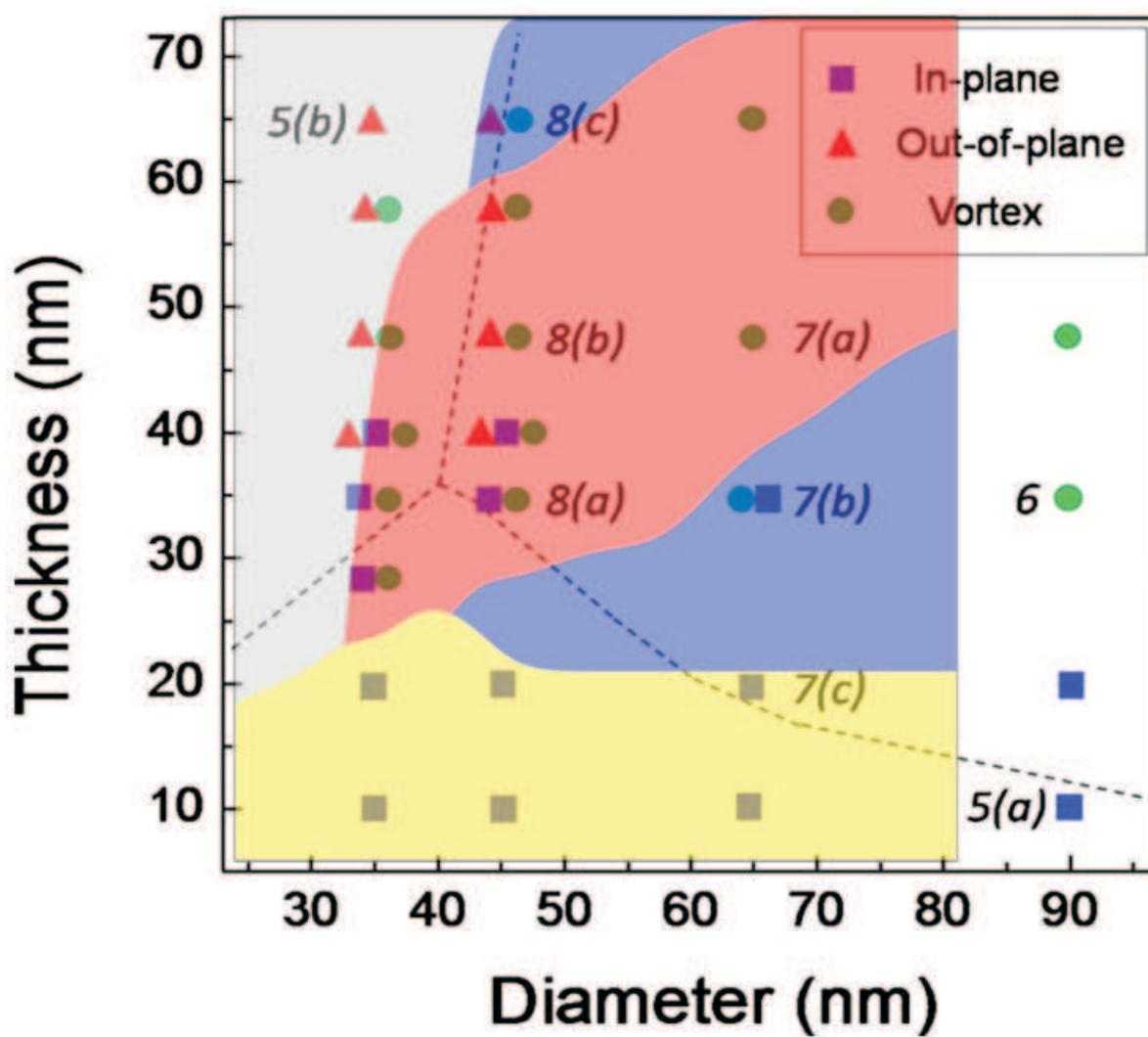


Figura 3.18: Comparação dos resultados obtidos por nós 3.15 e os resultados obtidos no artigo [1].

Capítulo 4

Nanoelementos Elipticos

4.1 Introdução

Existem duas maneiras interessantes de controlar os estados magnéticos e as curvas de histerese de materiais ferromagnéticos de baixa anisotropia. Organizar arranjos de nanoelementos de materiais ferromagnéticos que levam a um aumento dos efeitos do campo demagnetizante, favorecendo a formação de estados de fluxo fechado, notavelmente o estado vórtice de nanoelementos circulares e o estado de Landau para nanoelementos quadrados [31, 32]. Por outro lado, um material ferromagnético acoplado a um substrato antiferromagnético, com alta anisotropia, é submetido a uma fonte extra de energia de troca, favorecendo a formação dos estados uniformes [33, 34].

Resultados experimentais de nanoelementos elípticos de permalloy acoplados a um substrato antiferromagnético mostram que a natureza da reversão da magnetização é na maior parte das vezes determinada pela anisotropia de forma, enquanto o campo de interface, devido ao substrato antiferromagnético, tem um papel menos relevante. No entanto, para algumas combinações de dimensões, razão entre os eixos maior e menor (a/b), de dots elípticos e campo aplicado, variações na direção do campo de interface pode acarretar em uma mudança dos estados magnéticos na reversão da magnetização. Como por exemplo, de uma reversão via formação do

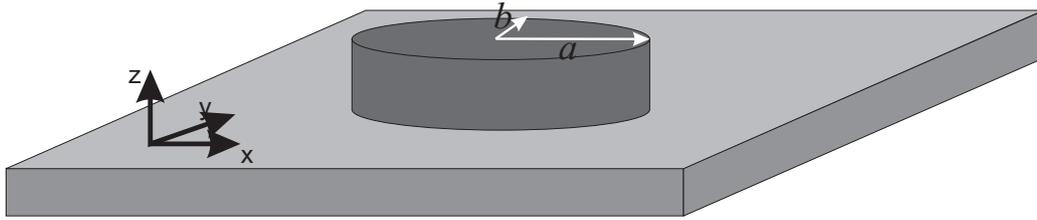


Figura 4.1: Figura esquemática. Nanoelementos elípticos crescidos sobre um substrato antiferromagnético. Onde a (b) é o eixo maior (menor) da elipse no plano xy .

estado vórtice para uma reversão dominada pela rotação da magnetização [35].

Sistemas nanoestruturados acoplados a substrato antiferromagnético oferecem um cenário particularmente interessante para a investigação da diminuição geométrica, bem como o próprio acoplamento, em fases magnéticas e mecanismos de reversão da magnetização de materiais ferromagnéticos. Recentes trabalhos em estruturas padronizadas acopladas a um antiferromagnéticos tem, frequentemente, focado em sistemas com dimensões da ordem de micrometros. Eles afirmam que o acoplamento inibe a formação de vórtice e outros estados na curva de histerese. [36].

Apresentaremos um estudo a partir da investigação da nucleação de pares de vórtices ao longo da curva de histerese em nanoelementos ferromagnéticos elípticos acoplados a um substrato antiferromagnético, com alturas (h) de 20nm a 30nm e dimensões laterais da ordem de centenas de nanômetros.

4.2 Modelo

Considerando um arranjo de nanopartículas elípticas ferromagnéticas, sobre uma substrato antiferromagnético, onde as distâncias são tais que não haja interações entre elas, podemos nos limitar ao estudo de uma única nanopartícula (ver Fig.4.1). No nosso sistema, o eixo fácil da anisotropia

uniaxial, ao longo do eixo x , é paralelo ao campo de interface e assumimos que o substrato antiferromagnético é congelado na ordem antiferromagnética. Baseados na teoria micromagnética, a estrutura magnética é descrita em termos dos momentos magnéticos de células cúbicas com aresta δ menor que o comprimento de troca do material. E a energia magnética total é dada por:

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

onde o primeiro termo é a energia de troca intrínseca, restrita à células primeiras vizinhas e A é a constante de troca. O segundo termo corresponde a energia de troca através da interface, a soma é restrita apenas a primeira camada de células, ou seja, as células da interface entre o nanoelemento e o substrato antiferromagnético. O terceiro termo corresponde a energia Zeeman, o quarto termo é a energia de anisotropia uniaxial, e o ultimo termo é a energia magnetostática ou dipolar. M_S é a magnetização de saturação, $\hat{\mu}_i$ é a direção do momento magnético da i -ésima célula, e n_{ij} é a distância entre as células i e j , em unidades da dimensão δ da célula.

Apresentaremos um estudo feito para nanoelemento de Fe e Py, considerando células de simulação com aresta de $\delta = 3nm$ e $\delta = 5nm$, respectivamente. Os valores dos parâmetros magnéticos podem ser vistos na figura 4.2. O campo efetivo de troca, acoplamento entre células vizinhas, é dado por: $H_E = A/M_S d^2$. O estado de equilíbrio é encontrado usando o algoritmo auto-consistente [13, 14, 15, 16, 17]. Para cada valor de campo

| | Fe | Py |
|---|-----------------------|-----------------------|
| $M_S(A/m)$ | $1,7 \times 10^6$ | $0,8 \times 10^6$ |
| $A(J/m)$ | $2,5 \times 10^{-11}$ | $1,3 \times 10^{-11}$ |
| $H_{EXC}(T) = A/M_S d^2$ | $14,7/d_{nm}^2$ | $16,25/d_{nm}^2$ |
| $K(J/m^3)$ | $4,7 \times 10^4$ | <i>zero</i> |
| $H_{anis} = 2K/M_S(10^4 G)$ | 0,055 | <i>zero</i> |
| $l_{EXC} = \pi \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}}$ | 11,65nm | 17,86nm |

externo, a configuração de equilíbrio é encontrada determinando as direções dos momentos magnéticos em todas as células e calculando o torque entre essa direção e a direção do campo local na célula, fazendo com que o valor do torque obedeça a uma tolerância de um valor próximo de zero. Para o ferro [37] e permalloy [38], os comprimentos de exchange são $11.2nm$ e $15.5nm$, respectivamente. Assim sendo, dimensões geométricas escolhidas são da ordem de algumas vezes o comprimento de exchange. Dessa forma, existe espaço para a formação de estados não-uniformes com as camadas paralelas a interface.

4.3 Resultados

A razão de escolhermos nanoelementos elípticos de ferro e permalloy com dimensões próximas a $100nm$ é porque próximo a essas dimensões, a nucleação do estado de múltiplos vórtices ou paredes de domínio é improvável. No entanto, estados de fluxo fechado são mais facilmente formados em nanoelementos com maior magnetização de saturação (M_S). Assim sendo, pode ser interessante investigar nanoelementos ferromagnéticos com baixa anisotropia, acoplados a substrato antiferromagnético, com alto e baixo valores da magnetização de saturação. O acoplamento de interface é usado para imprimir uma estabilização de estruturas magnéticas uniformes

no nanoelemento. Desse modo, é intuitivo esperar que quanto maior o valor do campo de interface, mais provável será encontrar o estado uniforme no nanoelemento, identificado por uma histerese tipo quadrada. Nós mostramos que, ao contrário da intuição, o campo de interface pode induzir a formação de pares de vórtices ao longo da curva de histerese. O campo de interface ainda afeta a chiralidade relativa e a distância entre os vórtices. O eixo fácil de anisotropia é paralelo ao campo de interface, ao longo do eixo x , e nos assumimos que o substrato antiferromagnético é congelado (possui alta anisotropia em relação ao ferromagneto) na ordem antiferromagnética. A estrutura magnética é descrita em termos do momento magnético de pequenas células cúbicas, com aresta δ menor do que o comprimento de exchange, conforme descrito no Capítulo 2, bem como as energias magnéticas foram vistas no mesmo capítulo.

Na figura 4.1, mostramos as curvas de histerese do nanoelemento com campo de interface (fora) e sem campo de interface (dentro) de um nanoelemento elíptico de Fe com dimensões $170nm \times 80nm \times 30nm$, para um valor do campo de interface de $8.17kOe$. Para o nanoelemento sem campo de interface, a reversão da magnetização apresenta um estado intermediário a nucleação de um par de vórtices, alinhados ao longo do eixo maior, com a mesma rotação, separados por um anti-vórtice, como mostrado na figura 4.1. Em (a) e (b), temos os mapas de spins do nanoelemento para valores de campo externo $H = -0.3kOe$ e $H = 0.3kOe$, respectivamente.

Para um valor maior de campo externo a região alinhada com a direção do campo externo (marcada com uma seta branca) aumenta e o par de vórtices e a estrutura anti-vórtice são expelidos para a lateral do nanoelemento até que este adquira a fase uniforme. Durante todo o processo de reversão da magnetização, a distância entre os núcleos dos vórtices é constante da ordem de $50nm$.

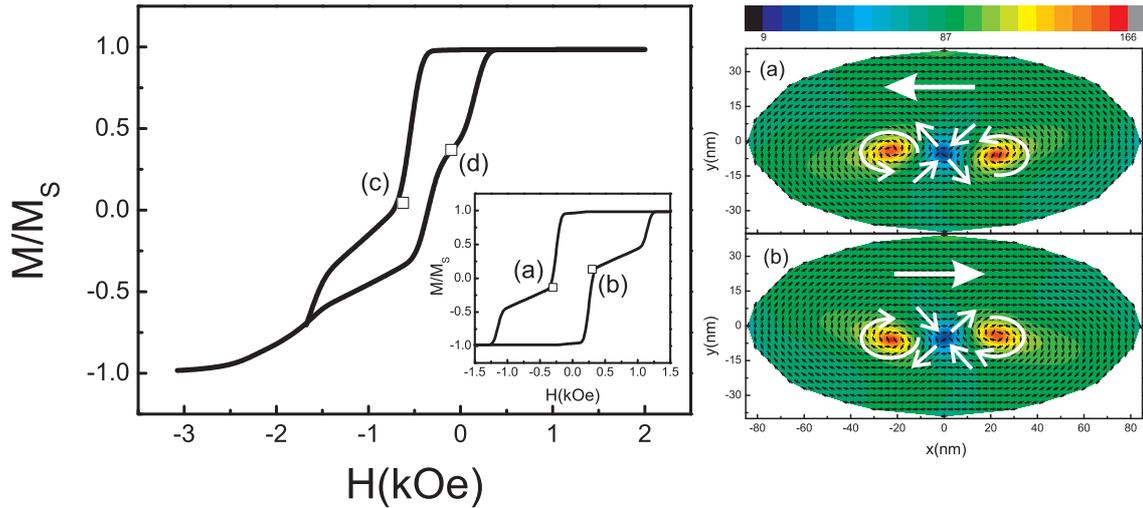


Figura 4.2: Histereses e mapas de spins de um nanoelemento de ferro acoplado (fora) e não acoplado (dentro) a um substrato antiferromagnético.

Para estas mesmas dimensões o campo de interface pode inibir a formação do anti-vórtice e o processo de reversão envolve a nucleação de um par de vórtices com rotações opostas, separados por um domínio magnético. Nesse caso, os vórtices não são alinhados ao longo da direção do eixo maior. Ao invés disso, no campo de reversão $H = -0.625kOe$, mostrado pelo quadro (c), o domínio central na interface toma a direção do campo de interface ((d) da figura 4.2), enquanto que na camada da superfície o domínio central toma a direção do campo externo aplicado.

No ramo da histerese onde há aumento de campo externo, os vórtices são empurrados em direções opostas e eventualmente expelidos em lados opostos do nanoelemento. Ao longo do caminho para a saturação na direção oposta ao campo de interface a distância entre os núcleos dos vórtices muda de cerca de $74nm$ no campo de nucleação ($H = -0.625kOe$) para cerca de $81nm$ no campo de aniquilação ($H = -1.5kOe$).

O quadro (d) da figura 4.2 acontece em $H = -0.1kOe$, com a camada da interface quase alinhada com a direção do campo de interface (conforme figura 4.3(d)) e o par de vortices com chiralidade oposta separados por um

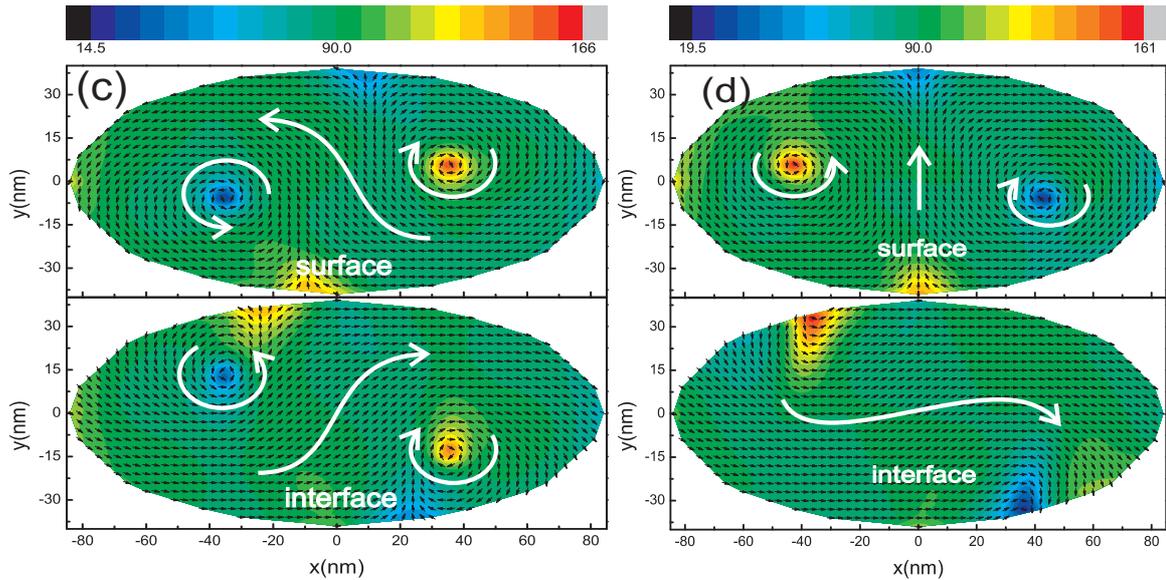


Figura 4.3: Mapas de spins de um nanoelemento de ferro acoplado a um substrato anti-ferromagnético, com diferentes valores de campo externo.

domínio (domínio diamante) perpendicular ao campo externo aplicado. Quando o campo externo vai aumentando, o domínio central toma a direção do campo externo aplicado, empurrando os vórtices nas direções opostas até eles serem expelidos do nanoelemento.

A figura 4.3 mostra as curvas de histerese para um nanoelemento elíptico de permalloy com campo de interface (no detalhe) e sem campo de interface, com dimensões de $200\text{nm} \times 100\text{nm} \times 20\text{nm}$ e campo de interface de 6.25kOe . Ao ver a figura de dentro, podemos ver que a reversão da magnetização ocorre via rotação uniforme. Para o nanoelemento sem campo de interface como mostrado pela curva de histerese quadrada. Já para o nanoelemento com a presença do substrato, a reversão envolve a nucleação de pares de vortices. Na Fig.4.3, há uma queda na magnetização para aproximadamente zero, em um campo externo de -0.5kOe , e a reorientação subsequente, em $H = -0.3\text{kOe}$, próximo ao valor da saturação para valores negativos de campo externo aplicado.

Na figura central mostramos o estado magnético para $H = -1.5\text{kOe}$,

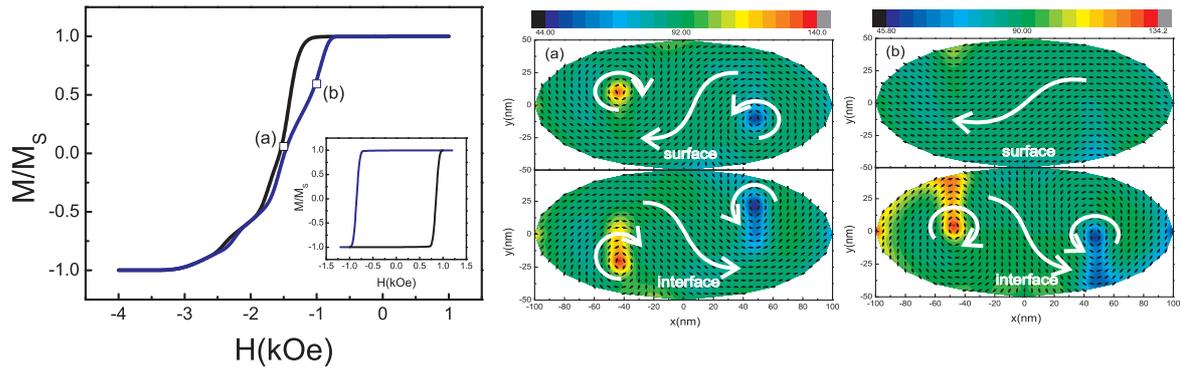


Figura 4.4: Histereses e mapas de spins de um nanoelemento de permalloy acoplado (fora) e não acoplado (dentro) a um substrato antiferromagnético.

no campo de reversão no ramo superior da histerese. Pares de vórtices são formados na camada da superfície e da interface e separados por domínios que tomam a direção do campo externo e do campo de interface, respectivamente. O par de vortices na superfície e na interface é deslocado, e a distância entre ambos os vortices é controlada pelo valor do campo externo aplicado. Na figura 4.3 (d), mostramos o estado magnético no ramo inferior da histerese, para $H = -0.1kOe$. Isso é intrigante porque, contrariamente a intuição, a camada da interface acomoda um par de vórtices com sentido de rotação e polaridades opostas, enquanto que na camada da superfície, a magnetização é quase uniforme. Como a saturação acontece ao longo do campo externo aplicado, ocorre a rotação do domínio na superfície, bem como o domínio central na camada de interface expelindo os vórtices para lados opostos do nanoelemento.

4.4 Conclusões

Mostramos que o acoplamento de interface favorece a nucleação de pares de vórtices ao longo da curva de histerese de nanoelementos elípticos de ferro e permalloy com dimensões geométricas da ordem de algumas centenas de nanômetros. Mostramos ainda que a distância, bem como o sentido de

rotação relativo do par de vórtices, em nanoelementos de ferro podem ser afetadas pela energia de troca de interface. Vimos que o par de vórtices são formados com polaridades dos núcleos opostas quando há um domínio entre eles. Entretanto, como mostrado na figura 4.2, os núcleos dos vórtices tem a mesma polaridade quando separados por um anti-vórtice com polaridade oposta. O ponto chave é que a nucleação do par de vórtice permite a redução da energia dipolar, bem como as energias Zeeman e de interface. O par de vórtice é favorecido por altos valores da magnetização de saturação que demanda uma menor carga de superfície nas superfícies laterais do nanoelemento. sendo também favorecido por altos valores do campo de interface, o que requer uma grande fração dos spins da interface alinhados com o campo de interface. Nossos resultados sugerem que o acoplamento de interface pode ser usado para controlar o sentido de rotação relativo e a distância entre núcleos de vórtices. Isso pode ser um modo promissor de realizar sincronização da dinâmica de pares de vórtices, para aplicação em nano-osciladores.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Apresentamos os resultados obtidos a partir da simulação micromagnética de nanoelementos ferromagnéticos (Fe e Py) acoplados ou não a um substrato antiferromagnético. A princípio, estudamos a simetria cilíndrica e mostramos que a magnetização remanente de um nanoelemento cilíndrico pode se comportar de várias formas, ou seja, ter vários estados diferentes, dependendo da forma geométrica (dimensões) e das energias envolvidas no sistema, em especial a energia dipolar, que é de grande valia na formação destas fases, uma vez que ela tenta diminuir a carga de superfície que existe em nanoelementos com o estado uniforme de modo que a magnetização tome a direção preferencial quando o nanoelemento é alongado nesta.

As fases magnéticas encontradas e mostradas nos diagramas de fase sofrem alterações quando o nanoelemento encontra-se acoplado ao antiferromagneto. Mostramos os diagramas de fase para o Ferro e para o permalloy com e sem campo de interface em função de suas dimensões d e h .

Podemos facilmente ver que a fase magnética uniforme é notavelmente favorecida pelo acoplamento com o antiferromagneto, uma vez que este estabiliza a nanopartícula. Já o estado vortice no plano é favorecido quando não há o acoplamento de interface. Outro fato notável é que a fase magnética vórtice perpendicular é favorecida pela presença do campo

de interface (em especial quando $h \cong d$), uma vez que a interface está estabilizada e a carga magnética de superfície seria muito alta, então ele se fecha no estado vórtice ao longo do eixo z .

O outro sistema estudado é bem semelhante ao supracitado, com a diferença que este possui simetria elíptica no plano xy . Para essa simetria foi feito o estudo das curvas de histerese e mostrado que, contrariamente a intuição, o acoplamento de interface induz a formação de pares de vórtices em nanoelementos elípticos de ferro e permalloy. Mostramos também que a distância, bem como a chiralidade relativa do par de vórtices em nanoelementos de ferro podem ser afetadas pela energia de troca de interface. Vimos que o par de vórtices são formados com polaridades dos núcleos opostas quando há um domínio entre eles. Entretanto, os núcleos dos vórtices tem a mesma polaridade quando separados por um antivórtice com polaridade oposta. O ponto chave é que a nucleação do par de vórtices permite a redução da energia dipolar, bem como as energias Zeeman e de interface. O par de vórtices é favorecido por altos valores da magnetização de saturação, que demanda uma menor carga de superfície nas superfícies laterais do nanoelemento. Sendo também favorecido por altos valores do campo de interface, o que requer uma grande fração dos spins da interface alinhados com o campo de interface. Nossos resultados sugerem que o acoplamento de interface pode ser usado para controlar o sentido de rotação relativo e a distância entre núcleos de vórtices. Isso pode ser um modo promissor de realizar sincronização da dinâmica de pares de vórtices, para possível aplicação em nano-osciladores.

Nosso grupo tem por objetivo, dentre outros, realizar os seguintes estudos posteriores: Estudar as configurações para outros materiais, como

Níquel e Cobalto; Os estudos foram feitos com o nanoelemento ferromagnético, e considerando que o substrato antiferromagnético está congelado na fase antiferromagnética. Mas é notável que irão existir influências de troca do ferromagneto no antiferromagneto. Uma coisa que será feita é relaxar o antiferromagneto, ou seja, inserir na estrutura do cálculo a representação dos spins do antiferromagneto; Será feito um estudo dessas estruturas acoplando dois nanoelementos ferromagnéticos via espaçador não-magnético, como utilizado nas estruturas da Junção de Tunelamento (MTJ) [6, 7, 8, 9]; O estudo das excitações desses sistemas são de grande relevância, e abre um amplo numero de possibilidades para trabalhos futuros; Matriz de nanoelementos ferromagnéticos tem grande importância, uma vez que o campo dipolar influencia a vizinhança do nanoelemento, logo, será extremamente importante ver a influência entre nanoelementos vizinhos.

Bibliografia

[1] CHUNG S. H.; MCMICHAEL, PIERCE, R. D; D. T.; e UNGURIS J.: Phase diagram of magnetic nanodisks measured by scanning electron microscopy with polarization analysis **PHYSICAL REVIEW B** 81, (2010).

[2] BAIBICH M. N.; BROTO J. M.; FERT A.; DAU F. N. V.; e PETROFF F., Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices, **Physical Review Letters** 61, (1988).

[3] DIENY, B.; SPERIOSU, V. S.; PARKIN, S. S. P.; GURNEY, B. A.; WILHOIT, D. R.; e MAURI, D., Giant magnetoresistance in soft ferromagnetic multilayers, **Physical Review B** 43, 1297 (1991).

[4] S. Parkin; J. Xin; C. Kaiser; A. Panchula; K. Roche; e M. Samant, **IEEE** 91, (2003).

[5] MEIKLEJOHN, W. H.; e BEAN, C.P., **Physical Review**. 102, 1443 (1956).

[6] DAUGHTON, J. M., **Journal of Applied Letters** 81, 3758 (1997).

[7] M. J. Donahue, **Journal of Applied Physics** 75, 7070 (2000).

[8] MAFFTT, T. M.; DEBROSS, J. K.; GABRIC, J. A.; GOW, E. T.; LAMOREY, M. C.; PARENTEAU, J. S.; WILLMOTT, D. R.; WOOD, M. A. e GALLAGHER, W. J., **IBM Journal Research and Development**. 50, 25 (2006).

[9] RZCHOWSKI, M. S. e WU, X. W., Bias dependence of magnetic tunnel junctions, **Physical Review B** 61, 9 (2000).

- [10] HA J.K.; HERTEL R.; e KIRSCHNER J., Micromagnetic study of Magnetic configurations in submicron permalloy disks, **physical review b** 67, 224432 (2003).
- [11] CARACE, F.; VAVASSORI, P.; GUBBIOTTI, G.; TACCHI, S.; MADAMI, M.; CARLOTTI, G. e OKUNO, T., Magnetization reversal process in elliptical Permalloy nanodots, **ELSEVIER** 515, 727 (2006).
- [12] DAO, N.; WHITTENBURGA, S. L.; HAO, Y.; ROSS, C. A.; MALKINSKI, L. M. e WANG, J. Q., Magnetization reversal of elliptical Co/Cu/Co pseudo-spin valve dots, **Journal of Applied Physics** 91, 10 (2002).
- [13] REBOUÇAS, G. O. G.; SILVA, A. S. W. T.; DANTAS, A. L.; CAMLEY, R. E.; e CARRIÇO, A. S., Magnetic hysteresis of interface-biased flat iron dots, **Physical Review B** 79, 10 (2009).
- [14] DANTAS, A. L.; REBOUÇAS, G. O. G.; SILVA, A. S. W. T.; e CARRIÇO, A. S., Interface roughness effects on coercivity and exchange bias, **Journal of Applied Physics** 97, 10 (2005).
- [15] DANTAS A.L.; REBOUÇAS G. O. G.; e CARRIÇO A. S., Vortex Nucleation in Exchange Biased Magnetic Nanoelements **IEEE Trans Mag** 46, 2311 - 2313 (2010).
- [16] REBOUÇAS, G. O. G.; DANTAS, A. L. e CARRIÇO A. S., Depinning field of a periodic domain wall array in vicinal nanowires, **Journal of Applied Physics** 105, (2009). 53 54
- [17] REBOUÇAS, G.O.G., **Tese de Doutorado**, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2010.

- [18] BADDER, S.D., Opportunities in Nanomagnetism, **Reviews of modern physics** 78, (2006).
- [19] DANTAS, A. L., **Revista Ciência Sempre** 7, 144 (2008).
- [20] MORUP, S.; e TRONC, E., Superparamagnetic relaxation of weakly interacting particles, **Physical Review Letters** 72, 3278 (1994).
- [21] ROSS, C. A.; HWANG, M.; SHIMA, M.; CHENG, J. Y.; FARHOUD, M.; SAVAS, T. A.; SMITH, H. I.; SCHWARZACHER, W.; ROSS, F. M.; REDJDAL, M.; e HUMPHREY, F. B., Micromagnetic behavior of electrodeposited cylinder arrays, **Physical Review B** 65, 144417 (2002).
- [22] HA, J. K.; HERTEL R.; e KIRSCHNER, J., Configurational stability and magnetization processes in submicron permalloy disks, **Physical Review B** 67, 064418 (2003).
- [23] ZIVIERI, R.; e NIZZOLI, F., Dipolar magnetic fields of spin excitations in vortex-state cylindrical ferromagnetic dots , **Physical Review B** 78, 064418 (2008).
- [24] GETZLAR, M., **Fundamentals of magnetism** (Springer, ADDRESS, 2008).
- [25] SILVA, A. S. W. T., **Tese de Doutorado**, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2006.
- [26] GRIMSDITCH, M.; LEAF, G. K.; KAPER, H. G.; KARPEEV, D. A.; e CAMLEY, R. E., **Physical Review B** 69, (2004).
- [27] NAKATANIA, Y.; THIAVILLEB, A. A.; e MILTAT, J.: **Journal of Magnetism and Magnetic Materials** 290, 750 (2005).

- [28] MCMICHAEL, R. D.; e DONAHUE, M. J., **IEEE Trans. Magn.** 33, 4167 .
- [29] DONAHUE, M. J. e PORTER, D. G., Technical report, **National Institute of Standards and Technology** (unpublished).
- [30] DONAHUE, M. J. e MCMICHAEL, R. D., **IEEE Trans. Magn.** 43, 2878 (2007).
- [31] SHINJO, T.; OKUNO, T.; HASSDORF, R.; SHIGETO, K.; e ONO, T., Magnetic Vortex Core Observation in Circular Dots of Permalloy, **Science** (2000).
- [32] HUBERT, A.; e SCHAFFER R., **Magnetic Domains: The Analysis of Magnetic Microstructures** (Springer, Berlin, ADDRESS, 1998).
- [33] NOGUÉS, J.; e SCHULLER, I. K., Exchange bias, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials** 192, 203 (1999).
- [34] NOGUÉS, J.; SORT, J.; LANGLAIS, V.; SKUMRYEV, V.; SURINACH, S.; MUNOZB, J. S.; e BARÓ M. D., Exchange bias in nanostructures, **Physics Reporters** 422, 65 (2005).
- [35] SORT, J.; BUCHANAN, K. S.; PEARSON, J. E.; HORMANN, A.; MENÉNDEZ, E.; SALAZAR-ALVAREZ, G.; BARÓ, M. D.; MIRON, M.; RODMACQ, B.; DIENY, B.; e NOGUÉS, J., Tailoring the magnetization reversal of elliptical dots using exchange bias, **Journal of Applied Physics** 103, 7 (2008).
- [36] HORMANN, A.; SORT, J.; BUCHANAN, K. S.; e NOGUES, J., Exchange-Biased Magnetic Vortices, **IEEE Trans Mag** 44, 1968 (2008).
- [37] FRUCHART, O.; NOZIERES, WERNSDORFER, J. P.; W.; GIVORD, D.; ROUSSEAUX, F.; e DECANINI, D., Enhanced Coercivity in Submicrometer-Sized

Ultrathin Epitaxial Dots with In-Plane Magnetization, **Physical Review Letters** 82, 1305 (1999). 55

[38] MCMICHAEL, R. D.; EICHE, J.; DONAHUE, M. J.; e PORTER, D. G., Domain wall traps for low-field switching of submicron elements, **Journal of Applied Physics** 87, 9 (2000).