

**UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO GRANDE DO NORTE  
FACULDADE DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS - FANAT  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**DIEGO RODRIGUES PEREIRA**

**ESTUDO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS DE NANOPARTÍCULAS  
ANTIFERROMAGNÉTICAS**

Mossoró  
(2015)

**ESTUDO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS DE NANOPARTÍCULAS  
ANTIFERROMAGNÉTICAS**

**DIEGO RODRIGUES PEREIRA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade do Estado do Rio Grande do Norte como parte dos requisitos para a obtenção do título de MESTRE EM FÍSICA

**Orientador:** Prof. Dr. Nilson Sena de Almeida

Mossoró  
(2015)

**Catálogo da Publicação na Fonte.**  
**Universidade do Estado do Rio Grande do Norte.**

Pereira, Diego Rodrigues  
Estudo das propriedades físicas de nanopartículas antiferromagnéticas. / Diego Rodrigues Pereira - Mossoró, RN, 2015.

80 f.

Orientador(a): Prof. Dr. Nilson Sena de Almeida

Dissertação (Mestrado em Física). Universidade do Estado do Rio Grande do Norte. Programa de Pós-Graduação em Física.

1. Nanopartículas antiferromagnéticas. 2. Coercividade. 3. Magnetização remanente. I. Almeida, Nilson Sena de. II. Universidade do Estado do Rio Grande do Norte. III. Título.

UERN/BC

CDD 530

**DIEGO RODRIGUES PEREIRA**

**ESTUDO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS DE NANOPARTÍCULAS  
ANTIFERROMAGNÉTICAS**

Dissertação apresentada ao Programa de  
Pós-graduação em Física da Universidade  
do Estado do Rio Grande do Norte como  
parte dos requisitos para a obtenção do  
título de MESTRE EM FÍSICA

Banca Examinadora

---

Prof. Dr. Nilson Sena de Almeida

Orientador

UERN

---

Prof. Dr. Vamberto Dias de Melo

Examinador interno

UERN

---

Prof. Dr. Artur da Silva Carriço

Examinador externo

UFRN

*À todos os que em diferentes tempos, espaços e circunstâncias contribuíram para a minha formação.*

*Aos que acreditam e utilizam a ciência para o bem da humanidade,*

*Dedico esta pesquisa!*

# AGRADECIMENTOS

É com especial alegria e especial satisfação que registro neste espaço alguns agradecimentos:

À Deus, pela vida e a inteligência!

À minha família, começo por agradecer aos meus pais Roseli de Jesus Rodrigues Pereira e Leomar Pereira da Silva, alicerces de valores, princípios e suporte em todos os sentidos. Não há palavras para expressar o tamanho do esforço, dedicação e compreensão. O meu sonho, agora conquista é o que retribuo como expressão do meu amor a vocês.

Aos meus irmãos Augusto Luís Pires e Danilo Rodrigues Pereira, em nome dos quais expresso meu carinho a todos os avós, tios, primos e sobrinho que foram meus alicerces e apoiadores em toda a trajetória da minha formação.

À minha madrinha Aparecida Maria Almeida Barros, pelo apoio prestado ao longo de toda minha vida.

Aos mestres, prof. Dr. Bráulio Batista Soares, prof. Dra. Maria Aldinez Dantas, e prof. Dr. Vamberto Dias de Melo, referenciados em nome de todos, minha gratidão pelos ensinamentos e instruções que me guiaram rumo ao propósito da qualificação e da profissionalização.

Aos colegas de percurso, Daniel Nobre, Diego Silva e Valber da Silva Gomes pelo diálogo e apoio constantes nos momentos em que as incertezas turvam o nosso objetivo. Devo muito a todos, sempre!

À Camila, companheira no afeto e paciência, nosso encontro estava escrito para além das páginas desta pesquisa.

Ao meu orientador, prof. Dr. Nilson Sena de Almeida, mais que um agradecimento, minha eterna gratidão por tudo. Sua sabedoria, experiência e compreensão são traços do melhor aprendizado que recebi.

Ao Programa de Pós Graduação em Física da UERN meu muito obrigado, por acolher um forasteiro do “Coração do Brasil” em busca da qualificação de referência desta instituição.

À CAPES, pelo apoio financeiro na forma de bolsa de pesquisa.

*Comece fazendo o que é necessário,  
depois o que é possível,  
e de repente você estará fazendo o impossível.*

São Francisco de Assis

## RESUMO

Neste trabalho investigamos a influência da forma, volume e estrutura cristalina nas propriedades físicas de nanopartículas antiferromagnéticas. Foram analisadas partículas com formato de elipsoides de revolução e estrutura cristalina cúbica simples e cúbica de corpo centrado, através da análise das curvas da magnetização como função do campo magnético externo. Considerou-se que as partículas estudadas são compostas por íons magnéticos localizados nos pontos da rede e sujeitos a anisotropia uniaxial, interação de troca e interação dipolar. O efeito do campo externo é descrito através da interação Zeeman. Para a obtenção de dados numéricos foi considerado que o campo de troca é dez vezes maior que o de anisotropia. Os resultados revelaram que o campo de saturação, a coercividade, a magnetização remanente e a susceptibilidade dependem do tipo da estrutura cristalina e são controlados pelo formato (quantificado através da razão entre os eixos do elipsoide) e pelo volume da partícula.

**Palavras chaves:** Nanopartículas antiferromagnéticas, Coercividade, Magnetização remanente, susceptibilidade.

## **ABSTRACT**

In this paper we investigate the influence of shape, volume and crystalline structure on the physical properties of antiferromagnetic nanoparticles. Particles with simple cubic and body-centered cubic structures and revolution ellipsoids format were analyzed through the analysis of the magnetization curves as a function of external magnetic fields. It was considered that the particles are composed of magnetic ions located at the lattice points and subjected to uniaxial anisotropy, exchange and dipole interactions. The effect of the external field is taking into account by Zeeman interaction. Numerical data were obtained by considering the exchange field ten times larger than the anisotropy one. The results obtained showed that the saturation field, coercivity, remanent magnetization and the susceptibility depend on the type of crystalline structure and are controlled by the format (quantified by the ratio between the axes of the ellipsoid) and the volume of the particle.

**Keywords:** Antiferromagnetic nanoparticles, Coercivity, Remanent magnetization, susceptibility.

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 1:</b> Propriedades magnéticas de nanopartículas com estrutura cristalina cúbica simples. .....	43
<b>Tabela 2:</b> Propriedades magnéticas de nanopartículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado. ....	56
<b>Tabela 3:</b> Propriedades magnéticas de partículas de diferentes estruturas cristalinas.....	61
<b>Tabela 4:</b> Propriedades magnéticas de partículas com estrutura cristalina cúbica simples considerando a presença da interação dipolar. ....	68
<b>Tabela 5:</b> Propriedades magnéticas de partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado considerando a presença da interação dipolar.....	75

# LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 1:</b> Seção transversal de uma partícula de 25 Å. Há uma preferência para 8 sub-redes (6).....	18
<b>Figura 2:</b> Ilustração dos momentos magnéticos ordenados de maneira antiferromagnética no núcleo da partícula e de forma aleatória na superfície (20).....	19
<b>Figura 3:</b> Ilustração da região central da curva de magnetização em função do campo aplicado para uma partícula $R_{eq} = 5$ e estrutura cs.....	31
<b>Figura 4:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica simples de raio 5.....	32
<b>Figura 5:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica simples de raio 6.....	32
<b>Figura 6:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica simples de raio 7.....	33
<b>Figura 7:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica simples de raio 8.....	33
<b>Figura 8:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica simples de raio 9.....	34
<b>Figura 9:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica simples de raio 10.....	34
<b>Figura 10:</b> Gráfico da magnetização remanente de partículas com estrutura cristalina cúbica simples em função do raio.....	37
<b>Figura 11:</b> Gráfico da coercividade de partículas com estrutura cristalina cúbica simples em função do raio.....	40
<b>Figura 12:</b> Gráfico da susceptibilidade de partículas com estrutura cristalina cúbica simples em função do raio.....	42
<b>Figura 13:</b> Ilustração da região central da curva de magnetização em função do campo aplicado para uma partícula $R_{eq} = 5$ e estrutura bcc. ....	45
<b>Figura 14:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 5. ....	46
<b>Figura 15:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 6. ....	46

<b>Figura 16:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 7. ....	47
<b>Figura 17:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 8. ....	47
<b>Figura 18:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 9. ....	48
<b>Figura 19:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 10. ....	48
<b>Figura 20:</b> Gráfico da magnetização remanente de partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado em função do raio. ....	51
<b>Figura 21:</b> Gráfico da coercividade de partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado em função do raio. ....	53
<b>Figura 22:</b> Gráfico da susceptibilidade de partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado em função do raio. ....	55
<b>Figura 23:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 5, sem interação dipolar. ....	63
<b>Figura 24:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 6, sem interação dipolar. ....	64
<b>Figura 25:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 7, sem interação dipolar. ....	64
<b>Figura 26:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 8, sem interação dipolar. ....	65
<b>Figura 27:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 9, sem interação dipolar. ....	65
<b>Figura 28:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 10, sem interação dipolar. ....	66
<b>Figura 29:</b> Gráfico da coercividade de partículas com estrutura cristalina cúbica simples em função do raio, sem interação dipolar. ....	66
<b>Figura 30:</b> Gráfico da susceptibilidade de partículas com estrutura cristalina cúbica simples em função do raio, sem interação dipolar. ....	67
<b>Figura 31:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 5, sem interação dipolar. ....	69
<b>Figura 32:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 6, sem interação dipolar. ....	69

<b>Figura 33:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 7, sem interação dipolar. ....	70
<b>Figura 34:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 8, sem interação dipolar. ....	70
<b>Figura 35:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 9, sem interação dipolar. ....	71
<b>Figura 36:</b> Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 10, sem interação dipolar. ....	71
<b>Figura 37:</b> Gráfico da coercividade de partículas com estrutura cúbica de corpo centrado em função do raio, sem interação dipolar. ....	73
<b>Figura 38:</b> Gráfico da susceptibilidade de partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado em função do raio, sem interação dipolar. ....	74

# SÚMARIO

<b>CAPÍTULO 1.....</b>	<b>14</b>
<b>1. INTRODUÇÃO.....</b>	<b>14</b>
<b>CAPÍTULO 2.....</b>	<b>16</b>
<b>2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA .....</b>	<b>16</b>
2.1 CURVA DE HISTERESE .....	20
<b>CAPÍTULO 3.....</b>	<b>22</b>
<b>3. METODOLOGIA E MODELAGEM DO TRABALHO .....</b>	<b>22</b>
3.1 ENERGIA MAGNÉTICA .....	23
3.1.1 INTERAÇÃO DE TROCA.....	24
3.1.2 A ANISOTROPIA UNIAXIAL.....	25
3.1.3 INTERAÇÃO ZEEMAN .....	25
3.1.4 INTERAÇÃO DIPOLAR .....	26
3.2 CAMPO EFETIVO.....	26
3.2.1 CONTRIBUIÇÃO DA INTERAÇÃO DE TROCA .....	26
3.2.2 CONTRIBUIÇÃO DA ANISOTROPIA UNIAXIAL.....	27
3.2.3 CONTRIBUIÇÃO DA INTERAÇÃO DIPOLAR.....	27
3.3 CAMPO EFETIVO.....	28
3.4 MINIMIZAÇÃO DA ENERGIA.....	29
<b>CAPÍTULO 4.....</b>	<b>30</b>
<b>4. RESULTADOS E DISCUSSÕES .....</b>	<b>30</b>
4.1 PARTÍCULAS COM ESTRUTURA CÚBICA SIMPLES .....	30
4.2 PARTÍCULAS COM ESTRUTURA CÚBICA DE CORPO CENTRADO .....	45
4.3. COMPARAÇÃO ENTRE AS PROPRIEDADES DE PARTÍCULAS $cs$ E $bcc$ DE MESMO VOLUME E FORMA .....	57
4.4 EFEITO DA INTERAÇÃO DIPOLAR.....	62
<b>CAPÍTULO 5.....</b>	<b>76</b>
<b>5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS .....</b>	<b>76</b>
5.1 CONCLUSÕES.....	76
5.2 PERSPECTIVAS FUTURAS.....	78
<b>BIBLIOGRAFIA.....</b>	<b>79</b>

# CAPÍTULO 1

## 1. INTRODUÇÃO

Dois milênios antes da era cristã os chineses já conheciam algumas das propriedades magnéticas da matéria, mas a descrição da bússola, datada do século XII, é o primeiro registro da utilização destas propriedades em algum dispositivo utilizado pela sociedade. A importância deste primeiro “dispositivo magnético” é inquestionável e podemos afirmar que é o principal responsável pela expansão da civilização na terra. Entretanto, apesar dos fenômenos eletromagnéticos serem conhecidos e apropriados por diferentes grupos humanos desde a idade média, somente no século XIX o magnetismo se consolidou como um campo de interesse nas ciências modernas aplicadas, tornando-se importante para o desenvolvimento de novas tecnologias.

Na atualidade o magnetismo tem sido utilizado no desenvolvimento de tecnologias, tais como sistemas de geração e distribuição de energia, sistemas de conversão eletromecânica, dispositivos eletrônicos e de telecomunicações, transdutores, sensores (1), aparelhos para prospecção geológica, memórias para informática, automação industrial, incluindo a medicina e a engenharia biomédica [ (2), (3), (4)]. Essas aplicações só foram possíveis graças ao entendimento dos fenômenos magnéticos observados nos novos materiais magnéticos.

Em particular, as nanopartículas magnéticas têm sido intensamente estudadas por um número considerável de pesquisadores de diferentes campos do conhecimento, permitindo que novas propriedades sejam utilizadas em aplicações tecnológicas, abrangendo áreas distintas como biologia, geologia, engenharias, medicina e computação (5), além da física.

As propriedades dos materiais compostos por nanopartículas são resultado das propriedades individuais somadas ao efeito coletivo, proveniente das interações entre elas (6).

É útil ressaltarmos algumas diferenças entre metais e compostos iônicos. Os metais ferromagnéticos (especialmente da série 3d), possuem momento magnético itinerante e sua magnitude depende da estrutura de banda do material. Outro ponto a se destacar nestes

materiais é a dependência que a momento magnético pode ter com a distância do íon à superfície. Essa dependência ocorre devido à coordenação reduzida na superfície, que faz com que materiais como Fe, Ni e Co, tenham valores reduzidos para o módulo do momento (6).

Por outro lado, os compostos iônicos possuem momentos localizados numa estrutura cristalina que são resultantes da distribuição dos elétrons nos orbitais atômicos seguindo as regras de Hund (7). A origem das regras de Hund está no princípio de exclusão de Pauli, que proíbe dois elétrons ocuparem o mesmo estado quântico (8). Visto que os compostos iônicos possuem elétrons de valência localizados e momentos bem definidos em cada íon magnético, estes materiais têm o módulo do momento magnético de cada íon menos susceptível a distância à superfície. O fato de ter um interior ordenado cercado por uma superfície com diferente ordenamento, pode levar a uma competição entre a interação de troca e a coordenação reduzida na superfície, fazendo com que os momentos magnéticos de pequenas partículas e materiais de pequeno volume tenham sua orientação modificada e valor médio do momento magnético diminuído em relação aos materiais volumosos. A quebra de simetria que ocorre na superfície da partícula pode levar a alterações na anisotropia e no acoplamento de troca, sentidos pelos íons localizados na superfície (9). Essas variações das propriedades magnéticas podem ser utilizadas em diversas aplicações tecnológicas, como funcionalização de sensores ou interruptores, gravações de alta densidade de dados, geração de imagens coloridas, ferrofluidos, dispositivos de alta frequência, refrigeração magnética e transporte de drogas para locais específicos (9).

Uma característica das nanopartículas é o tamanho reduzido levar estes sistemas a terem uma grande razão superfície/volume. Tal fato faz com que as propriedades físicas destas partículas sejam fortemente influenciadas pelas características da superfície. Ainda neste sentido, há indícios experimentais que o espectro de excitação de nanopartículas seja diferente do encontrado para materiais volumosos (10).

# CAPÍTULO 2

## 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Em virtude do tamanho reduzido (diâmetros da ordem de  $10^{-9}$  m), nanopartículas suportam apenas um domínio magnético, e neste trabalho são assim consideradas (11). Iremos supor que dentro do domínio, os momentos magnéticos são equivalentes e submetidos às mesmas interações. Desta maneira, descreveremos uma partícula como um conjunto de momentos magnéticos localizados em pontos de uma rede cristalina, limitada espacialmente pela superfície da partícula. Analisaremos a curva da magnetização versus o campo aplicado, a qual, devido à anisotropia, pode ter mais de um valor de equilíbrio (12). Consideraremos que os momentos magnéticos estão sob a influência de uma anisotropia uniaxial, a qual pode ser estimada como a energia necessária para fazer o momento magnético girar de  $\frac{\pi}{2}$  em relação à direção fácil do material.

As propriedades magnéticas das nanopartículas podem mudar significativamente em relação àsquelas de materiais extensos. Estes sistemas podem exibir altas coercividades, saturação da magnetização em campos muito elevados, comportamento anômalo da coercividade em função da temperatura, entre outras propriedades. Isto ocorre devido ao ordenamento diferente dos momentos magnéticos localizados na superfície (13).

Segundo Kodama (14), nanopartículas antiferromagnéticas podem ser descritas por distribuições de spins organizados em sub-redes e interagindo fracamente entre si. A interação entre as sub-redes permite que os spins tenham diferentes caminhos para a reversão dentro de uma faixa de campo aplicado. Esta diversidade de caminhos de reversão leva a grandes valores de coercividade e mudança do loop (14).

O ordenamento magnético das nanopartículas pode ser modificado mediante as mudanças na estrutura do sistema, que ocorrem em consequência da quebra de simetria. A anisotropia e o momento magnético de nanopartículas de Fe e Co, por exemplo, são dependentes da fase cristalina em que se encontram (6). A princípio, essa dependência parece

ser um efeito de tamanho relacionado com o equilíbrio da energia de superfície e interior da partícula para diferentes estruturas cristalinas, o que depende do tamanho da partícula.

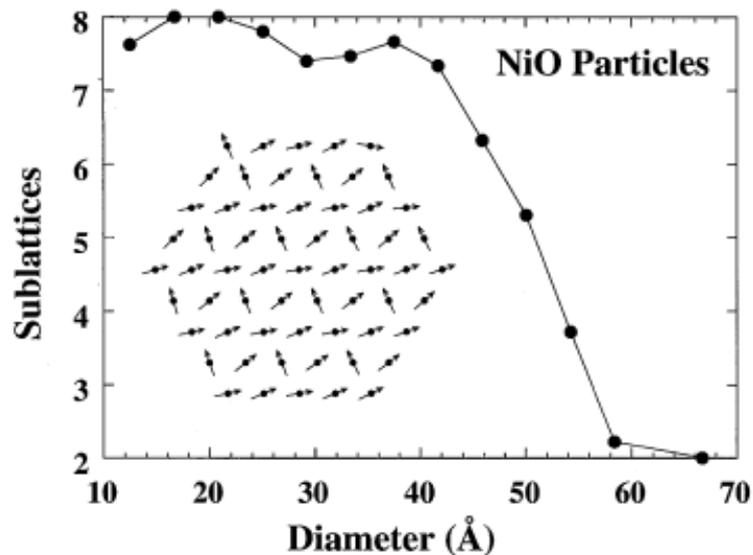
Verificou-se que nanopartículas de Co têm uma transição de estrutura cristalina de hcp (hexagonal compacta) para fcc (cúbica de face centrada), para partículas com diâmetro menores que 300 Å. Para materiais volumosos, a estrutura de equilíbrio à temperatura ambiente é hcp, enquanto para temperaturas elevadas (acima de 695 K) é fcc. Segundo Kitakami et. al. (15), a preferência para a transição de hcp para fcc ocorre em função da baixa energia de superfície da estrutura fcc. Eles também mostraram que o recozimento seguido de resfriamento não retorna as partículas para a estrutura fcc, reforçando a hipótese do efeito de tamanho.

De forma análoga, o Fe tem dois tipos de estruturas cristalinas quando na forma de amostras volumosas; em temperatura ambiente a estrutura é bcc (cúbica de corpo centrado), enquanto que em temperaturas elevadas (acima de 1183 K) é fcc. Estudos experimentais e teóricos têm mostrado que o ordenamento do Fe fcc depende do parâmetro de rede, podendo ser ferromagnético, antiferromagnético ou até mesmo não magnético. Billas et. al. [ (16), (17)] observaram através de experimentos do tipo Stern Gerlach que o momento do conjunto de partículas de Fe possui dependência com o tamanho e isto pode ser em razão das mudanças estruturais e de fase magnética que ocorrem no fcc. Também observaram que o tamanho do conjunto de partículas de Fe influencia o momento e a temperatura de Curie, sendo estes diminuídos à medida que aumenta de tamanho (entre 100-500 átomos). Este efeito pode ser resultado da transição de estrutura cristalina de bcc para fcc com o aumento de tamanho ou da transição entre diferentes fases magnéticas de fcc ocasionado pelas mudanças no parâmetro de rede e coordenação nos átomos de superfície, como função do tamanho do conjunto de partículas (6).

O tamanho finito pode levar as sub-redes a terem um número desigual de momentos magnéticos em nanopartículas antiferromagnéticas, podendo gerar um momento resultante (18). Reiterando os efeitos da quebra de simetria sobre as propriedades magnéticas de nanopartículas, têm sido demonstrado que nanopartículas de NiO podem exibir grandes coercividades em baixas temperaturas, chegando a ter valores de até 10 KOe (19). O efeito de tamanho causado pela coordenação reduzida na superfície pode também levar a uma mudança no ordenamento magnético de toda a partícula. Isto pode ser observado em estudos de modelagem da configuração de spins, em que são geradas 4, 6 ou 8 configurações de sub-

redes (14). É possível observar valores elevados para a coercividade e mudança de loop quando a anisotropia é induzida. Estes efeitos ocorrem em função do acoplamento relativamente fraco entre as sub-redes, que permite uma variedade de caminhos para a reversão dos momentos magnéticos dentro de um ciclo de campo aplicado (6).

A proposta de descrição de nanopartículas por múltiplas sub-redes surge a partir da degenerescência de várias sub-redes em duas sub-redes. No volume de NiO, a degenerescência é quebrada por uma distorção romboédrica que ocorre abaixo da temperatura de Néel resultando em uma energia de troca ligeiramente menor para duas sub-redes. Em nanopartículas, a energia de troca produzida pela coordenação reduzida dos íons de superfície é dominante comparada à energia de troca associada à distorção romboédrica. A modelagem realizada por Kodama et. al (6). mostrou preferência para 4, 6 e 8 sub-redes devido à coordenação reduzida, em partículas com diâmetro menores que 50 Å, mostrado na figura 1.

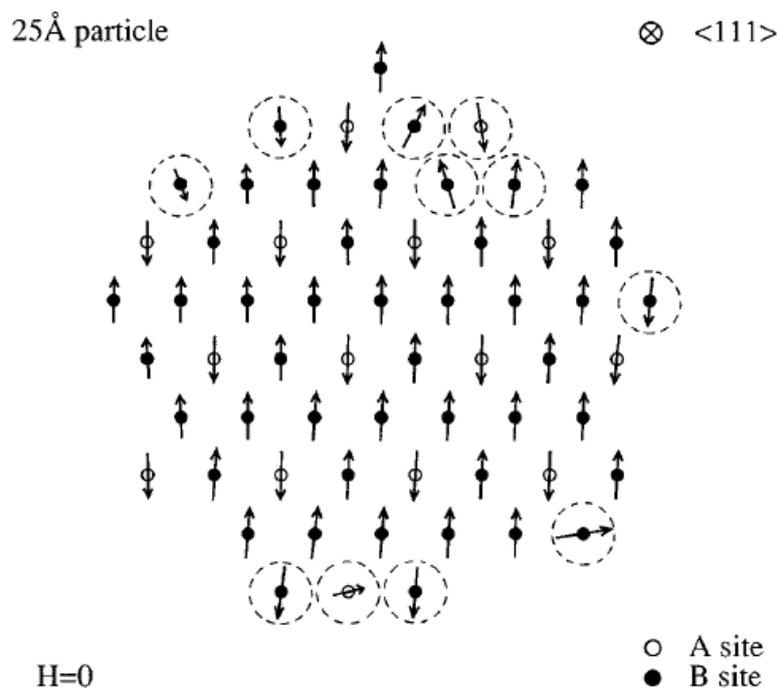


**Figura 1:** Seção transversal de uma partícula de 25 Å. Há uma preferência para 8 sub-redes (6).

A magnetização de nanopartículas ferromagnéticas (mesmo na presença de campos elevados) pode ser menor que a do mesmo material em dimensões macroscópicas. Já, em nanopartículas antiferromagnéticas, a magnetização pode ser finita, isto é, maior que a do mesmo material com volume macroscópico. Esse comportamento singular ocorre devido às propriedades magnéticas destes sistemas dependerem tanto do seu interior que é uma região

de momento magnético médio nulo, quanto da superfície, que em geral é uma região com momentos magnéticos desordenados. No caso de nanopartículas antiferromagnéticas, a magnetização tem uma dependência maior com o tamanho devido à possibilidade do tamanho finito gerar um número desigual de momentos magnéticos nas sub-redes, causado pela quebra de simetria.

No modelo desenvolvido por Kodama (13) os efeitos da quebra de simetria são contabilizados incorporando vacâncias, quebra de ligações e anisotropia definida sítio a sítio. Os efeitos de superfície tornam-se mais pronunciados à medida que as dimensões da partícula são reduzidas, pois a razão superfície/volume aumenta fazendo com que as propriedades da superfície contribuam mais significativamente para as propriedades da partícula como um todo. Isto pode ser visualizado na figura 2, extraída do artigo do Kodama.



**Figura 2:** Ilustração dos momentos magnéticos ordenados de maneira antiferromagnética no núcleo da partícula e de forma aleatória na superfície (20).

Um efeito observado na superfície de nanopartículas é a redução do número de vizinhos que interagem entre si. Essa diminuição do número de coordenação, juntamente com possíveis defeitos da estrutura, pode levar a sensíveis mudanças estruturais. Nessas condições, para o sistema atingir a configuração de menor energia, pode acontecer a formação de uma

estrutura magnética do tipo vidro de spin, onde o ordenamento só existe em pequenas regiões, as quais são independentes umas das outras (20).

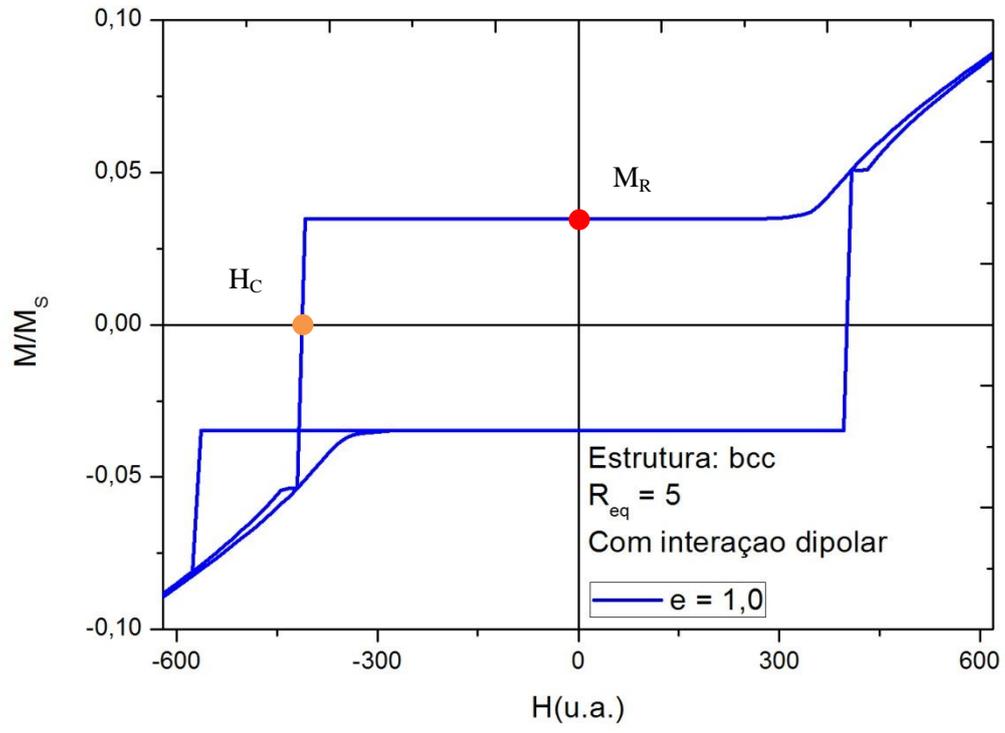
## 2.1 CURVA DE HISTERESE

A curva de histerese, gráfico que mostra o comportamento da magnetização em função da intensidade campo aplicado, permite analisar propriedades magnéticas dos materiais, tais como: campo de saturação, remanência e coercividade.

A magnetização de saturação é o valor a partir do qual o campo externo já não exerce influência nos momentos magnéticos do material, ou seja, todos os momentos magnéticos já estão alinhados com o campo (21).

A remanência ( $M_R$ ) é o valor que a magnetização possui quando o campo externo é retirado. O que se faz é diminuir a intensidade do campo externo a partir da saturação e observar o valor da magnetização quando o campo é nulo. Este é o valor da magnetização remanente, ou simplesmente, remanência (21).

O campo coercitivo ( $H_C$ ) ou simplesmente coercividade ( $H_C$ ) é o campo que faz a magnetização ser nula, fenomenologicamente, é o campo necessário para a reversão dos momentos magnéticos, ou seja, a reversão da magnetização.



## CAPÍTULO 3

### 3. METODOLOGIA E MODELAGEM UTILIZADA NO TRABALHO

O modelo que consideramos para a nanopartícula é um arranjo tridimensional de momentos magnéticos, localizados nos pontos de uma rede cristalina cúbica, limitado pela superfície que determina o volume da partícula. As interações entre os momentos magnéticos são descritas através das interações de troca e dipolar. Consideramos ainda que o meio tem uma anisotropia uniaxial e a interação dos momentos magnéticos com o campo externo é descrita pela interação Zeeman.

Neste trabalho foi considerado que as interações e anisotropia são as mesmas em todo o material, sendo usada a direção da anisotropia para definir o eixo z.

A interação dipolar é puramente magnética de longo alcance e, portanto se estende a todos os momentos magnéticos da estrutura. Essa interação pode ser vista como se cada momento magnético sentisse um campo gerado por todos os outros momentos da partícula, aqui denominado campo dipolar. Por fim, temos a ação do campo externo sobre os momentos magnéticos, o qual consideraremos aplicado na direção do eixo fácil.

Em decorrência da quebra de simetria, o número de coordenação de cada momento magnético depende de sua localização na partícula. Os formatos considerados para as nanopartículas são elipsoides de revolução. Para controlar o formato, adotou-se por definição prévia o parâmetro “e”, que é a razão entre o semieixo na direção z e o semieixo perpendicular (eixo x ou y) do elipsoide, de modo que as nanopartículas que apresentam valores elevados do parâmetro “e” são partículas alongadas na direção do eixo z, enquanto que as com valores pequenos de “e” são achatadas em relação ao eixo z. Para  $e = 1,0$  a partícula é esférica.

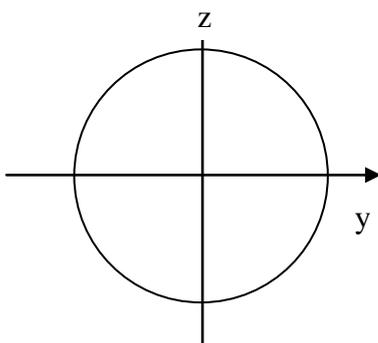


Ilustração da forma da partícula esférica (razão entre o eixo z e seu eixo perpendicular igual a 1,0).

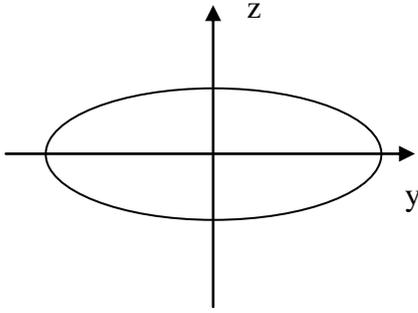


Ilustração da forma da partícula achatada em relação ao eixo z (razão entre o eixo z e seu eixo perpendicular igual a 0,2).

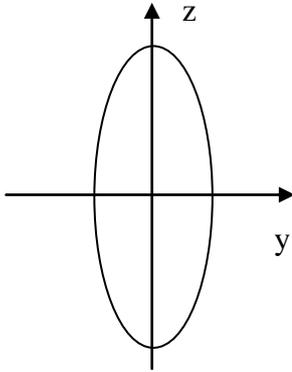


Ilustração da forma da partícula alongada em relação ao eixo z (razão entre o eixo z e seu eixo perpendicular igual a 5,0).

### 3.1 ENERGIA MAGNÉTICA

A configuração magnética de equilíbrio de um sistema pode ser obtida a partir da minimização da energia. Como mencionado anteriormente, a energia do sistema estudado tem quatro contribuições e o equilíbrio corresponde à configuração que tem o menor valor da energia. Alternativamente, esta configuração de equilíbrio pode ser obtida como aquela que faz os valores dos momentos magnéticos de todos os sítios serem constantes no tempo.

Ao considerar a partícula composta por  $N$  momentos magnéticos localizados nos pontos da rede cristalina, a energia total será:

$$E = \frac{H_e}{m_s} \sum_{i,j}^N \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{H_a}{m_s} \sum_i^N (m_i^z)^2 - H_0 \sum_i^N m_i^z + \sum_{i \neq j}^N \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \quad (1)$$

onde o primeiro termo é a energia de troca, devida a interação entre um momento magnético e seus vizinhos mais próximos, o segundo termo corresponde a contribuição da anisotropia uniaxial, onde foi considerado o eixo z como a direção de fácil magnetização; o terceiro termo é a energia Zeeman, que descreve a interação dos momentos magnéticos com o campo externo e o quarto termo é a energia devida a interação dipolar, que descreve a interação de cada momento magnético com os momentos magnéticos que compõem a partícula.

### 3.1.1 INTERAÇÃO DE TROCA

A interação de troca tem origem em efeitos quânticos, mais especificamente, na superposição de funções de onda (22). Trata-se de um efeito de curto alcance, e seu valor diminui rapidamente com a distância, tendo, na maioria dos sistemas, contribuição relevante apenas àquelas que têm origem na interação entre primeiros vizinhos, pois os efeitos de vizinhos distantes tornam-se desprezíveis (22).

Para entendermos a interação de troca, consideremos um sistema de dois elétrons com spins  $\vec{S}_1$  e  $\vec{S}_2$ . O princípio de exclusão de Pauli impõe que a função de onda total, formada pelo produto da parte espacial pela de spin seja anti-simétrica [ (23) (24)]. Dessa maneira, quando a parte espacial for simétrica, a função de onda de spin deve ser anti-simétrica, e o ordenamento será antiferromagnético. Analogamente, quando a função de onda espacial for anti-simétrica, a parte de spin deve ser simétrica, e o ordenamento será ferromagnético. Assim, Heisenberg sugeriu que a contribuição (para a energia) da interação de troca entre os momentos magnéticos localizados nos sítios  $i$  e  $j$  tivesse a forma:

$$E_{ij} = -J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

onde  $J_{ij}$ , chamada de constante de troca, é função da distribuição eletrônica dos átomos e da dependência espacial da função de onda.

Em algumas aproximações, os spins das partículas magnéticas são considerados vetores clássicos, assim, de agora em diante trabalharemos com momento magnético no lugar de spin. Considerando um momento magnético  $\vec{m}_i$  localizado no sítio  $i$  e interagindo com seus vizinhos mais próximos, a energia de troca  $E_{ij}$  será a energia necessária para girar  $\vec{m}_i$  de  $180^\circ$ . Desta forma podemos escrever:

$$E_{ij} = \frac{H_e}{m_s} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j \quad (2)$$

onde  $\vec{m}_i$  e  $\vec{m}_j$  são os momentos magnéticos dos sítios localizados nas vizinhanças do sítio  $i$  da partícula.

A contribuição para a energia do sistema é obtida somando o valor de  $E_{ij}$  correspondentes a todos os íons, fornecendo:

$$E_{troca} = \frac{H_e}{m_s} \sum_{i \neq j}^N \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j \quad (3)$$

### 3.1.2 A ANISOTROPIA UNIAXIAL

A energia dos materiais magnéticos depende da orientação dos seus momentos magnéticos com relação aos eixos que determinam a menor energia (eixo fácil). A anisotropia considerada nesse trabalho é a uniaxial, e é a medida da energia necessária para girar de 90° cada momento magnético que compõe a partícula. Assim é possível escrever:

$$E_{anis} = -\frac{H_a}{m_s} \sum_i^N (m_i^z)^2 \quad (4)$$

onde  $m_i^z$  é a componente do momento magnético na direção do eixo z e  $H_a M_s$  é a energia necessária para girar a magnetização de 90° em relação ao eixo z.

### 3.1.3 INTERAÇÃO ZEEMAN

A energia Zeeman descreve a interação dos momentos magnéticos com o campo externo. Essa energia apresenta mínimo quando os momentos magnéticos e o campo externo apontam na mesma direção e sentido. A energia Zeeman é escrita como:

$$E_{Zeeman} = -H_o \sum_i^N m_i^z \quad (5)$$

### 3.1.4 INTERAÇÃO DIPOLAR

A interação dipolar é de longo alcance e lembrando que a partícula é formada por momentos magnéticos localizados, a energia de interação dipolar será:

$$E_{dipolar} = \sum_{i \neq j}^N \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \quad (6)$$

onde  $\hat{r}_{ij}$  é o vetor unitário que aponta na direção do sítio i para o sítio j e  $r_{ij}$  é a distância entre eles. O somatório é realizado sobre todos os momentos magnéticos do material.

## 3.2 CAMPO EFETIVO

Uma forma alternativa de descrever a energia magnética da partícula é escrevê-la como a soma da energia de interação do momento magnético de cada sítio com o campo magnético médio sentido por ele. Este campo, denominado campo efetivo pode ser obtido se conhecermos a energia total do sistema. O campo efetivo sentido pelo momento magnético localizado no sítio i é dado por:

$$\vec{H}_{efetivo}^{(i)} = -\vec{\nabla}_{m_i} E \quad (7)$$

onde a energia E é dada pela equação (1).

### 3.2.1 CONTRIBUIÇÃO DA INTERAÇÃO DE TROCA

O campo de troca sobre um íon i será:

$$\vec{H}_{troca}^{(i)} = - \left( \frac{\partial}{\partial m_x^i} \hat{x} + \frac{\partial}{\partial m_y^i} \hat{y} + \frac{\partial}{\partial m_z^i} \hat{z} \right) \left( \frac{H_e}{m_s} \sum_{i,j} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j \right)$$

Considerando apenas a componente x, temos:

$$H_{troca}^x = - \left( \frac{\partial}{\partial m_i^x} \right) \left( \frac{H_e}{m_s} \sum_{i,j} m_i^x \cdot m_j^x \right) \Rightarrow H_{troca}^x = - \frac{H_e}{m_s} \sum_j (m_j^x) \quad (8)$$

De forma análoga, para as componentes y e z, teremos:

$$H_{troca}^y = - \frac{H_e}{m_s} \sum_j (m_j^y)$$

$$H_{troca}^z = - \frac{H_e}{m_s} \sum_j (m_j^z) \quad (9)$$

### 3.2.2 CONTRIBUIÇÃO DA ANISOTROPIA UNIAxIAL

No caso aqui investigado, o eixo z foi definido na direção do eixo fácil e assim a contribuição da anisotropia para o campo efetivo é dada por:

$$\vec{H}_{anisotropia}^{(i)} = - \frac{\partial}{\partial m_z} \left( - \frac{H_a}{m_s} \sum_i (m_i^z)^2 \right) \hat{z} \Rightarrow \vec{H}_{anisotropia}^{(i)} = 2 \frac{H_a}{m_s} m_i^z \hat{z} \quad (11)$$

### 3.2.3 CONTRIBUIÇÃO DA INTERAÇÃO DIPOLAR

O campo dipolar diferente do campo de troca é de longo alcance. Nesse caso, o momento magnético no sítio i sente a presença de todos os momentos magnéticos do sistema. O campo dipolar pode ser calculado da seguinte forma:

$$\vec{H}_{dipolar} = - \left( \frac{\partial}{\partial m_i^x} \hat{x} + \frac{\partial}{\partial m_i^y} \hat{y} + \frac{\partial}{\partial m_i^z} \hat{z} \right) \left[ \sum_{i,j} \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right] \quad (12)$$

Para ilustrar o procedimento, calculemos a contribuição para a componente x:

$$H_{dipolar}^x = \left( \frac{\partial}{\partial m_i^x} \right) \left[ \sum_j \frac{3(m_i^x r_{ij}^x + m_i^y r_{ij}^y + m_i^z r_{ij}^z)(m_j^x r_{ij}^x + m_j^y r_{ij}^y + m_j^z r_{ij}^z) - (m_i^x m_j^x + m_i^y m_j^y + m_i^z m_j^z)}{r_{ij}^3} \right]$$

Através de cálculo direto obtemos:

$$H^x_{dipolar} = \sum_j \frac{3r_{ij}^x(m_j^x r_{ij}^x + m_j^y r_{ij}^y + m_j^z r_{ij}^z) - m_j^x}{r_{ij}^3} \quad (13)$$

De forma análoga para as componentes y e z, temos:

$$H^y_{dipolar} = \sum_j \frac{3r_{ij}^y(m_j^x r_{ij}^x + m_j^y r_{ij}^y + m_j^z r_{ij}^z) - m_j^y}{r_{ij}^3} \quad (14)$$

$$H^z_{dipolar} = \sum_j \frac{3r_{ij}^z(m_j^x r_{ij}^x + m_j^y r_{ij}^y + m_j^z r_{ij}^z) - m_j^z}{r_{ij}^3}$$

### 3.3 CAMPO EFETIVO

Conhecendo a contribuição de cada interação, podemos escrever o campo efetivo como:

$$\begin{aligned} \vec{H}_{efetivo}^{(i)} = & \left( \frac{-H_e}{m_s} \sum_j m_j^x + \sum_j \frac{3r_{ij}^x(m_j^x r_{ij}^x + m_j^y r_{ij}^y + m_j^z r_{ij}^z) - m_j^x}{r_{ij}^3} \right) \hat{x} + \\ & + \left( \frac{-H_e}{m_s} \sum_j m_j^y + \sum_j \frac{3r_{ij}^y(m_j^x r_{ij}^x + m_j^y r_{ij}^y + m_j^z r_{ij}^z) - m_j^y}{r_{ij}^3} \right) \hat{y} + \\ & + \left( \frac{-H_e}{m_s} \sum_j m_j^z + \frac{2H_a}{m_s} m_j^z + H_0 + \sum_j \frac{3r_{ij}^z(m_j^x r_{ij}^x + m_j^y r_{ij}^y + m_j^z r_{ij}^z) - m_j^z}{r_{ij}^3} \right) \hat{z} \end{aligned} \quad (15)$$

### 3.4 MINIMIZAÇÃO DA ENERGIA

Quando a energia magnética do sistema é mínima, os momentos magnéticos não variam com o tempo e, portanto temos  $\frac{d\vec{m}_i}{dt}=0$  para todo  $i$ . Por outro lado, temos que as variações no tempo dos momentos magnéticos são dadas pela equação de movimento de Landau-Lifshitz-Gilbert:

$$\frac{d\vec{m}_i}{dt} = \gamma \vec{m}_i \times \vec{H}_{eff}^{(i)} - \lambda \vec{m}_i \times (\vec{m}_i \times \vec{H}_{eff}^{(i)}) \quad (16)$$

onde  $\gamma$  é o fator giromagnético e  $\lambda$  é a constante de "damping". O primeiro termo do lado direito desta equação descreve o movimento de precessão do momento magnético e o segundo descreve o amortecimento (12).

Estamos interessados na solução estática da equação, isto é, a solução de equilíbrio. Assim sendo, buscamos soluções da equação:

$$\gamma \vec{m}_{(i)} \times \vec{H}_{eff}^{(i)} = 0 \quad (17)$$

Isto é, a configuração de menor energia é aquela em que os momentos magnéticos estão alinhados na direção do campo efetivo.

# CAPÍTULO 4

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A apresentação dos resultados deste trabalho foi dividida em quatro seções. Na primeira, são mostrados os resultados para partículas com estrutura cristalina cúbica simples, enquanto na segunda discutimos os resultados para partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado; na terceira é feita uma comparação entre os resultados apresentados nas duas primeiras seções e discutidos os pontos mais relevantes da nossa análise. Por fim, na quarta seção, analisamos o efeito da interação dipolar.

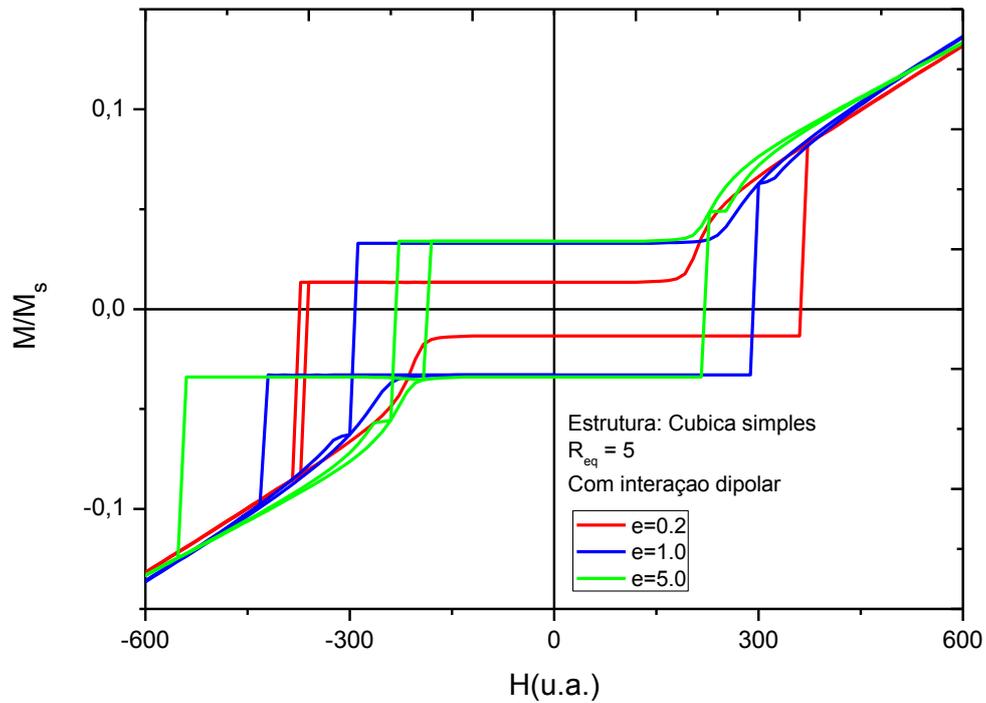
Com o intuito de facilitar a compreensão dos resultados, designou-se um termo denominado raio equivalente ( $R_{eq}$ ), dado por  $R_{eq} = \left( \frac{3V}{4\pi} \right)^{\frac{1}{3}}$  em unidades de parâmetro de rede, o qual será usado, neste estudo, para definir o volume da partícula.

### 4.1 PARTÍCULAS COM ESTRUTURA CÚBICA SIMPLES

Os resultados apresentados nesta seção são referentes a partículas com estrutura cristalina cúbica simples e  $R_{eq}$  variando de 5 a 10 parâmetros de rede. São apresentados resultados considerando o efeito da interação dipolar. Os resultados onde a mesma não é considerada serão apresentados na seção 4.4.

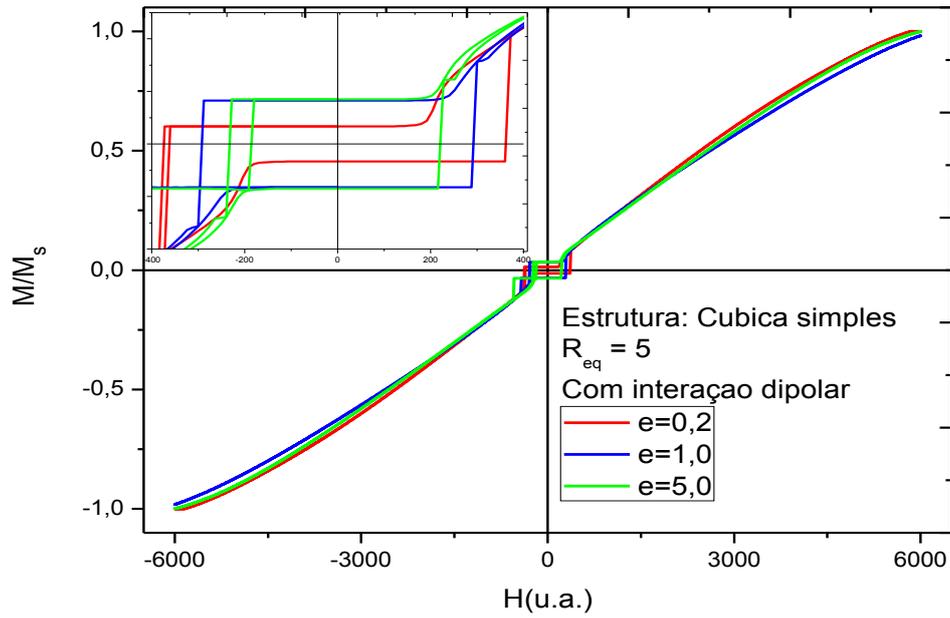
Analisou-se a magnetização remanente, coercividade e susceptibilidade do conjunto de partículas, relacionando estas propriedades com a forma, volume e tipo de estrutura cristalina de cada partícula. A fim de facilitar nossa análise, sempre que falarmos de uma partícula esférica, estaremos nos referindo a uma partícula com  $e = 1,0$ . Em todas as ocorrências em que houver referência a uma partícula achatada ao longo do eixo  $z$ , entende-se ser uma partícula com  $e = 0,2$ . Quando a ocorrência for de uma partícula alongada em relação ao eixo  $z$ , refere-se a uma partícula com  $e = 5,0$ .

Para estudarmos a magnetização remanente e a coercividade analisamos a parte central da curva de magnetização em função do campo aplicado de cada partícula. A seguir ilustramos a parte central do gráfico para uma partícula de  $R_{eq} = 5$ .

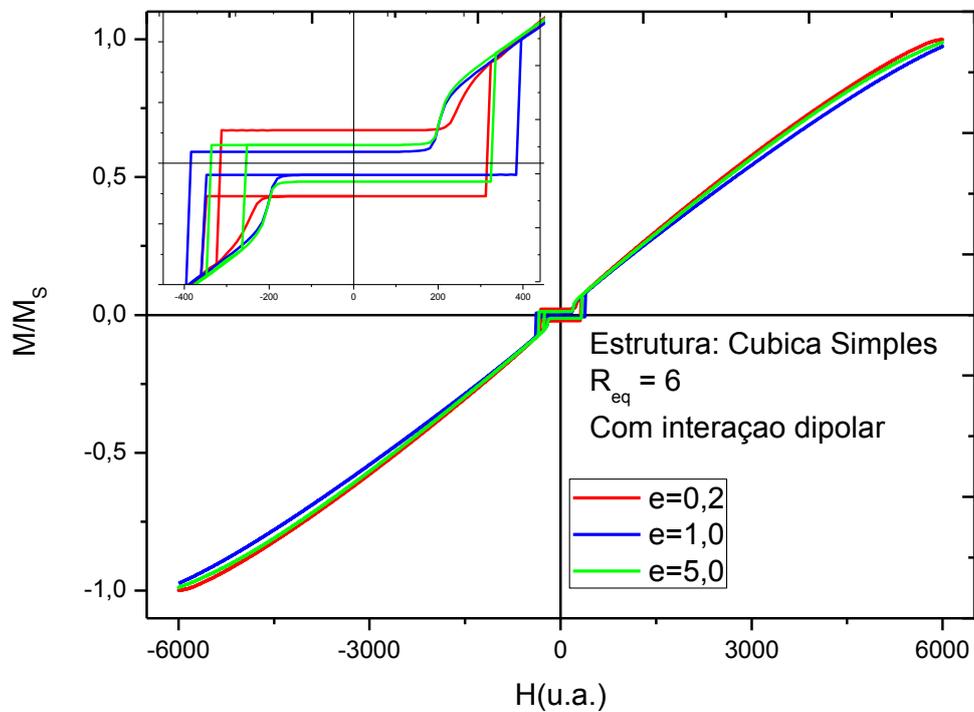


**Figura 3:** Ilustração da região central da curva de magnetização em função do campo aplicado para uma partícula  $R_{eq} = 5$  e estrutura cs.

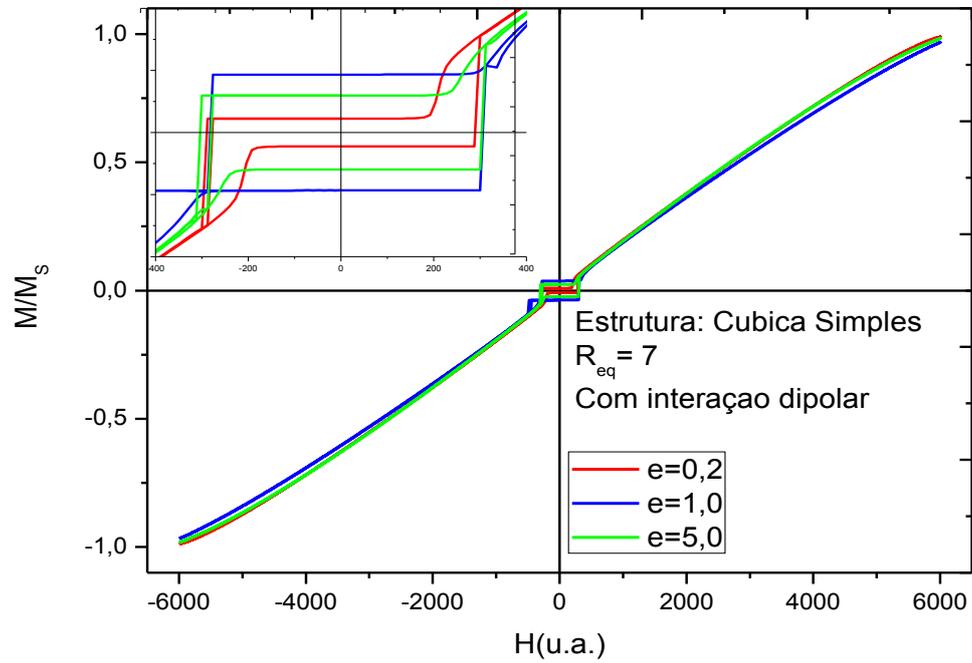
A região central da curva de magnetização em função campo aplicado para partículas com outras dimensões está ilustrada na parte superior (primeiro quadrante) de cada gráfico.



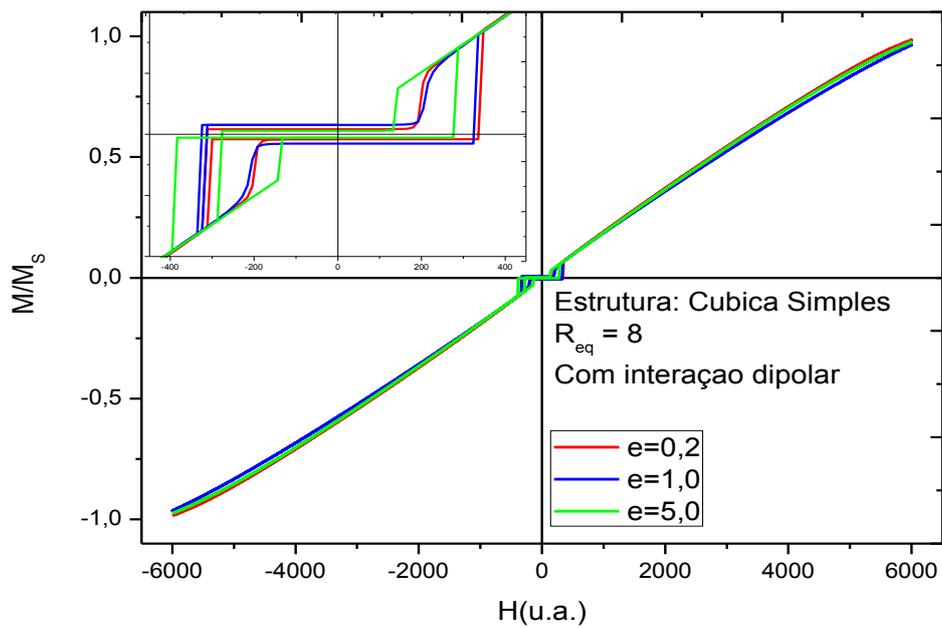
**Figura 4:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica simples de raio 5.



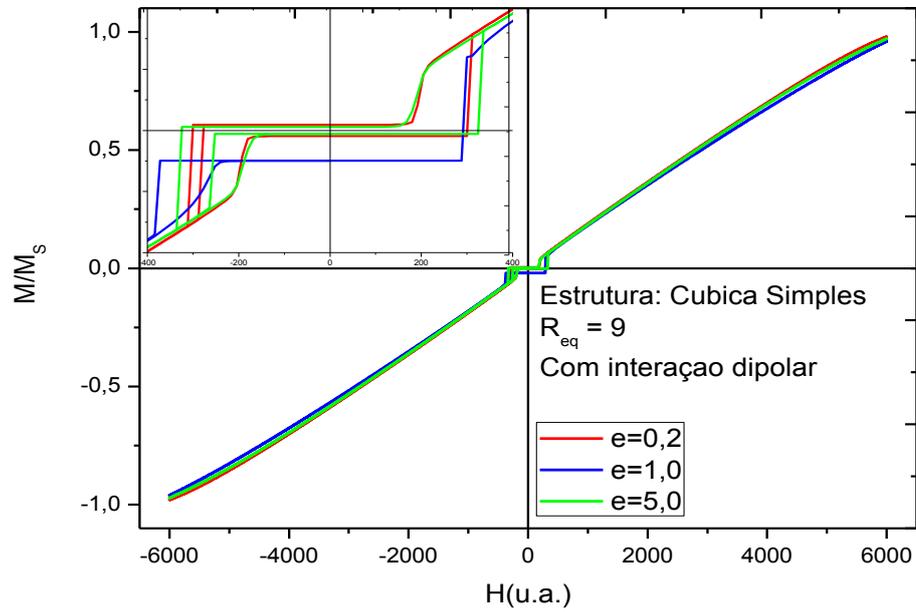
**Figura 5:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica simples de raio 6.



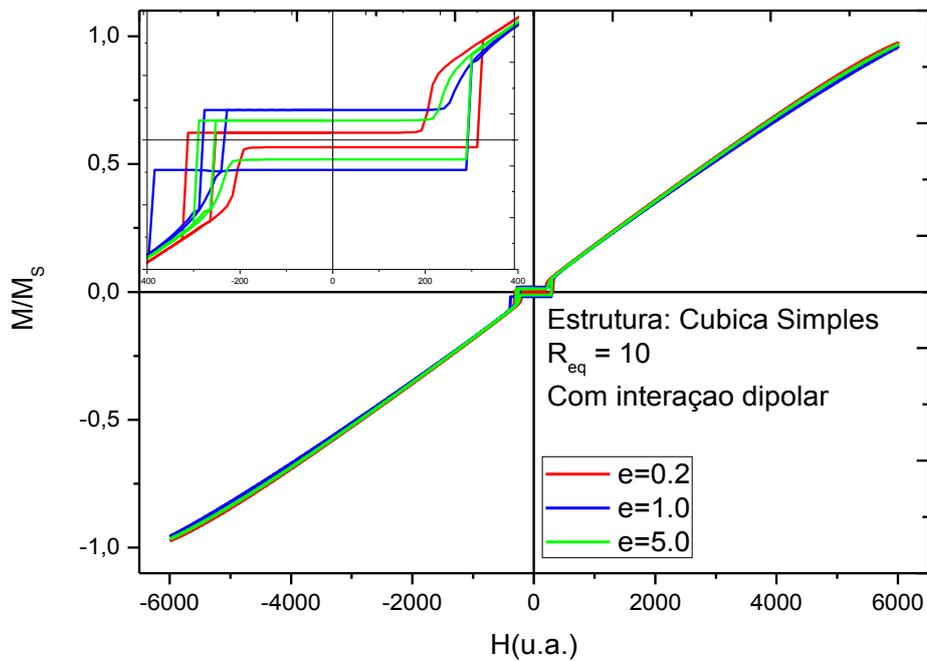
**Figura 6:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica simples de raio 7.



**Figura 7:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica simples de raio 8.



**Figura 8:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica simples de raio 9.



**Figura 9:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica simples de raio 10.

### Magnetização remanente dependendo da forma

Nas partículas de  $R_{eq} = 5$ , observamos que, ao achatá-la em relação ao eixo z, a magnetização remanente diminui em 60%, ao passo que, para uma partícula alongada em relação ao eixo z, a magnetização remanente permanece estável em relação à partícula esférica.

Em partículas com  $R_{eq} = 6$ , observa-se que, ao achatá-la em relação ao eixo z, a magnetização remanente é aumentada em mais de 150%. Quando esta partícula é alongada em relação ao eixo z, a magnetização remanente tem um crescimento de 50%.

Com relação às partículas de  $R_{eq} = 7$ , constata-se que, ao achatá-la, a magnetização remanente diminui em 4 vezes. Quando a partícula é alongada, a magnetização é reduzida em 30% quando comparada à situação em que estava em formato esférico.

No que diz respeito às partículas com  $R_{eq} = 8$ , verificamos que, ao achatá-la, a magnetização remanente diminui em 50%. Já na situação em que a partícula é alongada, a magnetização remanente é diminuída em três vezes quando comparada à situação em que a partícula estava em formato esférico.

A respeito das partículas de  $R_{eq} = 9$ , nota-se que, ao achatá-la, o valor da magnetização remanente é diminuído para 20% do que era quando estava em formato esférico. Quando a partícula é alongada, a magnetização remanente tem uma redução ainda mais acentuada, passando para um valor de 10% do que era quando estava em formato esférico.

Referente às partículas  $R_{eq} = 10$ , observa-se que, ao achatá-la, o valor da magnetização remanente é reduzido, passando a ter um valor de 20% do que era quando estava em formato de esfera. Quando a partícula é alongada, a magnetização remanente tem uma diminuição em 30% do seu valor quando em formato esférico.

### Magnetização remanente dependendo do volume

A magnetização remanente também possui dependência com o volume da partícula. Vamos analisar esta dependência usando o formato da partícula como parâmetro.

#### Partículas com $e = 0,2$

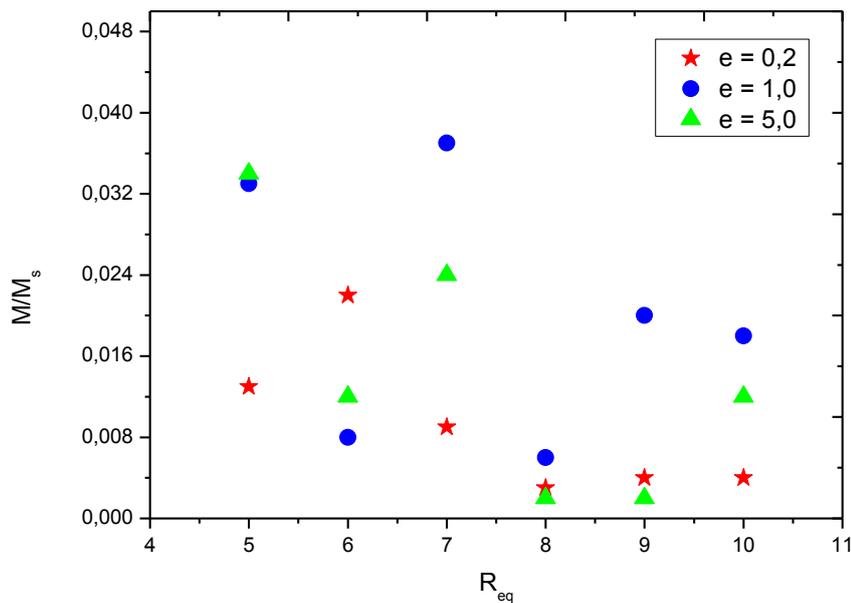
Observamos que a magnetização remanente de uma partícula com  $R_{eq} = 6$  é aumentada em 70% quando comparada a uma partícula de  $R_{eq} = 5$ . Um efeito inverso acontece quando o  $R_{eq}$  da partícula é elevado de 6 para 7, neste caso, a magnetização remanente tem uma diminuição de 60% comparada à partícula de  $R_{eq} = 6$ . Aumentando o  $R_{eq}$  de 7 para 8, a magnetização remanente é reduzida em 65% em relação à partícula de  $R_{eq} = 7$ . Continuando a aumentar o  $R_{eq}$ , agora de 8 para 9, a magnetização remanente tem um crescimento de 25%, e por fim, quando o raio é aumentado de 9 para 10, a magnetização remanente permanece estável.

#### Partículas com $e = 1,0$

Verificamos que a magnetização remanente de uma partícula de raio 6 tem um decréscimo de 75% quando comparada com uma partícula de raio 5. O inverso acontece quando o raio da partícula é aumentado de 6 para 7, nesse caso a magnetização tem um aumento de 360%. Quando o raio é aumentado de 7 para 8 a magnetização remanente é diminuída em 83% quando comparada com uma partícula de raio 7. Para a situação em que o raio é aumentado de 8 para 9, a magnetização remanente é aumentada em 233% quando comparada com uma partícula de raio 8. E por fim, quando o raio da partícula é aumentado de 9 para 10 a magnetização remanente é reduzida em 10% quando comparado com uma partícula de raio 9.

### Partículas com $e = 5,0$

Constatou-se que a magnetização remanente de uma partícula de  $R_{eq} = 6$  é diminuída em 65% quando comparada com uma partícula de  $R_{eq} = 5$ . Quando o  $R_{eq}$  da partícula é aumentado de 6 para 7, ocorre o inverso, a magnetização remanente tem um aumento de 100% em relação a partícula de  $R_{eq} = 6$ . Aumentando o  $R_{eq}$  da partícula de 7 para 8 a magnetização remanente tem uma redução acentuada de 90% quando comparada com uma partícula de  $R_{eq} = 7$ . Para a situação em que o  $R_{eq}$  é aumentado de 8 para 9 a magnetização remanente não apresenta nenhuma alteração. E por fim, quando o  $R_{eq}$  da partícula é aumentado de 9 para 10, a magnetização remanente tem um aumento bastante pronunciado de 500%.



**Figura 10:** Gráfico da magnetização remanente de partículas com estrutura cristalina cúbica simples em função do raio.

### Coercividade dependendo da forma

Ao considerar as partículas de  $R_{eq} = 5$ , observamos que ao achatá-la a coercividade da partícula é aumentada em 24% quando comparada a partícula esférica. Alongando a partícula ao longo do eixo z, observa-se uma diminuição da coercividade de 24% quando comparada com a partícula esférica.

Para as partículas com  $R_{eq} = 6$ , observamos que, ao achatá-la, a coercividade tem uma diminuição de 18% comparada com a partícula esférica. Quando a partícula é alongada em relação ao eixo z, observa-se uma redução de 15% comparada à partícula esférica.

Com relação às partículas de  $R_{eq} = 7$ , verificamos que a coercividade permanece estável com relação à forma da partícula.

As partículas com  $R_{eq} = 8$ , observamos que, ao achatá-la, a coercividade permanece inalterada em relação à partícula esférica. Alongando a partícula ao longo do eixo z, a coercividade tem uma diminuição de 14% comparada à partícula esférica.

Nas partículas de  $R_{eq} = 9$ , observamos que, ao achatá-la, a coercividade permanece constante em relação a partícula esférica. Quando a partícula é alongada na direção do eixo z, a coercividade tem um aumento de 12% comparado à partícula esférica.

Já as partículas com  $R_{eq} = 10$  a coercividade não apresentaram nenhuma dependência em relação à forma da partícula.

### Coercividade dependendo do volume

Analogamente a magnetização remanente, a coercividade apresenta dependência no volume de acordo com o formato da partícula.

### Partícula com $e = 0,2$

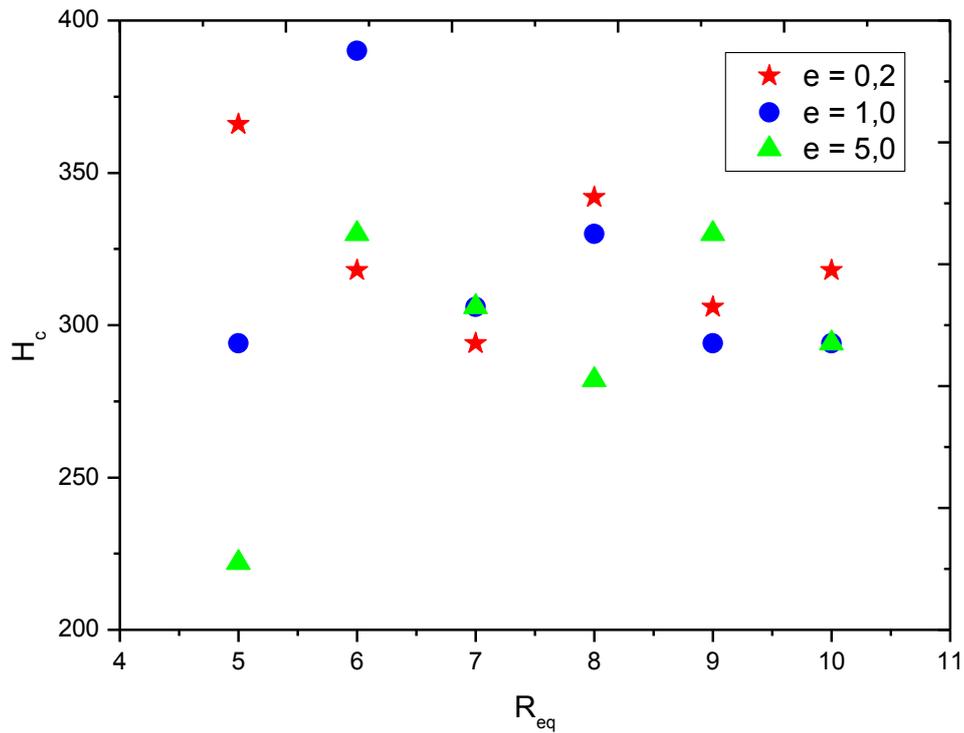
Foi possível observar que a coercividade da partícula de  $R_{eq} = 6$  é reduzida em 13% quando comparada com a partícula de  $R_{eq} = 5$ . Quando o  $R_{eq}$  é aumentado de 6 para 7 a coercividade permanece estável. Aumentando o  $R_{eq}$  de 7 para 8, pode-se observar um aumento de 16% comparando a partícula de  $R_{eq} = 7$ . Continuando a aumentar o  $R_{eq}$ , agora de 8 para 9, a coercividade volta a diminuir, dessa vez 10% em relação a partícula de  $R_{eq} = 8$ . Aumentando o  $R_{eq}$  de 9 para 10, a coercividade novamente permanece estável.

### Partícula com $e = 1,0$

Verificamos que a coercividade da partícula de raio 6 é aumentada em 32% em relação a partícula de raio 5. Aumentando o raio da partícula de 6 para 7 a coercividade é reduzida em 21% em relação a partícula de raio 6. Quando o raio é aumentado de 7 para 8, a coercividade permanece inalterada. Aumentando o raio de 8 para 9, a coercividade é reduzida em 11% se comparada a partícula de raio 8. Ao aumentar o raio de 9 para 10, a coercividade permanece constante.

### Partícula com $e = 5,0$

Constatou-se que quando o  $R_{eq}$  da partícula é aumentado de 5 para 6 a coercividade tem uma elevação de 48% em relação a de  $R_{eq} = 5$ . Aumentando o  $R_{eq}$  de 6 para 7, a coercividade permanece estável. Quando o  $R_{eq}$  da partícula é aumentado de 7 para 8 novamente a coercividade permanece estável. Para a situação em que o  $R_{eq}$  da partícula é aumentado de 8 para 9 a coercividade ocorre um acréscimo de 17% comparada a partícula de  $R_{eq} = 8$ . Quando o  $R_{eq}$  é aumentado de 9 para 10 a coercividade tem um decréscimo de 11% em relação a partícula de  $R_{eq} = 9$ .



**Figura 11:** Gráfico da coercividade de partículas com estrutura cristalina cúbica simples em função do raio.

### Susceptibilidade dependendo da forma

Ao considerar as partículas com  $R_{eq}$  entre 5 a 8 (parâmetros de rede), a susceptibilidade não apresenta nenhuma dependência com a forma da partícula.

Nas partículas de  $R_{eq} = 9$ , verificou-se que, ao achata-la a susceptibilidade tem uma elevação de 15%. Na situação em que a partícula é alongada ao longo do eixo z, a susceptibilidade tem uma elevação de 14% comparada à partícula esférica.

Para as partículas  $R_{eq} = 10$ , observou-se que a susceptibilidade permanece inalterada em relação ao formato da partícula.

### Susceptibilidade dependendo do volume

Também foi objeto de análise desta pesquisa a dependência do volume dividindo as partículas em três grupos, como segue abaixo.

#### Partículas com $e = 0,2$

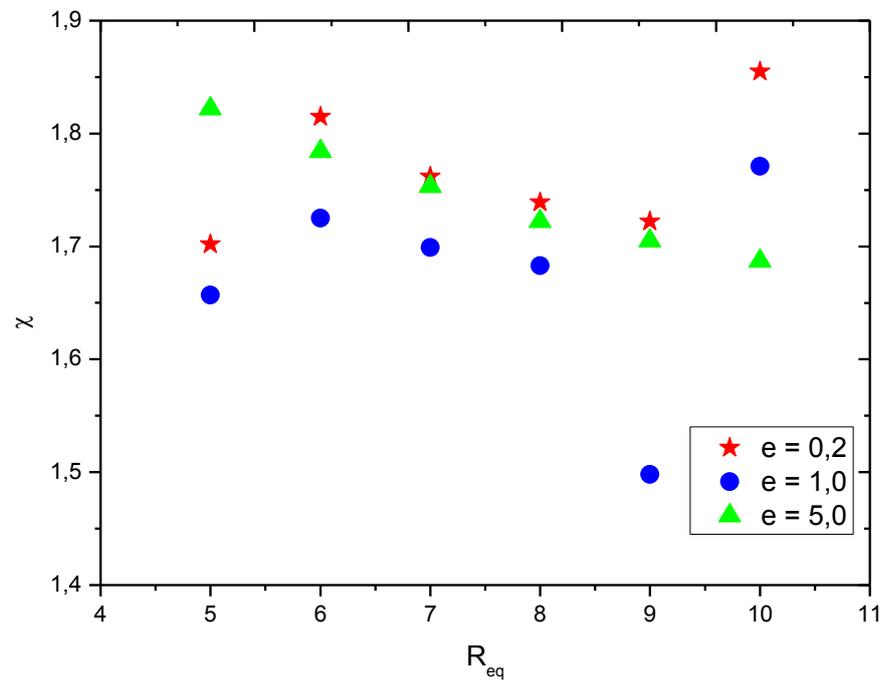
Verificou-se que variando o  $R_{eq}$  da partícula em uma unidade, na faixa de 5 a 10, a susceptibilidade permanece estável para todas as variações observadas.

#### Partículas com $e = 1,0$

Observou-se em partículas com raios de 5 a 8 que variando o raio em uma unidade, a susceptibilidade permanece estável. A respeito da partícula de raio 9, a susceptibilidade sofre uma redução de 11% em relação a partícula de raio 8. Em partícula de raio 10, ocorre um aumento de 11% comparada a partícula de raio 9.

#### Partículas com $e = 5,0$

Variando o  $R_{eq}$  da partícula em uma unidade, na faixa entre 5 e 10, a susceptibilidade permanece constante em todas as situações observadas.



**Figura 12:** Gráfico da susceptibilidade de partículas com estrutura cristalina cúbica simples em função do raio.

Na tabela 1 usamos  $M_R$ ,  $H_c$  e  $\chi$  para representar a magnetização remanente, campo coercitivo e susceptibilidade de uma partícula de  $R_{eq} = \left(3V/4\pi\right)^{\frac{1}{3}}$  (em unidades de parâmetro de rede) e razão entre os eixos z e x dada por e.

<b>Tabela 1:</b> Propriedades magnéticas de nanopartículas com estrutura cristalina cúbica simples.				
RAIO	e	$M_{R(\text{com})}$	$H_{c(\text{com})}$	$\chi_{(\text{com})}$ ( $\times 10^{-4}$ )
5	0,2	0.013	366	1,855
	1,0	0.033	294	1,771
	5,0	0.034	222	1,822
6	0,2	0.022	318	1,815
	1,0	0.008	390	1,725
	5,0	0.012	330	1,784
7	0,2	0.009	294	1,762
	1,0	0.037	306	1,699
	5,0	0.024	306	1,753
8	0,2	0.003	342	1,739
	1,0	0.006	330	1,683
	5,0	0.002	282	1,722
9	0,2	0.004	306	1,722
	1,0	0.020	294	1,498
	5,0	0.002	330	1,705
10	0,2	0.004	318	1,702
	1,0	0.018	294	1,657
	5,0	0.012	294	1,687

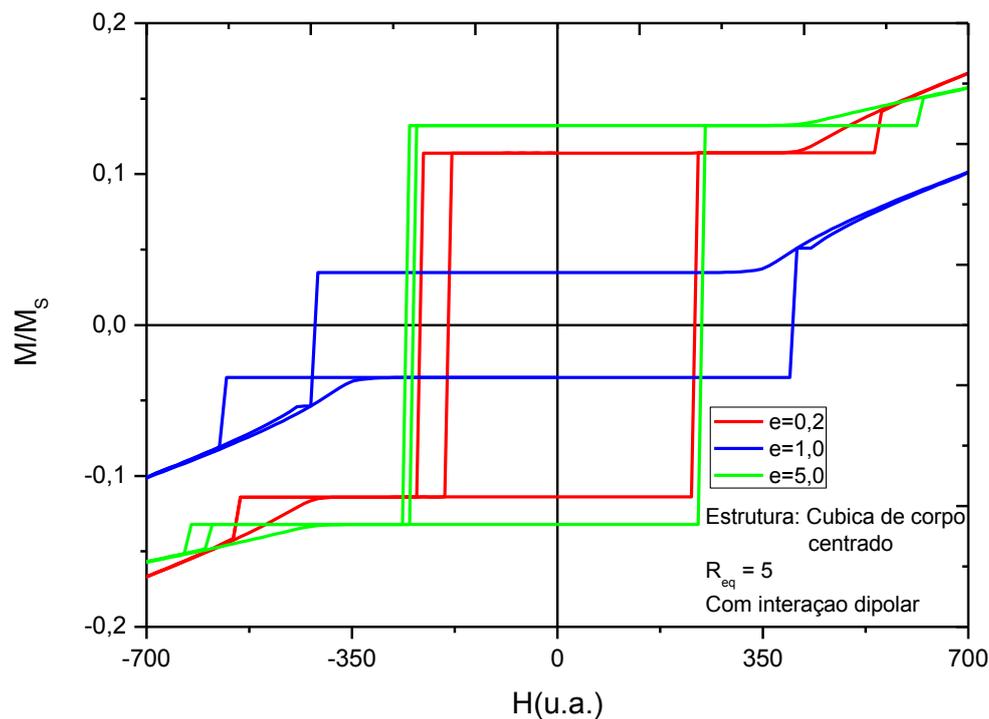
Em síntese, verificou-se que a magnetização remanente possui uma forte dependência com a forma e o volume da partícula se estabilizando para partículas com  $R_{eq}$  mais elevados. O campo coercitivo apresenta dependência com a forma e o volume da partícula, assim como ocorre para a magnetização remanente, essa dependência é mais

acentuada para partículas com  $R_{eq}$  menores. A susceptibilidade também apresenta dependência com a forma e volume da partícula, no entanto, essa dependência não é tão pronunciada quanto para a magnetização remanente e o campo coercitivo. Os laços observados nas extremidades da região central de algumas curvas de histerese são característicos da transição para a fase spin-flop, nessa fase, os momentos magnéticos orientam-se transversalmente ao campo aplicado.

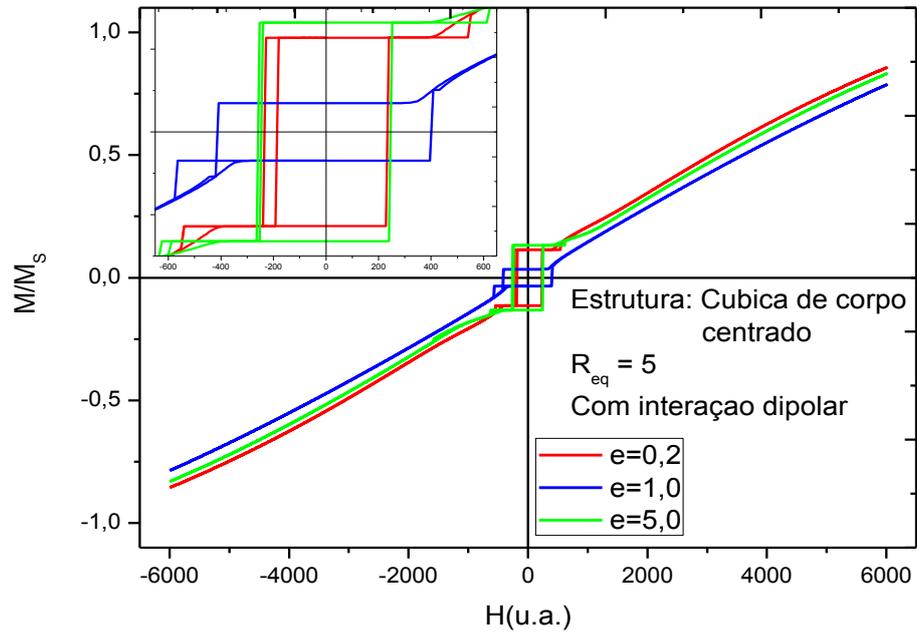
## 4.2 PARTÍCULAS COM ESTRUTURA CÚBICA DE CORPO CENTRADO

A apresentação dos resultados para as partículas cúbicas de corpo centrado foi realizada seguindo a mesma ordem utilizada para as partículas com estrutura cristalina cúbica simples. Em todas as referências a uma partícula achatada trata-se de uma partícula onde  $e = 0,2$ . Por partícula esférica, denominamos uma partícula com  $e = 1,0$ . Para uma partícula alongada compreende-se uma partícula onde  $e = 5,0$ .

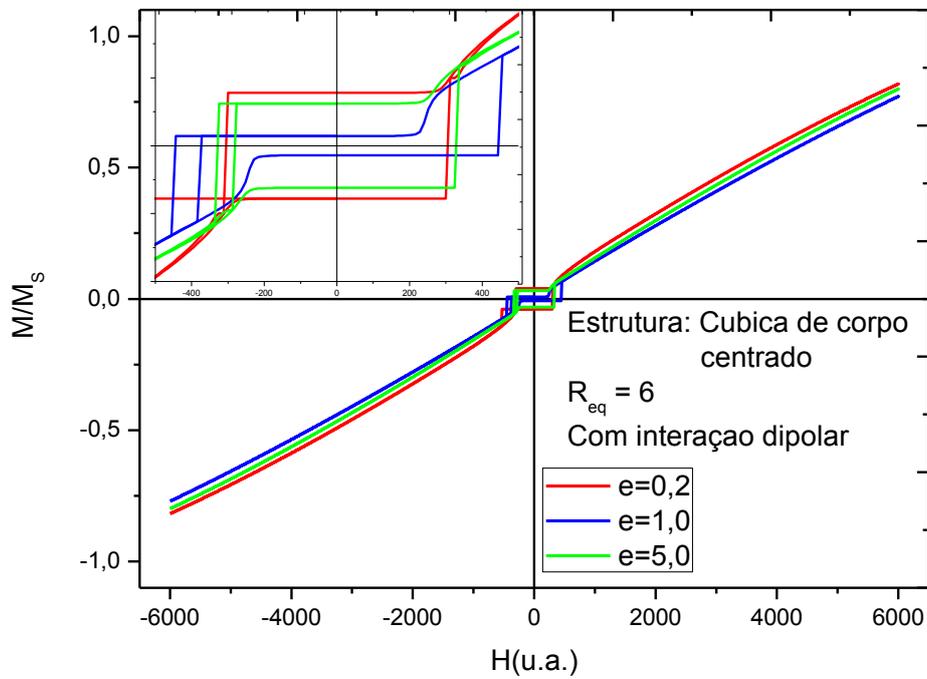
A seguir está ilustrada a região central da curva de magnetização em função do campo aplicado (histerese) para uma partícula de  $R_{eq} = 5$ .



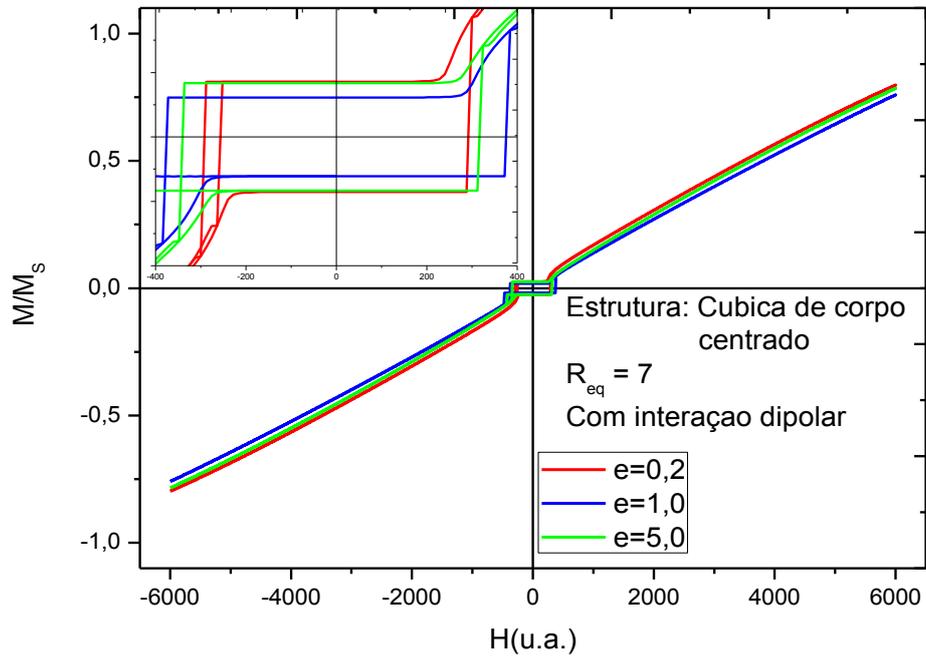
**Figura 13:** Ilustração da região central da curva de magnetização em função do campo aplicado para uma partícula  $R_{eq} = 5$  e estrutura bcc.



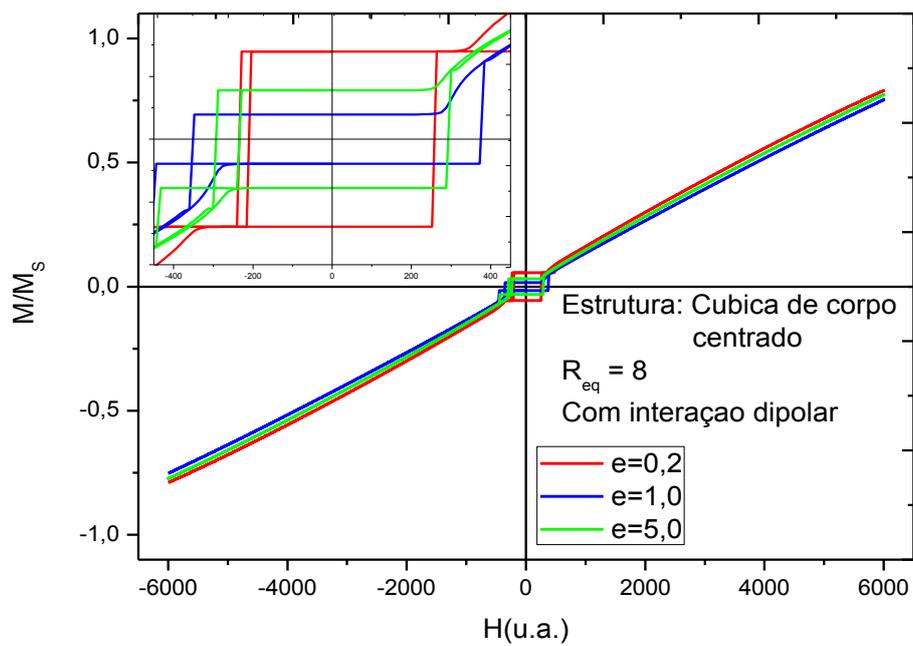
**Figura 14:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 5.



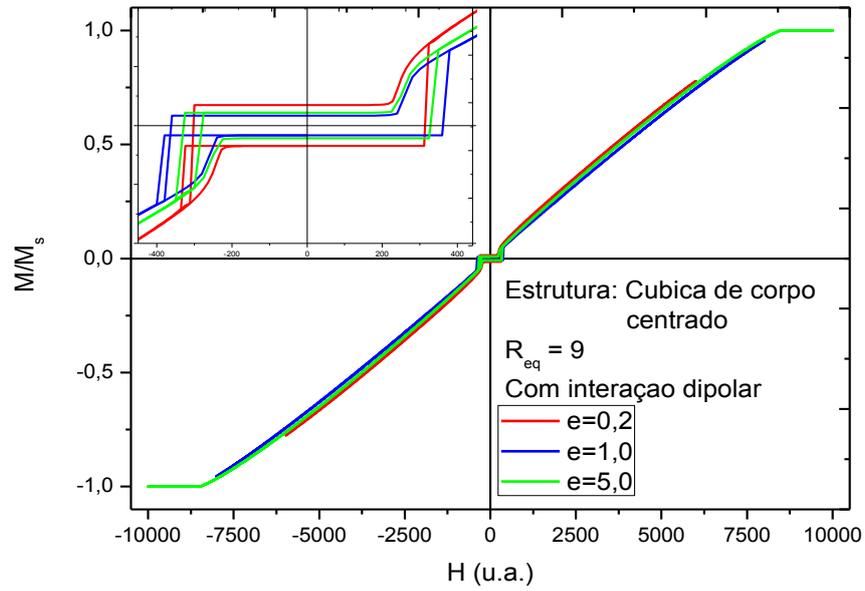
**Figura 15:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 6.



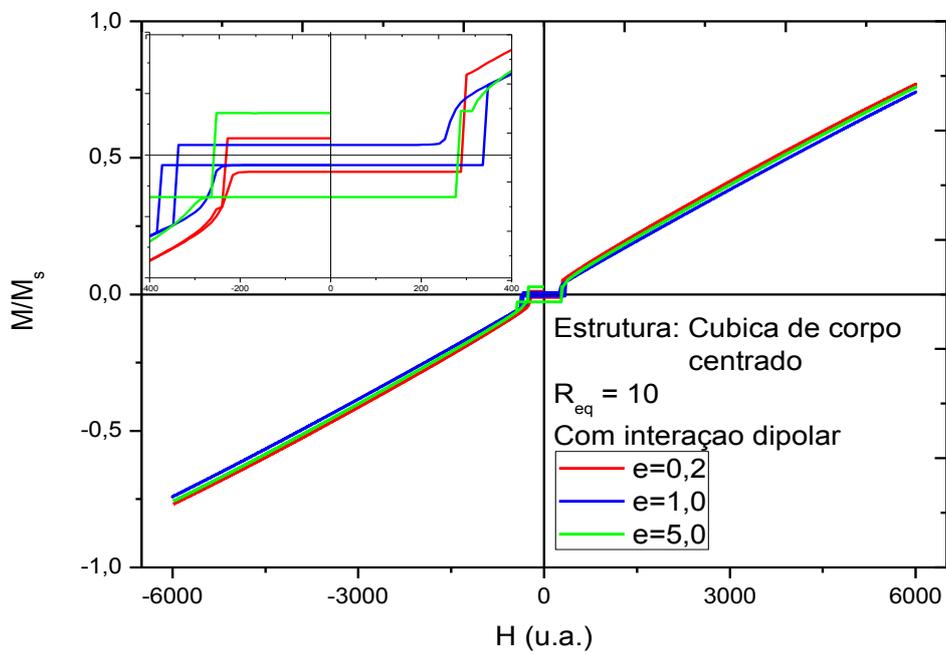
**Figura 16:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 7.



**Figura 17:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 8.



**Figura 18:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 9.



**Figura 19:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 10.

### Magnetização remanente dependendo da forma

Para as partículas de  $R_{eq} = 5$ , observou-se que a magnetização remanente tem um aumento de 225% quando a partícula é achatada. Na situação em que a partícula é alongada, verificamos um aumento de 277% em relação à partícula esférica.

Ao considerar as partículas com  $R_{eq} = 6$ , constatou-se que a magnetização remanente tem uma elevação de 457% quando a partícula é achatada. Para a partícula alongada em relação ao eixo z, foi percebido um crescimento de 342% comparado a partícula esférica.

Nas partículas de  $R_{eq} = 7$ , verificou-se que a magnetização remanente tem um aumento de 44% quando a partícula é achatada. Quando a partícula é alongada em relação ao eixo z, a magnetização remanente é elevada em 38% em relação à partícula esférica.

A respeito das partículas com  $R_{eq} = 8$ , observou-se a magnetização remanente aumentada em 250% quando a partícula é achatada. Para a partícula alongada em relação ao eixo z, a magnetização remanente tem um crescimento em 94% comparado a partícula esférica.

As partículas de  $R_{eq} = 9$ , foi verificada que a magnetização remanente tem um crescimento de 100% para a condição em que é achatada. Quando a partícula é alongada em relação ao eixo z, a magnetização remanente é aumentada em 29% em relação à partícula esférica.

Para as partículas com  $R_{eq} = 10$ , a magnetização remanente é aumentada 57% quando é achatada em relação ao eixo z. Quando a partícula é alongada em relação ao eixo z, a magnetização remanente tem um aumento de 285% comparado à partícula esférica.

### Magnetização remanente dependendo do volume

Com a finalidade de objetivar a análise, seguindo a mesma diretiva já anunciada, dividimos as partículas em três grupos de acordo com a forma.

### Partícula com $e = 0,2$

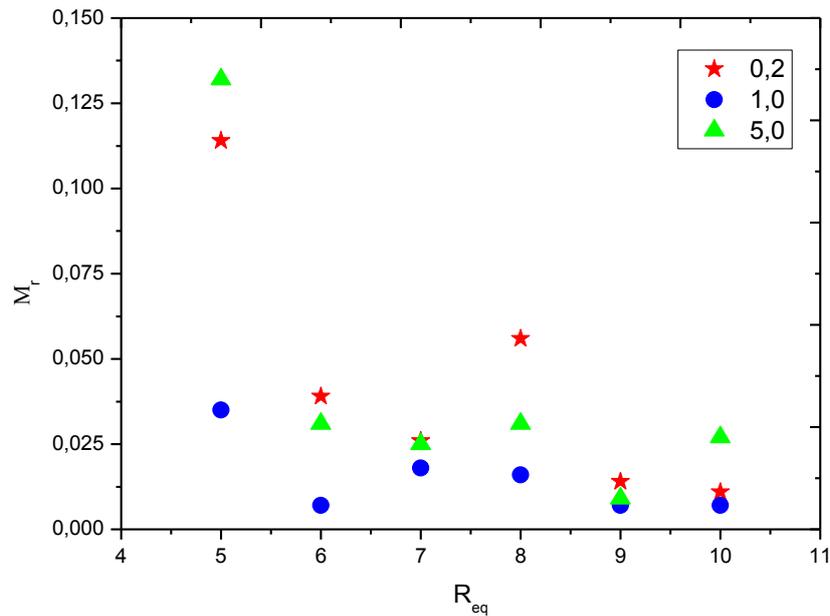
Na partícula de  $R_{eq} = 5$  foi observada uma redução de 66% na magnetização remanente quando o  $R_{eq}$  é aumentado para 6. Em relação à partícula de  $R_{eq} = 6$ , pode-se notar um decréscimo de 33% quando o  $R_{eq}$  é aumentado para 7. Para a partícula de  $R_{eq} = 7$ , constatou-se uma elevação de 138% quando o  $R_{eq}$  é aumentado para 8. No que diz respeito à partícula de  $R_{eq} = 8$ , obtivemos uma redução de 75% quando o  $R_{eq}$  é aumentado para 9. Para a partícula de  $R_{eq} = 9$ , a redução foi de 21% quando a partícula tem o  $R_{eq}$  aumentado para 10.

### Partículas com $e = 1,0$

Para a partícula de raio 5, verificou-se uma redução de 80% quando o raio é aumentado para 6. Na partícula de raio 6, constatou-se uma elevação em 157% quando o raio é aumentado para 7. Em relação à partícula de raio 7, uma redução de 11% quando o raio é aumentado para 8. Referente à partícula de raio 8, ocorreu uma diminuição de 56% quando o raio é aumentado para 9. Na situação em que o raio da partícula é alterado de 9 para 10 a magnetização remanente permanece constante.

### Partículas com $e = 5,0$

Em relação à partícula de  $R_{eq} = 5$ , uma redução de 76% foi percebida quando o  $R_{eq}$  é elevado para 6. Para a partícula de  $R_{eq} = 6$ , observamos um decréscimo de 19% quando o  $R_{eq}$  é aumentado para 7. A partícula de  $R_{eq} = 7$  apresentou um aumento de 24% quando o  $R_{eq}$  foi elevado para 8. No que diz respeito à partícula  $R_{eq} = 8$ , obteve-se uma redução de 71% quando o  $R_{eq}$  foi alterado para 9. Quando o  $R_{eq}$  alterado de 9 para 10, o acréscimo foi de 200%.



**Figura 20:** Gráfico da magnetização remanente de partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado em função do raio.

### Coercividade dependendo da forma

Para as partículas de  $R_{eq} = 5$ , verificou-se que a coercividade da partícula achatada ao longo do eixo z é 42% menor que a esférica. Na condição em que a partícula é alongada em relação ao eixo z, a coercividade é reduzida em 39% comparada com a esférica.

Nas partículas de  $R_{eq} = 6$ , a coercividade da partícula achatada ao longo do eixo z cerca de 28% menor que a esférica. Quando a partícula é alongada em relação ao eixo z, a coercividade é reduzida 48% em relação à esférica.

Com relação às partículas  $R_{eq} = 7$ , a coercividade da partícula achatada ao longo do eixo z é 22% menor que a da esférica. Para a situação em que a partícula é alongada em relação ao eixo z, a coercividade tem um decréscimo em 16% comparado à esférica.

A respeito das partículas de  $R_{eq} = 8$ , a coercividade da partícula achatada em relação ao eixo z é 32% menor que a da esférica. Para a situação em que a partícula é alongada em relação a eixo z, a coercividade é reduzida 22% em relação à esférica.

Quanto às partículas de  $R_{eq} = 9$ , a coercividade da partícula achatada em relação ao eixo z é 13% menor que a da esférica. Quando a partícula é alongada em relação ao eixo z, a coercividade é reduzida em 23% comparada à esférica.

Para as partículas com  $R_{eq} = 10$ , observou-se que a coercividade da partícula achatada em relação ao eixo z é 14% inferior a da esférica. Na situação em que a partícula é alongada em relação ao eixo z, constatou-se uma redução de 17% comparada à esférica.

### Coercividade dependendo do volume

A mesma regra utilizada nas análises de dependência do volume foi igualmente utilizada, ou seja, dividimos as partículas em três grupos de acordo com a forma.

#### Partículas com $e = 0,2$

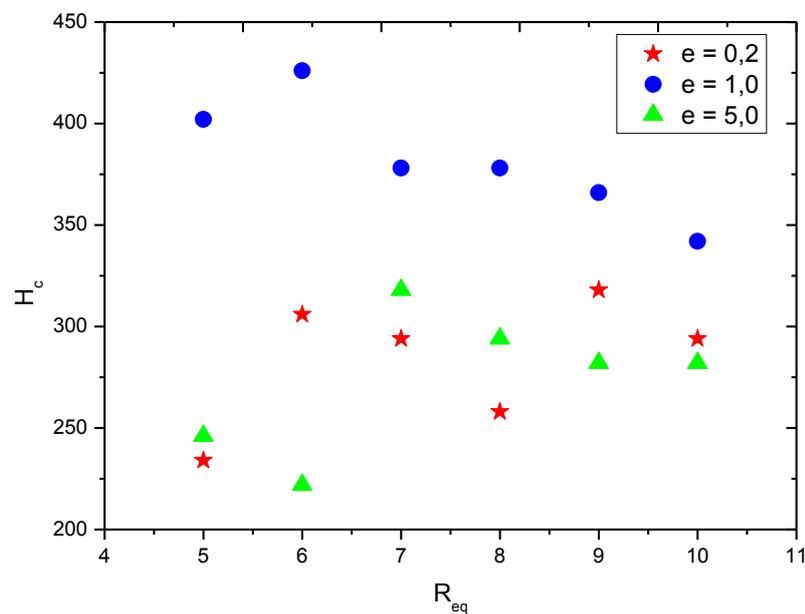
Ao considerar a partícula de  $R_{eq} = 5$ , observou-se que a coercividade tem um acréscimo de 31% quando o  $R_{eq}$  é elevado para 6. Quando o  $R_{eq}$  da partícula é aumentado de 6 para 7, a coercividade permanece estável. Para a partícula de  $R_{eq} = 7$ , ocorreu uma diminuição de 12% em relação à de  $R_{eq} = 8$ . Na partícula de  $R_{eq} = 8$ , a coercividade sofre um aumento de 23% quando o  $R_{eq}$  é elevado para 9. Quando o  $R_{eq}$  é aumentado de 9 para 10, a coercividade permanece constante.

#### Partículas com $e = 1,0$

Para a partícula de raio 5, a coercividade permanece constante quando o raio é aumentado em uma unidade. Com relação à partícula de raio 6, ocorre uma redução na coercividade de 11% quando o raio é aumentado para 7. Para as partículas com raios entre 7 e 10 verificou-se que, variando o raio em uma unidade dentro desse intervalo não provoca nenhuma alteração na coercividade.

### Partículas com $e = 5,0$

Ao considerar a partícula de  $R_{eq} = 5$ , observou-se uma redução na coercividade de 10% quando o  $R_{eq}$  é aumentado para 6. Para a partícula de  $R_{eq} = 6$ , houve um aumento de 43% para a situação em que o  $R_{eq}$  é aumentado para 7. Quando o  $R_{eq}$  da partícula é aumentado de 7 para 8, a coercividade permanece constante. Na faixa de  $R_{eq}$  de 8-10, constatou-se que para variações de uma unidade, a coercividade permanece estável.



**Figura 21:** Gráfico da coercividade de partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado em função do raio.

### Susceptibilidade dependendo da forma

Para partículas de  $R_{eq} = 5$ , a susceptibilidade da partícula achatada em relação ao eixo z é 13% maior que a esférica. Na situação em que a partícula é alongada em relação ao eixo z, a susceptibilidade permanece estável em relação à esférica.

Nas partículas de  $R_{eq} = 6$ , foi observado que a susceptibilidade se mostra independente do formato da partícula.

Com relação às partículas de  $R_{eq} = 7$ , a susceptibilidade da partícula achatada em relação ao eixo z é 38% maior que a da esférica. Quando a partícula é alongada em relação ao eixo z, a susceptibilidade permanece constante em relação à esférica.

Para partículas com  $R_{eq}$  de 8 a 10, a coercividade mostrou-se independente da forma.

### Susceptibilidade dependendo do volume

Para a susceptibilidade, a exemplo da regra utilizada nas análises anteriores, as partículas foram divididas em três grupos segundo as suas formas.

#### Partículas com $e = 0,2$

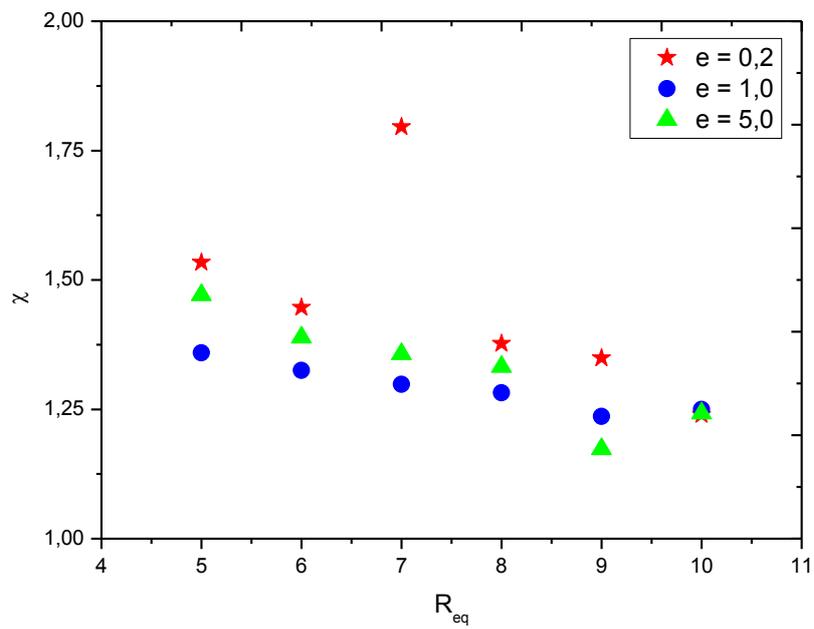
Para a partícula de  $R_{eq} = 5$ , a susceptibilidade permanece inalterada quando o  $R_{eq}$  é elevado de uma unidade. Para a situação em que o  $R_{eq}$  é aumentado de 6 para 7, verificou-se que a susceptibilidade tem um acréscimo de 24%. Para a partícula de  $R_{eq} = 7$ , podemos observar uma redução na susceptibilidade de 23% quando o  $R_{eq}$  é aumentado para 8. Quando o  $R_{eq}$  da partícula é elevado de 8 para 9, a susceptibilidade permanece estável. Para a partícula de  $R_{eq} 9$ , a susceptibilidade permanece invariável quando o  $R_{eq}$  é aumentado de uma unidade.

#### Partículas com $e = 1,0$

Para as partículas esféricas ( $e = 1,0$ ), aumentando o raio das partículas de uma unidade, dentro da faixa de raios de 5 a 10, a susceptibilidade permanece estável para todas as variações observadas.

### Partículas com $e = 5,0$

Com relação às partículas com  $e = 5,0$ , a única partícula que apresentou dependência com o volume foi a de  $R_{eq} = 8$ , a qual teve a susceptibilidade reduzida em 12% quando o  $R_{eq}$  foi elevado para 9.



**Figura 22:** Gráfico da susceptibilidade de partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado em função do raio.

Na tabela 2 apresentamos as propriedades estudadas em função do raio equivalente e a razão (e) entre os eixos do elipsoide da partícula.

<b>Tabela 2:</b> Propriedades magnéticas de nanopartículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado.				
RAIO	e	$M_{R(\text{com})}$	$H_{c(\text{com})}$	$\chi_{(\text{com})}$ ( $\times 10^{-4}$ )
5	0,2	0,114	234	1,534
	1,0	0,035	402	1,359
	5,0	0,132	246	1,471
6	0,2	0,039	306	1,447
	1,0	0,007	426	1,325
	5,0	0,031	222	1,389
7	0,2	0,026	294	1,796
	1,0	0,018	378	1,298
	5,0	0,025	318	1,357
8	0,2	0,056	258	1,377
	1,0	0,016	378	1,282
	5,0	0,031	294	1,332
9	0,2	0,014	318	1,349
	1,0	0,007	366	1,236
	5,0	0,009	282	1,173
10	0,2	0,011	294	1,240
	1,0	0,007	342	1,250
	5,0	0,027	282	1,242

Em síntese, constatou-se que a magnetização remanente apresenta forte dependência com a forma e o raio da partícula, sendo que a dependência é mais acentuada para partículas com raios menores. Mais, que as partículas esféricas apresentam os menores valores para a magnetização remanente. Para a coercividade, verificou-se que além da dependência com o raio e a forma, vimos que partículas esféricas apresentam coercividade

mais elevada e que esta propriedade se estabiliza para valores mais elevados do raio. A susceptibilidade apresenta dependência menos pronunciada para o raio e a forma da partícula. Essa propriedade se estabiliza para partículas com maior valor de raio e que partículas esféricas ( $e = 1,0$ ) não apresentam dependência com o volume. Assim como ocorre nas curvas de histerese para as partículas com estrutura cs, os laços observados nas extremidades da região central de algumas curvas de histerese são característicos da transição para a fase spin-flop.

### **4.3. COMPARAÇÃO ENTRE AS PROPRIEDADES DE PARTÍCULAS CS E bcc DE MESMO VOLUME E FORMA**

Nesta seção a análise dos resultados focaliza o efeito do tipo de estrutura cristalina nas propriedades magnéticas de nanopartículas com estrutura cúbica simples e cúbica de corpo centrado.

#### Magnetização remanente

De modo geral, partículas com estrutura cúbica de corpo centrado possuem magnetização remanente mais elevada que aquelas com estrutura cúbica simples.

Para as partículas de  $R_{eq} = 5$ , observamos que todas as partículas com estrutura cúbica de corpo centrado possuem magnetização remanente mais elevada do que as com estrutura cúbica simples. Considerando as partículas com  $e = 0,2$ , a magnetização remanente da partícula com estrutura bcc é 777% mais elevada do que a com estrutura cs. Já as partículas com  $e = 1,0$ , a diferença de estrutura não produz modificações. Consideradas as partículas com  $e = 5,0$ , a magnetização remanente da com estrutura bcc é significativamente mais elevada do que a com estrutura cs, uma elevação de 288%.

A respeito das partículas de  $R_{eq} = 6$ , observamos que apenas as com  $e = 1,0$  apresenta a situação onde a partícula com estrutura cs tem magnetização remanente maior que a com estrutura bcc, sendo a magnetização remanente da bcc 12% menor. Para as partículas

com  $e = 0,2$ , a magnetização remanente da com estrutura bcc é 77% maior do que aquela com estrutura cs. Considerando as partículas com  $e = 5,0$ , verificamos que a magnetização remanente da com estrutura bcc é 158% maior que a com estrutura cs.

As partículas com  $R_{eq} = 7$ , apresentam a mesma situação que as com raio 6, onde, para as com  $e = 1,0$  a magnetização remanente da com estrutura cs é cerca de 51% maior do que a de estrutura bcc. Para as partículas com  $e = 0,2$ , a magnetização remanente da com estrutura bcc é 189% mais elevada do que de estrutura cs. Já para as partículas com  $e = 5,0$ , a diferença de estrutura não leva a alterações na magnetização remanente.

Em relação às partículas de  $R_{eq} = 8$ , em todas as situações as de estrutura bcc apresentam magnetização remanente mais elevada do que as com estrutura cs. Para as partículas com  $e = 0,2$ , a magnetização remanente da com estrutura bcc é 1766% maior que o de estrutura cs. As partículas com  $e = 1,0$ , a de estrutura bcc tem magnetização remanente 166% mais elevada que a com estrutura cs. Referente às partículas com  $e = 5,0$ , a magnetização remanente da com estrutura bcc tem um crescimento de 1450% em relação à com estrutura cs.

Nas partículas de  $R_{eq} = 9$ , novamente apenas as com  $e = 1,0$  apresenta a situação em a partícula com estrutura cs tem magnetização remanente mais elevada do que a de estrutura bcc. Para  $e = 1,0$ , a com estrutura cs tem a magnetização remanente cerca de 186% mais elevada do que a de estrutura bcc. Considerando as partículas com  $e = 0,2$ , a magnetização remanente da com estrutura bcc é aproximadamente 250% maior que a de estrutura cs. No caso de partículas com  $e = 5,0$ , a magnetização remanente da com estrutura bcc é em torno de 350% mais elevado que a de estrutura cs.

Para as partículas com  $R_{eq} = 10$ , temos a situação em que para as de  $e = 1,0$ , a magnetização remanente da com estrutura cs é maior do que a de estrutura bcc, sendo magnetização remanente da com estrutura cs é 61% mais elevada que a de estrutura bcc. Considerando as partículas com  $e = 0,2$ , a magnetização remanente da com estrutura bcc é em torno 175% mais elevada que a de estrutura cs. Nas partículas com  $e = 5,0$ , a magnetização remanente da com estrutura bcc é aproximadamente 125% maior que a de estrutura cs.

## Coercividade

Nas partículas de  $R_{eq} = 5$ , observamos que as de estrutura bcc e  $e = 1,0$  e  $e = 5,0$ , possuem coercividade maior do que as de estrutura cs. Para partículas com  $e = 0,2$ , a coercividade da com estrutura bcc é 36% menor do que a de estrutura cs. Com relação às partículas com  $e = 1,0$ , a coercividade da com estrutura bcc é 37% maior do que a com estrutura cs. As partículas com  $e = 5,0$ , a coercividade da com estrutura bcc é 11% mais elevada que a de estrutura cs.

Para as partículas de  $R_{eq} = 6$ , as de  $e = 0,2$  e  $e = 1,0$ , não apresentam alterações quanto a diferença de estrutura. Em relação às partículas com  $e = 5,0$ , a coercividade da com estrutura bcc é 33% menor que a de estrutura cs.

As partículas com  $R_{eq} = 7$  apresentam a situação em que para  $e = 0,2$  e  $e = 5,0$  a coercividade não apresenta modificações com a estrutura. Quando  $e = 1,0$ , a coercividade da partícula com estrutura bcc é 23% mais elevada que a com estrutura cs.

Nas partículas com  $R_{eq} = 8$ , observou-se que para as com  $e = 0,2$ , a coercividade da com estrutura bcc é 25% menor que a com estrutura cs. As partículas com  $e = 1,0$ , a coercividade da com estrutura bcc é 14% maior que a de estrutura cs. No tocante as partículas com  $e = 5,0$ , não foi observado alterações quanto ao tipo de estrutura.

Com relação às partículas de  $R_{eq} = 9$ , constatou-se que para as de  $e = 0,2$ , a coercividade não sofre modificações com o tipo de estrutura. Para as partículas com  $e = 1,0$ , a coercividade da de estrutura bcc é 24% maior que a de estrutura cs. No que diz respeito às partículas com  $e = 5,0$ , a coercividade da com estrutura bcc é 14% menor que a de estrutura cs.

No que diz respeito às partículas com  $R_{eq} = 10$ , observou-se que para  $e = 0,2$  e  $e = 5,0$ , a coercividade é constante quanto a estrutura. Considerando as partículas com  $e = 1,0$ , a de estrutura bcc tem a coercividade 16% mais elevada que a de estrutura cs.

## Susceptibilidade

A respeito das partículas de  $Re_q = 5$ , todas com estrutura bcc exibem susceptibilidade menor que as de estrutura cs. Para as partículas com  $e = 0,2$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 17% menor que a com estrutura cs. Considerando as partículas com  $e = 1,0$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 23% menor que a de estrutura cs. Referente às partículas com  $e = 5,0$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 19% menor que a de estrutura cs.

Em relação às partículas de  $Re_q = 6$ , a susceptibilidade de todas as partículas com estrutura bcc é menor que para as de estrutura cs. Para as partículas com  $e = 0,2$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 20% menor que para as de estrutura cs. As partículas com  $e = 1,0$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 23% menor que para a de estrutura cs. Já para as partículas com  $e = 5,0$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 22% menor que para a de estrutura cs.

Nas partículas de  $Re_q = 7$ , temos a situação em que para as partículas com  $e = 0,2$ , a susceptibilidade permanece estável. Considerando as partículas com  $e = 1,0$ , a susceptibilidade da partícula com estrutura bcc é 24% menor que para a partícula com estrutura cs. A respeito das partículas com  $e = 5,0$ , a susceptibilidade partícula com estrutura BCC é 23% menor que para a partícula com estrutura cs.

Para as partículas de  $Re_q = 8$ , novamente temos o cenário em que todas com estrutura bcc apresentam susceptibilidade menor que as com estrutura cs. As partículas com  $e = 0,2$ , a susceptibilidade da partícula com estrutura bcc é 21% menor que para a com estrutura cs. Em relação às partículas com  $e = 1,0$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 24% menor que para a com estrutura cs. Já para as partículas com  $e = 5,0$ , a susceptibilidade da partícula com estrutura bcc é 23% menor que para a com estrutura cs.

Referente às partículas de  $Re_q = 9$ , verificou-se a ocorrência em que todas as partículas com estrutura bcc possuem susceptibilidade menor que as com estrutura cs. Para as partículas com  $e = 0,2$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 22% menor que para a com estrutura cs. Em relação às partículas com  $e = 1,0$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 17% menor que para a com estrutura cs. As partículas com  $e = 5,0$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 31% menor que para a com estrutura cs.

No que se refere às partículas de  $R_{eq} = 10$ , mais uma vez todas as partículas com estrutura bcc apresentam susceptibilidade menor que as com estrutura cs. No tocante as partículas com  $e = 0,2$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 27% menor que para a com estrutura cs. Já para as partículas com  $e = 1,0$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 25% menor que para a com estrutura cs. Por fim, para as partículas com  $e = 5,0$ , a susceptibilidade da com estrutura bcc é 26% menor que para a com estrutura cs.

Na tabela 3 são apresentados os resultados segundo cada tipo de estrutura.

<b>Tabela 3:</b> Propriedades magnéticas de partículas para diferentes estruturas cristalinas.							
RAIO	e	$M_{R(cs)}$	$M_{R(bcc)}$	$H_{c(cs)}$	$H_{c(bcc)}$	$\chi_{(cs)} (x10^{-4})$	$\chi_{(bcc)} (x10^{-4})$
5	0,2	0,013	0,114	366	234	1,855	1,534
	1,0	0,033	0,035	294	402	1,771	1,359
	5,0	0,034	0,132	222	246	1,822	1,471
6	0,2	0,022	0,039	318	306	1,815	1,447
	1,0	0,008	0,007	390	426	1,725	1,325
	5,0	0,012	0,031	330	222	1,784	1,389
7	0,2	0,009	0,026	294	294	1,762	1,796
	1,0	0,037	0,018	306	378	1,699	1,289
	5,0	0,024	0,025	306	318	1,753	1,357
8	0,2	0,003	0,056	342	258	1,739	1,377
	1,0	0,006	0,016	330	378	1,683	1,282
	5,0	0,002	0,031	282	294	1,722	1,332
9	0,2	0,004	0,014	306	318	1,722	1,349
	1,0	0,020	0,007	294	366	1,498	1,236
	5,0	0,002	0,009	330	282	1,705	1,173
10	0,2	0,004	0,011	318	294	1,702	1,240
	1,0	0,018	0,007	294	342	1,657	1,250
	5,0	0,012	0,027	294	282	1,687	1,242

## 4.4 EFEITO DA INTERAÇÃO DIPOLAR

### Partículas com estrutura cúbica simples

No mesmo princípio das situações anteriores, proceder-se-á a demonstração e análise separadamente. A começar pela comparação entre o cálculo realizado com e sem a inclusão do campo dipolar, a análise da diferença é o desfecho e foco da investigação.

### Magnetização remanente

Dentre as propriedades focalizadas nesta pesquisa, a magnetização remanente é a única que permaneceu invariante com respeito ao campo dipolar.

### Coercividade

As partículas de  $R_{eq} = 5$  com  $e = 1,0$  e  $e = 5,0$  não possuem modificações com o campo dipolar. Em relação à partícula com  $e = 0,2$ , o efeito do campo dipolar é elevar a coercividade em 15%.

Considerando as partículas de  $R_{eq} = 6$ , apenas as de  $e = 0,2$  têm a coercividade estável quanto ao campo dipolar. Com relação à de  $e = 1,0$ , o efeito do campo dipolar é aumentar a coercividade em 14%. No entanto, para a de  $e = 5,0$ , a coercividade é reduzida em 13%.

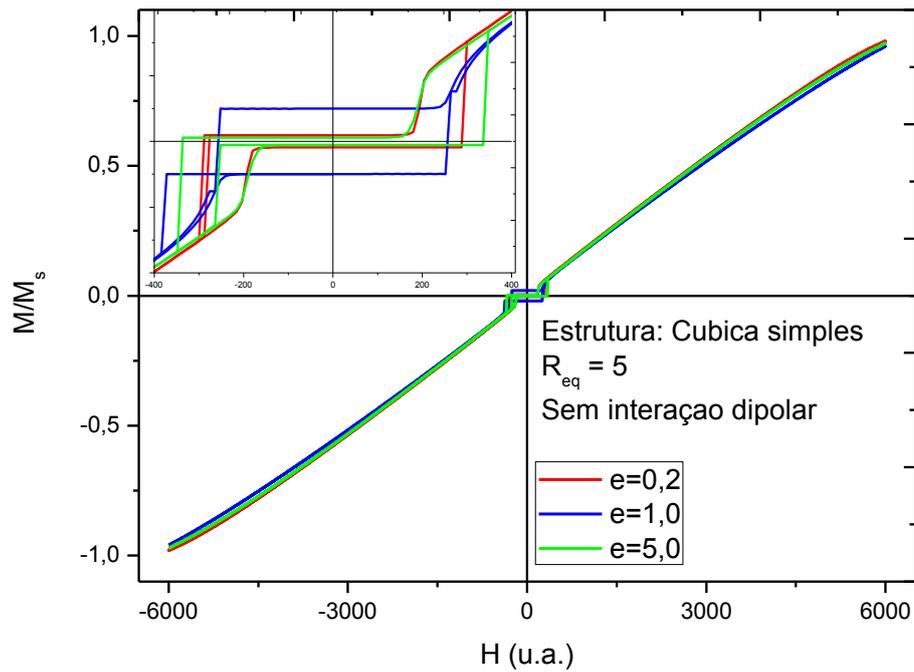
Em se tratando das partículas com  $R_{eq} = 7$ , todas são invariantes ao campo dipolar.

Para as partículas de  $R_{eq} = 8$ , as de  $e = 0,2$  e  $e = 5,0$  são estáveis em relação ao campo dipolar. Para a de  $e = 1,0$ , o aumento na coercividade é 12%.

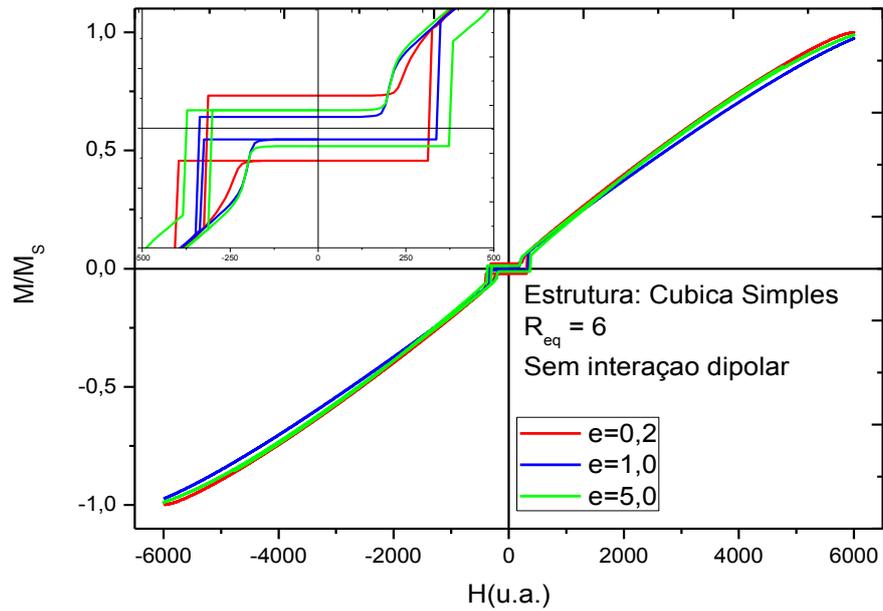
Em relação às partículas de  $R_{eq} = 9$ , as de  $e = 0,2$  e  $e = 5,0$  são invariantes ao campo dipolar. Considerando a de  $e = 1,0$ , a elevação na coercividade é 14%.

Para as partículas de raio 10 com  $e = 0,2$  e  $e = 5,0$  a coercividade é estável quanto ao campo dipolar. Considerando  $e = 1,0$ , o efeito é um aumento de 14%.

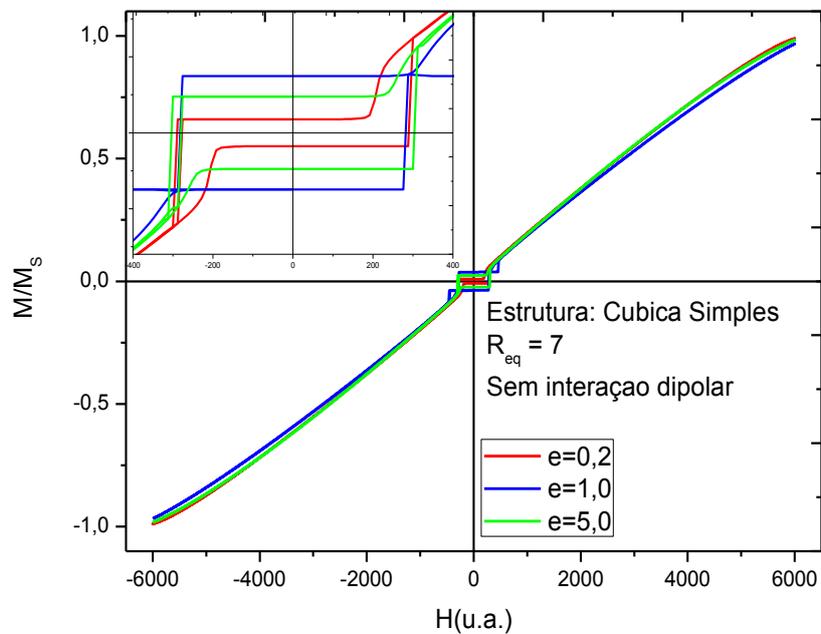
Os gráficos das curvas da magnetização em função do campo aplicado seguem abaixo:



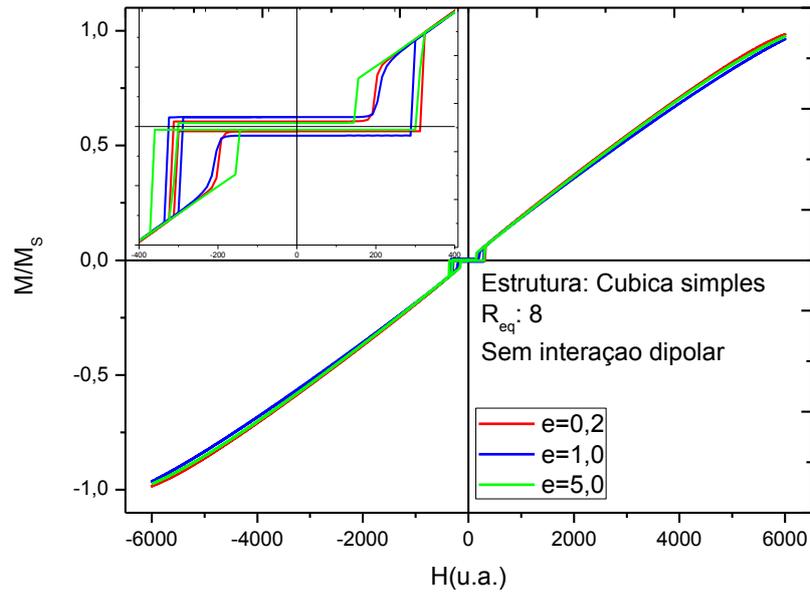
**Figura 23:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 5, sem interação dipolar.



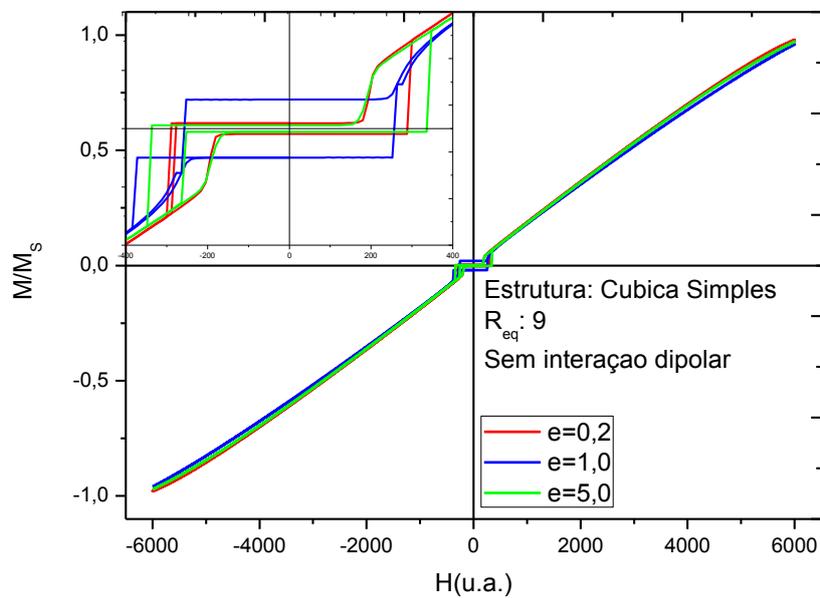
**Figura 24:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 6, sem interação dipolar.



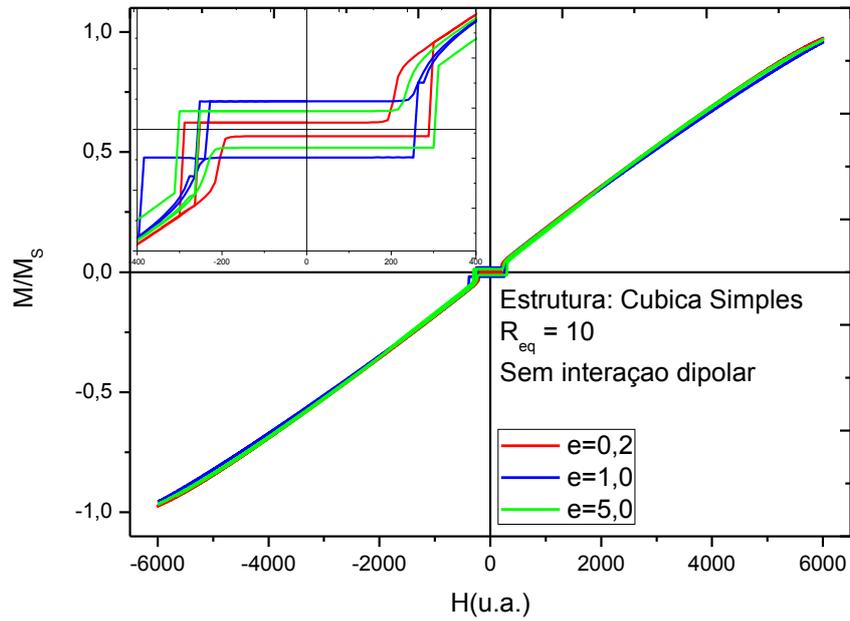
**Figura 25:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 7, sem interação dipolar.



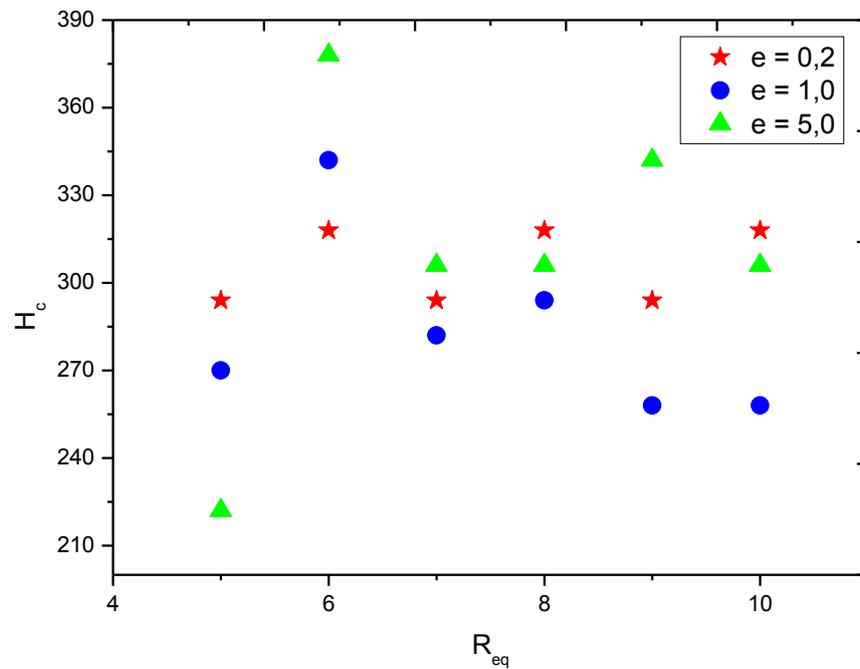
**Figura 26:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 8, sem interação dipolar.



**Figura 27:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 9, sem interação dipolar.



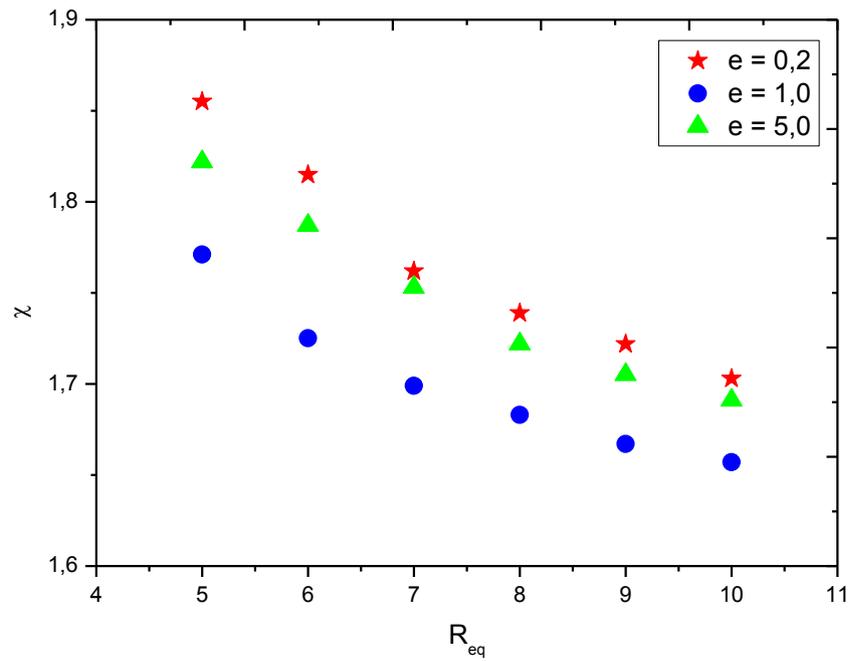
**Figura 28:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 10, sem interação dipolar



**Figura 29:** Gráfico da coercividade de partículas com estrutura cristalina cúbica simples em função do raio, sem interação dipolar.

## Susceptibilidade

O único efeito apresentado pelo campo dipolar foi o de reduzir em 10% a susceptibilidade da partícula esférica com  $R_{eq} = 9$ .



**Figura 30:** Gráfico da susceptibilidade de partículas com estrutura cristalina cúbica simples em função do raio, sem interação dipolar.

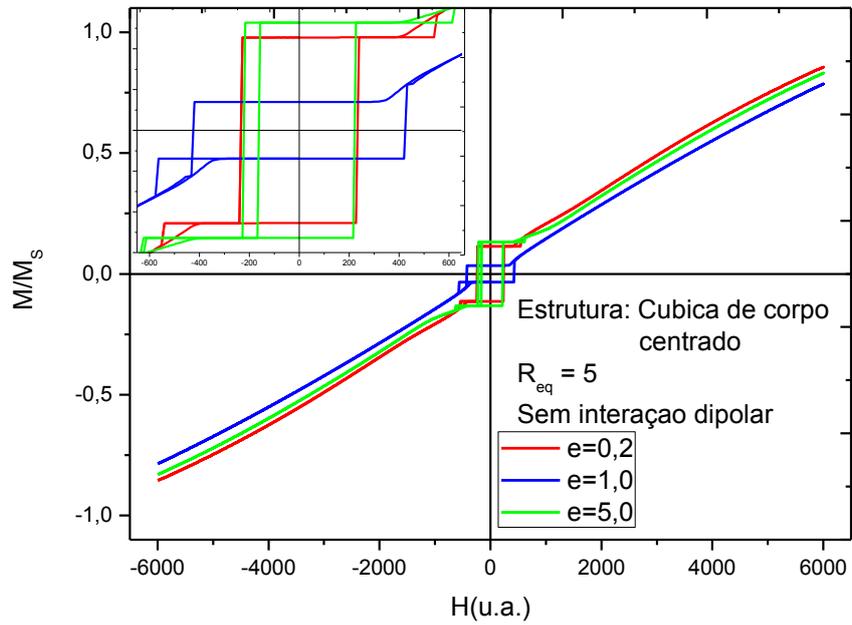
Na tabela 4, são apresentadas as propriedades das partículas estudadas de acordo com o raio e parâmetro “e” de cada partícula.

**Tabela 4:** Propriedades magnéticas de partículas com estrutura cristalina cúbica simples considerando a presença da interação dipolar.

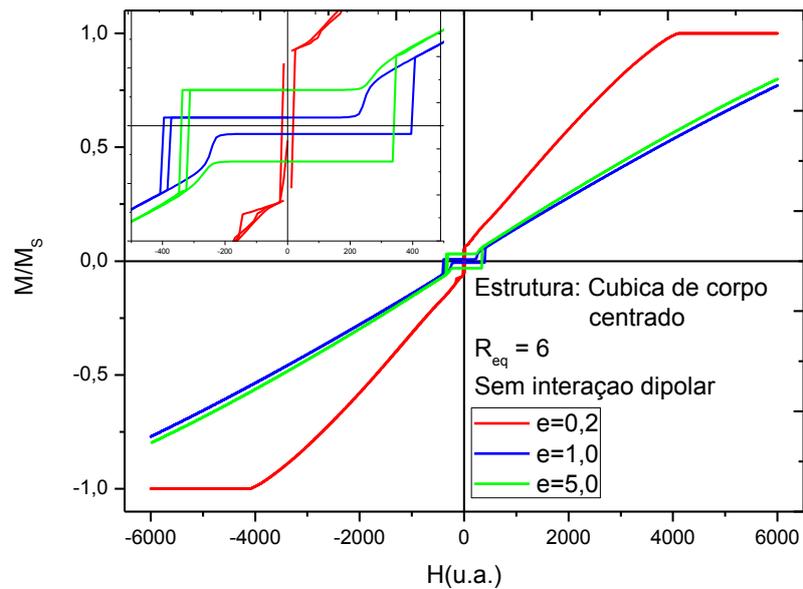
RAIO	e	$M_{R(\text{com})}$	$M_{R(\text{sem})}$	$H_{c(\text{com})}$	$H_{c(\text{sem})}$	$\chi_{(\text{com})}$ (x 10 <sup>-4</sup> )	$\chi_{(\text{sem})}$ (x 10 <sup>-4</sup> )
5	0,2	0,013	0,013	366	318	1,855	1,855
	1,0	0,033	0,033	294	270	1,771	1,771
	5,0	0,034	0,034	222	222	1,822	1,822
6	0,2	0,022	0,022	318	318	1,815	1,815
	1,0	0,008	0,008	390	342	1,725	1,725
	5,0	0,012	0,012	330	378	1,784	1,784
7	0,2	0,009	0,009	294	294	1,762	1,762
	1,0	0,037	0,037	306	282	1,699	1,699
	5,0	0,024	0,024	306	306	1,753	1,753
8	0,2	0,003	0,003	342	318	1,739	1,739
	1,0	0,006	0,006	330	294	1,683	1,683
	5,0	0,002	0,002	282	306	1,722	1,722
9	0,2	0,004	0,004	306	294	1,722	1,722
	1,0	0,020	0,020	294	258	1,498	1,667
	5,0	0,002	0,002	330	342	1,705	1,705
10	0,2	0,004	0,004	318	294	1,702	1,703
	1,0	0,018	0,018	294	258	1,657	1,657
	5,0	0,012	0,012	294	306	1,687	1,691

Partículas com estrutura cúbica de corpo centrado

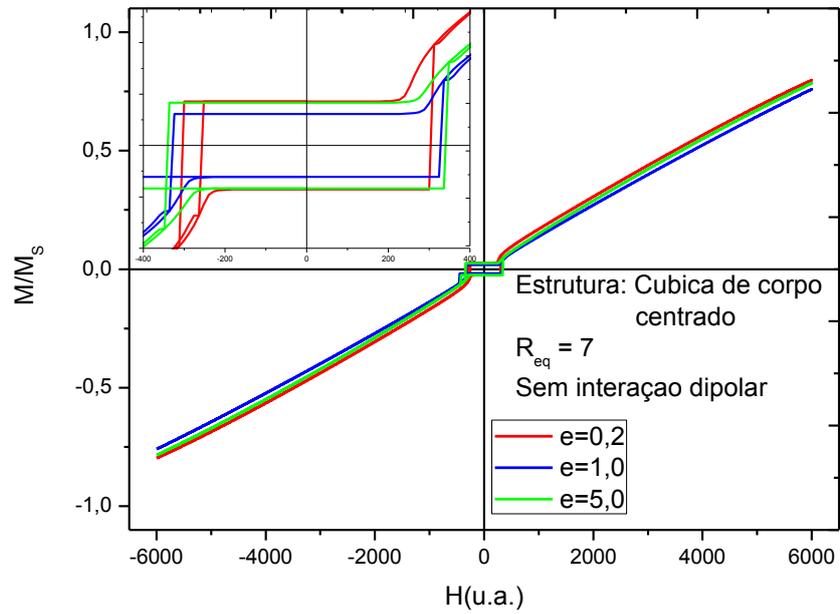
Nesta parte, seguindo a mesma regra das anteriores, a análise de cada propriedade magnética foi realizada separadamente, comparando partículas de mesmo formato e volume. A seguir são demonstrados os gráficos da magnetização em função do campo aplicado para as partículas investigadas sem os efeitos do campo dipolar.



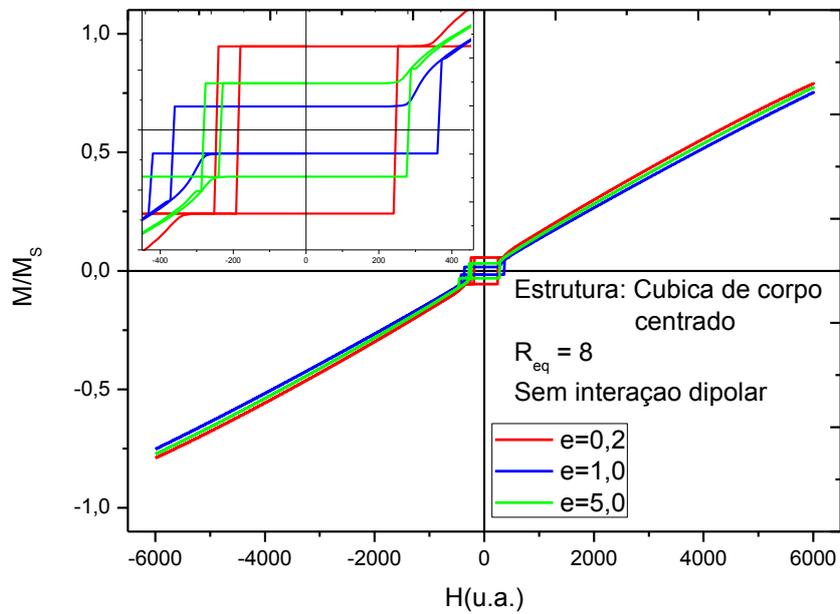
**Figura 31:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 5, sem interação dipolar.



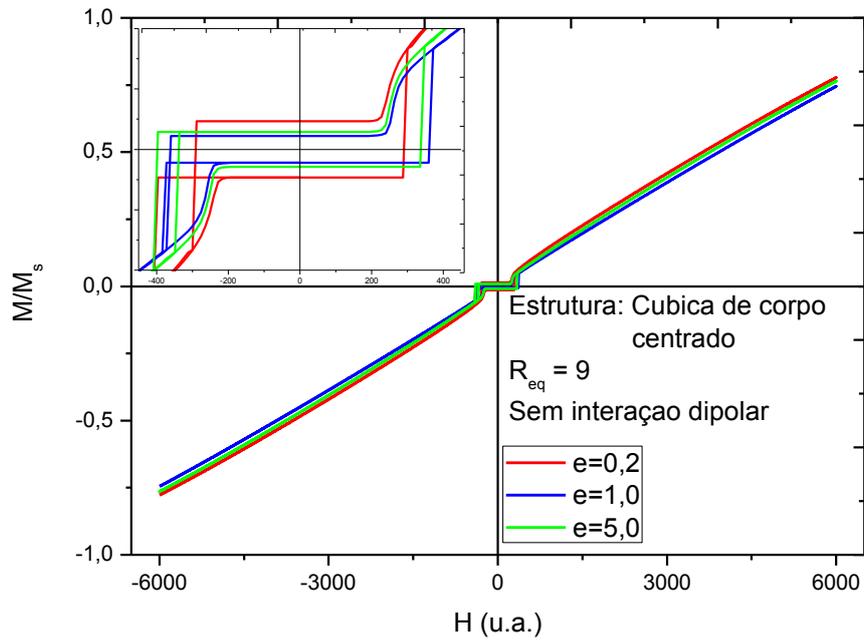
**Figura 32:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 6, sem interação dipolar.



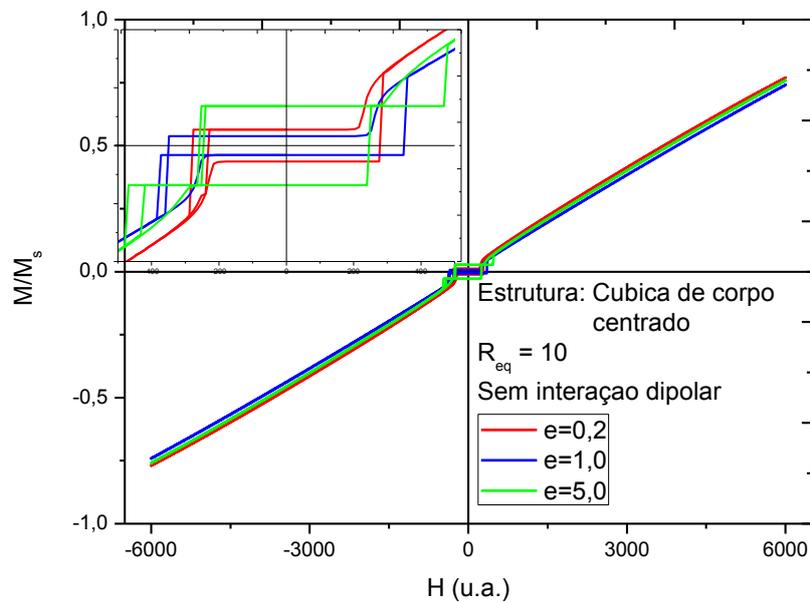
**Figura 33:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 7, sem interação dipolar.



**Figura 34:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 8, sem interação dipolar.



**Figura 35:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 9, sem interação dipolar.



**Figura 36:** Curva da magnetização em função do campo aplicado para uma partícula com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado de raio 10, sem interação dipolar.

## Magnetização remanente

Assim como ocorre para as partículas com estrutura cs, o campo dipolar não produz modificações na magnetização remanente das partículas com estrutura bcc.

## Coercividade

Para as partículas de  $R_{eq} = 5$ , o único efeito apresentado foi na de  $e = 5,0$ , que teve coercividade elevada em 11%.

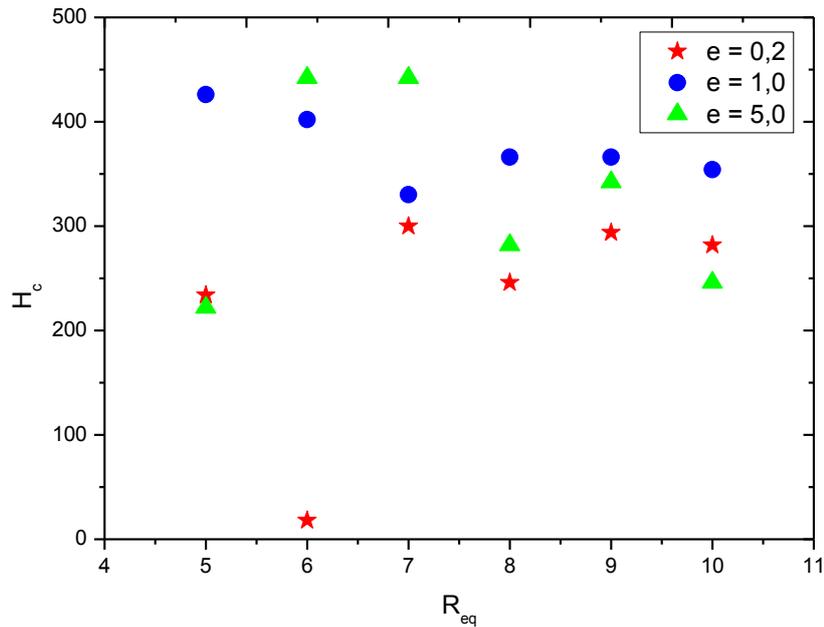
Em relação às partículas de  $R_{eq} = 6$ , a de  $e = 1,0$  não sofreu modificações com o campo dipolar. A respeito da partícula com  $e = 0,2$ , o efeito apresentado é elevar a coercividade em 1600%. Contudo para a partícula com  $e = 5,0$ , o efeito é uma redução de 50% na coercividade.

As partículas de  $R_{eq} = 7$ , a de  $e = 0,2$  não apresentou modificações com o campo dipolar. Para a partícula com  $e = 1,0$ , a coercividade é elevada em 14%. Em contrapartida, a partícula de  $e = 5,0$  tem uma redução de 28%.

Verificamos que para as partículas com  $R_{eq} = 8$ , o campo dipolar não produz nenhuma alteração na coercividade.

Quanto as partículas de  $R_{eq} = 9$ , as de  $e = 0,2$  e  $e = 1,0$  não apresentaram nenhuma modificação com o campo dipolar. Considerando a de  $e = 5,0$ , o efeito do campo dipolar é uma redução de 17% na coercividade.

Com relação às partículas com  $R_{eq} = 10$ , as de  $e = 0,2$  e  $e = 1,0$  se mostraram invariantes com o campo dipolar. Para a de  $e = 5,0$ , ocorre um aumento de 15%.



**Figura 37:** Gráfico da coercividade de partículas com estrutura cúbica de corpo centrado em função do raio, sem interação dipolar.

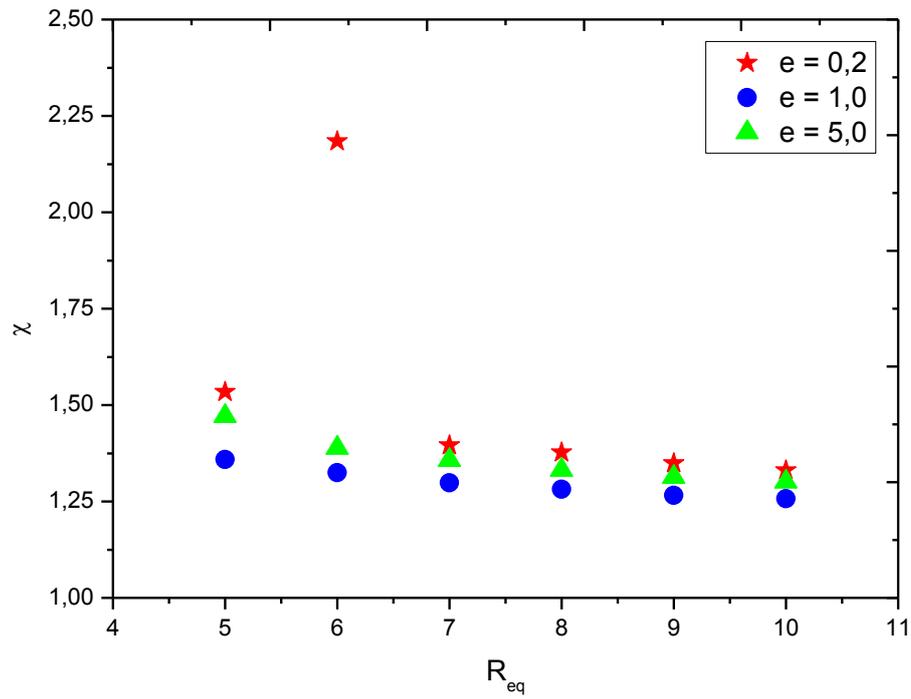
### Susceptibilidade

Para as partículas com  $R_{eq}$  5, 8 e 10, a susceptibilidade não demonstrou nenhuma dependência com o campo dipolar.

Considerando as partículas de  $R_{eq} = 6$ , as com  $e = 1,0$  e  $e = 5,0$ , também não apresentaram alteração com o campo dipolar. A respeito da com  $e = 0,2$ , é observado uma redução de 34% na susceptibilidade.

Com relação às partículas de  $R_{eq} = 7$ , as de  $e = 1,0$  e  $e = 5,0$ , não demonstraram dependência com o campo dipolar. Para a com  $e = 0,2$ , verificamos um aumento de 29% na susceptibilidade.

Quanto as partículas de  $R_{eq} = 9$ , as de  $e = 0,2$  e  $e = 1,0$  não apresentaram modificações com o campo dipolar. Considerando a partícula com  $e = 5,0$ , ocorreu uma diminuição de 11% na susceptibilidade.



**Figura 38:** Gráfico da susceptibilidade de partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado em função do raio, sem interação dipolar.

Na tabela 5, são apresentadas as propriedades das partículas estudadas de acordo com o raio e parâmetro “e” de cada partícula.

<b>Tabela 5:</b> Propriedades magnéticas de partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado considerando a presença da interação dipolar.							
RAIO	e	$M_{R(\text{com})}$	$M_{R(\text{sem})}$	$H_{c(\text{com})}$	$H_{c(\text{sem})}$	$\chi_{(\text{com})} \times 10^{-4}$	$\chi_{(\text{sem})} \times 10^{-4}$
5	0,2	0,114	0,114	234	234	1,534	1,534
	1,0	0,035	0,035	402	426	1,359	1,359
	5,0	0,132	0,132	246	222	1,471	1,471
6	0,2	0,039	0,039	306	18	1,447	2,184
	1,0	0,007	0,007	426	402	1,325	1,325
	5,0	0,031	0,031	222	442	1,389	1,389
7	0,2	0,026	0,026	294	300	1,796	1,396
	1,0	0,018	0,018	378	330	1,298	1,298
	5,0	0,025	0,025	318	442	1,357	1,357
8	0,2	0,056	0,056	258	246	1,377	1,377
	1,0	0,016	0,016	378	366	1,282	1,282
	5,0	0,031	0,031	294	282	1,332	1,332
9	0,2	0,014	0,014	318	294	1,349	1,349
	1,0	0,007	0,007	366	366	1,236	1,266
	5,0	0,009	0,009	282	342	1,173	1,313
10	0,2	0,011	0,011	294	282	1,240	1,331
	1,0	0,007	0,007	342	354	1,250	1,257
	5,0	0,027	0,027	282	246	1,242	1,301

# CAPÍTULO 5

## 5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

### 5.1 CONCLUSÕES

Nesta pesquisa foram analisadas as propriedades físicas de nanopartículas antiferromagnéticas em formato de elipsoides de revolução. As propriedades selecionadas e priorizadas no estudo foram: Magnetização remanente ( $M_R$ ), Coercividade ( $H_c$ ) e Susceptibilidade ( $\chi$ ).

Os dados e resultados obtidos possibilitaram concluir que para as partículas de raios 7, 8, 9 e 10, com formato esférico ( $e=1,0$ ) possuem os maiores valores de  $M_R$ , quando comparado com partículas de mesmo volume e diferentes formatos. Já para as partículas com  $R_{eq}$  5, o maior valor de  $M_R$  foi para a partícula com  $e = 5,0$ . Para as partículas com  $R_{eq}$  6, o maior valor de  $M_R$  ocorre para a partícula com  $e = 0,2$ .

No que diz respeito à coercividade ( $H_c$ ), concluiu-se que para as partículas de  $R_{eq}$  5, 8 e 10, as partículas com  $e = 0,2$  apresentam os maiores valores de  $H_c$ , comparando partículas de mesmo volume. Considerando as partículas de  $R_{eq}$  6, o maior valor de  $H_c$  acontece para a partícula esférica ( $e = 1,0$ ). Para as partículas de  $R_{eq}$  7 o maior valor de  $H_c$  é para a partícula com  $e = 1,0$  e  $e = 5,0$ . Por fim, para as partículas de  $R_{eq}$  9, o maior valor de  $H_c$  é para a partícula com  $e = 5,0$ .

Para a susceptibilidade ( $\chi$ ) as partículas com  $e = 0,2$  apresentaram os maiores valores de  $\chi$ , comparado com partículas de mesmo volume. Os menores valores foram observados para partículas com formato esférico (1,0).

Para as partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado comprovou-se um comportamento onde é mais fácil perceber a dependência das propriedades magnéticas com o formato da partícula. Verificou-se que para as partículas com  $R_{eq}$  5, 6, 7, 8 e 9, os maiores valores da  $M_R$  são observados para as partículas com  $e = 0,2$ , comparando partículas com mesmo volume. Já os menores valores de  $M_R$ , são para as partículas com formato esférico ( $e = 1,0$ ).

Os valores mais elevados para a coercividade ( $H_c$ ) são observados para as partículas com formato esférico (1,0), comparando partículas com mesmo volume, enquanto que os menores valores oscilaram entre partículas com  $e = 0,2$  e  $e = 5,0$ .

No que se refere a susceptibilidade ( $\chi$ ), os maiores valores foram observados para as partículas com  $e = 0,2$ , exceto para as partículas com raio 10, onde o maior valor observado foi para a partícula com  $e = 5,0$ . Já os menores valores oscilaram entre as partículas com  $e = 1,0$  e  $e = 5,0$ .

Quanto à dependência das propriedades magnéticas com o tipo de estrutura cristalina constatou-se que de um modo geral, a magnetização remanente ( $M_R$ ) de partículas com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado apresentam valores bem mais elevados em relação a partículas com estrutura cúbica simples. Já a coercividade ( $H_c$ ) apresentou um comportamento mais aleatório, onde os valores são bem próximos comparando partículas com mesmo volume e formato, variando apenas o tipo de estrutura cristalina. Para a susceptibilidade ( $\chi$ ), concluiu-se que, de modo geral, partículas com estrutura cristalina cúbica simples apresentam valores mais elevados para a susceptibilidade.

Quanto à dependência das partículas com a interação dipolar, comprovou-se que para as partículas com estrutura cúbica simples a magnetização remanente não apresenta nenhuma dependência com a interação dipolar. Já coercividade demonstrou um comportamento onde, para partículas com  $e = 0,2$  e partículas esféricas (1,0), o efeito da retirada da interação dipolar, fizeram com que o valor da coercividade ( $H_c$ ) fosse reduzido ou em alguns casos permanecesse estáveis.

No que se refere à susceptibilidade, apenas duas partículas sofreram influência da interação dipolar, a partícula esférica de  $R_{eq}$  9, e a partícula de  $R_{eq}$  10 e parâmetro  $e = 0,2$ , mostrando que a interação dipolar pouco influenciou na susceptibilidade.

Em relação à dependência das partículas com estrutura cúbica de corpo centrado com a interação dipolar, constatou-se que a magnetização remanente permaneceu inalterada. Quanto à coercividade, quase todas as partículas apresentaram dependência com a interação dipolar, no entanto, essa dependência ocorreu de forma aleatória. Diferentemente do que ocorreu para partículas com estrutura cristalina cúbica simples, a susceptibilidade das partículas com estrutura cúbica de corpo centrado apresentou maior dependência com a interação dipolar, as partículas com ( $R_{eq}$  6,  $e = 0,2$ ), ( $R_{eq}$  9,  $e = 1,0$  e  $e = 5,0$ ) e todas as

partículas com  $R_{eq}$  10, apresentaram um aumento na susceptibilidade quando a interação dipolar foi retirada.

Dessa maneira, comprovou-se que as propriedades magnéticas de nanopartículas antiferromagnéticas dependem do tipo de estrutura cristalina, forma e volume da partícula. Ficou demonstrado que algumas propriedades magnéticas, como coercividade e susceptibilidade podem sofrer influência da interação dipolar. Diante de tais conclusões, os resultados desta pesquisa sinalizam possibilidades para os experimentais efetivamente tentarem controlar as propriedades físicas de nanopartículas utilizando como parâmetros, forma, volume e tipo de estrutura cristalina.

## **5.2 PERSPECTIVAS FUTURAS**

A análise do comportamento dinâmico, bem como, o efeito produzido pelo aumento da temperatura.

## BIBLIOGRAFIA

1. **Getzlaff, Mathias.** *Fundamentals of Magnetism*. New York : Springer, 2008.
2. *As Propriedades Magnéticas da Matéria: um Primeiro Contato.* **Ribeiro, Giuliano Augustus Pavan.** São Carlos, SP : s.n., Setembro 2000, Revista Brasileira de Ensino de Física, Vol. 22.
3. *Magnetic Nanoparticles: Synthesis, Protection, Functionalization, and Application.* **An - Hui Lu, E. L. Salabas, Ferdi Schuth.** Weinheim : Wiley-VCH, 2007, Angewandte Chemie.
4. *Magnetismo na Terra Brasilis.* **Rezende, Sergio Machado.** Recife : s.n., setembro 2000, Revista Brasileira de Ensino de Física, Vol. 22.
5. *Environmental magnetism. Principles and applications of enviromagnetics.* **EVANS, M. E. and HELLER, F.** San Diego : John Wiley & Sons, Ltd, 2004, Vol. 19, pp. 621 - 622.
6. **Kodama, R.H.** Magnetic nanoparticles. *Journal of magnetism and magnetic materials.* 1999, Vol. 200, pp. 359-372.
7. **KITTEL, CHARLES.** *INTRODUÇÃO À FÍSICA DO ESTADO SÓLIDO.* QUINTA EDIÇÃO. RIO DE JANEIRO : GUANABARA DOIS S. A., 1978. p. 261.
8. **GUIMARÃES, ALBERTO PASSOS.** *MAGNETISMO E RESSONÂNCIA MAGNÉTICA EM SÓLIDOS.* SÃO PAULO : EDUSP, 2009. p. 36.
9. *Size Dependence of Structures and Properties of Magnetic Materials.* **Jiang, Q. and Lang, X. Y.** Changchun, China : Bentham Science Publishers, 2007, The Open Nanoscience Journal, Vol. 1, pp. 32-59.
10. *MAGNETIC NANOPARTICLES.* **Kodama, R.H.** WASHINGTON : ELSEVIER, 1999, JOURNAL OF MAGNETISM AND MAGNETIC MATERIAIS.
11. **CULLITY, B. D. and GRAHAM, C. D.** *INTRODUCTION TO MAGNETIC MATERIALS.* 2ª. NEW JERSEY : JOHN WLEY & SONS, 2009. p. 360.
12. *Atomic-scale magnetic modeling of oxide nanoparticles.* **Kodama, R. H. and Berkowitz, A. E.** San Diego, California : s.n., 1998, PHYSICAL REVIEW B, Vol. 59, pp. 6321 - 6336.
13. *Surface Spin Disorder in NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> Nanoparticles.* **Kodama, R. H. and Berkowitz, A. E.** San Diego, California : The American Physical Society, July 8, 1996, Physical Review Letters, Vol. 77, pp. 394 - 397.
14. *Finite Size Effects in Antiferromagnetic NiO Nanoparticles.* **Kodama, R. H., Makhouf, Salah A. and Berkowitz, A. E.** San Diego, California : The American Physical Society, August 1997, PHYSICAL REVIEW LETTERS, Vol. 79, pp. 1393 - 1396. 7.
15. *Size effect on the crystal phase of cobalt fine particles.* **Osamu Kitakami, Hisateru Sato, Yutaka Shimada.** s.l. : The American Physical Society, 1997, PHYSICAL REVIEW B, Vol. 56, pp. 13849 - 13854.

16. *Magnetism from the Atom to the Bulk in Iron, Cobalt, and Nickel Clusters*. **Isabelle M. L. Billas, A. Chitelain, Walt A. de Heer**. 1994, SCIENCE, Vol. 265, pp. 1682 - 1684.
17. *Magnetism of Fe, Co and Ni clusters in molecular beams*. **Isabelle M.L. Billas, A. Chhtelain, Walt A. de Heer**. s.l. : Elsevier, 1996, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, pp. 64 - 84.
18. *Large Coercivity in Antiferromagnetic Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Mn<sub>5</sub>O<sub>8</sub> and MnO/Mn Nanoparticles*. **Zhang, Z. D.** China : World Scientific Publishing Company, 2009, International Journal of Modern Physics B, Vol. 23, pp. 3895 - 3901.
19. *SIZE-DEPENDENT MAGNETIZATION FLUCTUATIONS IN NiO NANOPARTICLES*. **Mishra, Sunil K. and Subrahmanyam, V.** 18, Kanpur, India : World Scientific Publishing Company, 2011, International Journal of Modern Physics B, Vol. 25, pp. 2507 – 2524.
20. *Surface spin disorder in ferrite*. **Kodama, R. H., et al., et al.** San Diego, California : American Institute of Physics, 1997, Journal of Applied Physics, pp. 5552 - 5557.
21. **Machado, Kleber Daum**. *Teoria do Eletromagnetismo*. Ponta Grossa : UEPG, 2002. pp. 413 - 515. Vol. 2.
22. **Ashcroft, Neil W. and Mermin, N. David**. *FÍSICA DO ESTADO SÓLIDO*. SÃO PAULO : CENGAGE LEARNING, 2011. pp. 674 - 681.
23. **Blundell, Stephen**. *Magnetism in Condensed Matter*. New York : Oxford University Press, 2001. pp. 74 - 76.
24. **SALINAS, SÍLVIO**. *INTRODUÇÃO À FÍSICA ESTATÍSTICA*. 2ª. SÃO PAULO : EDUSP, 2005. pp. 275 - 278.