



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

GRISELDA PAOLA FUENTES MORALES

**ESTUDO POR SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA DAS INTERAÇÕES DIPO-
LARES EM ARRANJOS DE NANOFIOS POLICRISTALINOS DE NÍQUEL**

Recife
2015

GRISELDA PAOLA FUENTES MORALES

**ESTUDO POR SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA DAS INTERAÇÕES
DIPOLARES EM ARRANJOS DE NANOFIOS POLICRISTALINOS DE NÍQUEL**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestra em Física.

Orientador:
Prof. Dr. Eduardo Padrón Hernández
Universidade Federal de Pernambuco

Recife
2015

Catálogo na fonte
Bibliotecária Joana D'Arc Leão Salvador CRB4-532

F954e Fuentes Morales, Griselda Paola.
Estudo por simulação micromagnética das interações dipolares em arranjos de nanofios policristalinos de níquel / Griselda Paola Fuentes Morales. – Recife: O Autor, 2015.
107 f.: fig., tab.

Orientador: Eduardo Padrón Hernández.
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Física, 2015.
Inclui referências e apêndices.

1. Materiais nanoestruturados. 2. Nanofios. 3. Simulação micromagnética. I. Padrón Hernández, Eduardo (Orientador). II. Título.

620.5 CDD (22. ed.) UFPE-FQ 2015-34

GRISELDA PAOLA FUENTES MORALES

**ESTUDO POR SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA DAS INTERAÇÕES
DIPOLARES EM ARRANJOS DE NANOFIOS POLICRISTALINOS DE NÍQUEL**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestra em Física.

Aprovada em: 31/07/2015.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Eduardo Padrón Hernández
Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Renê Rodrigues Montenegro Filho
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. João Maria Soares
Examinador Externo
Universidade do Estado do Rio Grande do Norte

AGRADECIMENTOS

Agradecimentos especiais são direcionados aos projetos OOMMF do *ITL/NIST*¹ e Nmag do *nsim*² que foi o software utilizado nesta dissertação. A agência CAPES pelo apoio financeiro e as agências CNPq, FINEP e FACEPE que possibilitaram a manutenção dos laboratórios e também apoiam ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFPE.

¹<http://math.nist.gov/oommf/>

²<http://nmag.soton.ac.uk/nmag/>

Resumo

Neste trabalho utilizamos a simulação micromagnética para o estudo dos efeitos de interações dipolares em arranjos de nanofios de níquel. Especificamente, utilizamos o Nmag como ferramenta de cálculo, que é baseado no método dos elementos finitos para resolver as equações micromagnéticas. Para o estudo, arranjos hexagonais de fios policristalinos foram construídos à base de cadeias de elipsoides. As dimensões de cada elipsoide foram fixadas em 30 nm de semieixo transversal à cadeia e 60 nm ao longo do eixo da cadeia. Cada amostra está formada por um total de 10×10 cadeias de estes elipsoides e formam uma matriz com ordenamento hexagonal. O tamanho da matriz foi otimizado ao tempo de cálculo. Num primeiro estudo analisamos os efeitos do comprimento dos fios (cadeias de elipsoides). Para definir o tamanho dos fios tomamos cadeias compostas por 1 até 4 elipsoides para um comprimento máximo de 240 nm. Um outro estudo compreende os efeitos da distância entre os fios. Para isso estudamos arranjos cuja distância de eixo a eixo da cadeia adota valores de 70 nm, 65 nm, 60 nm, 55 nm, 50 nm, 45 nm, 40 nm e 35 nm. Todo o estudo foi feito sobre a base do comportamento da curva de histerese em função do ângulo do campo aplicado. Depois de calculadas as curvas foram extraídos os valores do campo coercitivo e a remanência, com a finalidade de verificar a sua dependência angular. Entre os resultados mais significativos, temos a variação acentuada da derivado das curvas estudadas. O motivo principal é o aumento da energia dipolar à medida que número de elipsoides aumenta na cadeia. A remanência também apresenta mudanças drásticas que explicam o porque das tantas divergências reportadas na literatura, para fios que supostamente são longos. No estudo, nos preocupamos inicialmente na escolha do método de cálculo e também trabalhamos na otimização do tamanho de célula na discretização dos fios. Para isso analisamos os cálculos utilizando o OOMMF (método de diferenças finitas) que permitem o cálculo para células de 4 nm e 2 nm. O cálculo com 2 nm resultou ser bem demorado, motivo pelo qual escolhemos a de 4 nm. Logo depois, para comparar com o método de elementos finitos, utilizamos Nmag. Com este simulador fizemos os cálculos para tamanho de célula diferentes a fim de otimizar o tempo. Os resultados com OOMMF e Nmag foram comparados e depois de algumas análises observamos que Nmag seria a melhor escolha. Sendo assim a maior parte dos resultados apresentados aqui são obtidos por elementos finitos.

Palavras-chave: Nanofios. Simulação Micromagnética. Nmag. OOMMF.

Abstract

In this work we used the micromagnetic simulation to study the effects of dipolar interactions in nickel nanowires arrays. Specifically, we use the Nmag as calculation tool, which is based on the finite element method to solve the micromagnetics equations. For this study, hexagonal arrays of polycrystalline wires were constructed by ellipsoids chains. The dimensions of each ellipsoid was fixed with transversal minor axis of 30 nm and major axis along the chain of 60 nm. Each sample is formed by a total of 10×10 chains of these ellipsoids and form a hexagonal array. The array size is optimized to the calculations time. We change wire lengths and study their effects (ellipsoids chains). To set the size of the wire, chains formed by 1 to 4 ellipsoids were used to a maximum length of 240 nm. We analyzed the effects of distance between wires. For this, we make arrangements that change the axis to axis distance of the chain takings values of 70 nm, 65 nm, 60 nm, 55 nm, 50 nm, 45 nm, 40 nm and 35 nm. The results were analyzed compared with the hysteresis curve behavior as a function of the applied field angle. Then we used this curves to obtain the coercive field and remanence, in order to verify their angular dependence. Among the most significant results, we have the sharp variation of the derivative of the studied curves. The main reason is the increase of the dipolar energy as minimal ellipsoid increases in the chain. The remanence also features dramatic changes that explain why so many of the discrepancies reported in the literature for wires that are supposed to be long. We carefully choose the method of calculation and work on optimizing the size of discretization of the cell. For this we analysed the calculations using the OOMMF (finite difference method) that allow the calculation for cells of 2 and 4 nm. The calculation with 2 nm is time consuming, that is why we chose to use 4 nm cell. Then, to compare with finite elements method, we use Nmag. With this simulation we made the calculations for different cell sizes in order to optimize the time. The results with OOMMF and Nmag were compared and after some analysis we observe that Nmag would be the best choice. Thus the major part of the results presented are obtained by finite elements.

Keywords: Nanowires. Micromagnetic Simulation. Nmag. OOMMF.

Lista de Figuras

1.1	Nanofios de Níquel, a) imagem obtida por microscopia eletrônica de transmissão de uma membrana porosa de alumina, b) representação esquemática da alumina anódica porosa vista em seção transversal destacando características importantes. [14, 15]	18
1.2	Nanofios obtidos nosso laboratório [34], em outros laboratórios [35], [28].	19
1.3	O gráfico à direita foi tirada do artigo [6], gráfico esquerdo foi obtido nosso laboratório [47].	21
1.4	Os gráficos à direita foram tiradas do artigo [28]	21
1.5	O gráfico à direita foi tirada do artigo [28], gráfico esquerdo foi obtido nosso laboratório [47]	21
2.1	Laços de histerese: (a) As quantidades extrínsecas básicas derivadas de um laço de M-H (linha contínua) o laço B-H correspondente (linha tracejada), (b) laços de histerese de materiais duros, semiduros e moles, (c) laços paralelos medida e perpendicular a um eixo c fácil [48].	22
2.2	Esboço do processo, utilizado para limitar a derivação do termo de fronteira na integral do potencial escalar. A descontinuidade da magnetização do outro lado da fronteira $\partial\Omega$ é suavizada para fora em uma região Ω_d que circunda a amostra.	27
2.3	A evolução no tempo de um momento magnético como descrito pela equação LLG. O movimento pode ser dividido em uma precessão e uma contribuição de amortecimento. (a) Movimento de precessão em torno do campo efetivo. (b) Movimento amortecido. (c) A magnetização relaxa em direção ao campo efetivo. Resultando movimento incluindo precessão e amortecimento.	34
3.1	Resultante de malha regular de cuboide usando o método FD. O valor da função espacialmente resolvido é assumida para ser localizada no centro de cada cuboide. [72]	39
3.2	Computação numérica da integral da equação Landau-Lifshitz. [76]	41

3.3	Kuhn triangulação de um cubo em seis elementos finitos tetraédricos (vista explodida) [77].	41
3.4	Amostra do arranjo de 10×10 nanofios de níquel formadas por cadeias de elipsoides. a) Mostra o arranjo a simular onde se aplica um campo externo. b) Mostra que consiste um arranjo hexagonal. c) Cada cadeia esta formada por elipsoides de eixo menor 30 nm e eixo maior 60 nm e distância entre elas de D.	46
3.5	Amostra do arranjo de 10×10 nanofios de níquel com um comprimento de 2 elipsoides, discretizado em cuboides de ≈ 4 nm para OOMMF.	46
3.6	Amostra do arranjo de 10×10 nanofios de níquel com um comprimento de 2 elipsoides, discretizado em tetraedros com o programa Gmsh [85] para simular em Nmag.	47
4.1	A) Microscopia eletrônica de transmissão mostrando a morfologia da amostra de grãos em fios de níquel. [34]. B) Mostra o arranjo que será utilizado no simulação e direção do campo magnético H e o ângulo θ_H	48
4.2	Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha 2 nm para o programa OOMMF.	50
4.3	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.2 (para o malha de 2 nm no programa de OOMMF).	51
4.4	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios, A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.2 (para o malha de 2 nm no programa de OOMMF).	51
4.5	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura4.6 (para o malha de 4 nm no programa de OOMMF).	52

4.6	Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha 4 nm para o programa OOMMF.	53
4.7	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios, A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.6 (para o malha de 4 nm no programa de OOMMF).	54
4.8	Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha 4 nm para o programa OOMMF.	55
4.9	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura4.8 (para o malha de 4 nm no programa de OOMMF).	56
4.10	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios, A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.8 (para o malha de 4 nm no programa de OOMMF).	56
4.11	Comparação das curvas de coercitividade H_C em função do ângulo do campo aplicado θ_H de 1 elipsoide com malha 2 nm e 4 nm e 2 elipsoides com malha de 4 nm no programa OOMMF.	57
4.12	Comparação das curvas da razão M_R/M_S em função do ângulo do campo aplicado θ_H para um elipsoide com malha 2 nm e 4 nm e dois elipsoides com malha de 4 nm.	57
4.13	Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.	59

4.14	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.13 ,no programa de Nmag.	60
4.15	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.13, no programa de Nmag.	60
4.16	Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.	61
4.17	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.16, no programa de Nmag.	62
4.18	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.16, (no programa Nmag).	63
4.19	Comparações das curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm e 120 nm (1 elipsoide e 2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios, A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese que foram feitas com o programa OOMMF e o programa de Nmag.	63
4.20	Comparações das curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm e 120 nm (1 elipsoide e 2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios, A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese que foram feitas com o programa OOMMF e o programa de Nmag.	64
4.21	Curvas experimentais de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H dos nanofios de níquel obtidos de nosso laboratório [47].	65

4.22	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 180 nm (3 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.23 (no programa de Nmag).	66
4.23	Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 180 nm (3 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.	67
4.24	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 180 nm (3 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.23 (no programa Nmag).	68
4.25	Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 240 nm (4 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.	69
4.26	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 240 nm (4 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.25 (no programa de Nmag).	70
4.27	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 240 nm (4 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.25 (no programa Nmag).	70
4.28	Comparações das curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm, 120 nm, 180 nm e 240 nm (de 1 até 4 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios.	71
4.29	Comparações das curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm, 120 nm, 180 nm e 240 nm (de 1 até 4 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios.	71
4.30	Curvas experimentais da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H dos nanofios de níquel obtidos de nosso laboratório [47].	72

4.31	Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 65 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.	73
4.32	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 65 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.31.	74
4.33	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 65 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.31 (feitas por o programa Nmag).	74
4.34	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 60 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese (feitas por o programa de Nmag).	75
4.35	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoides) com uma separação de 60 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese (feitas por o programa Nmag).	75
4.36	Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 55 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.	76
4.37	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 55 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.36 (feitas por o programa de Nmag).	77
4.38	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoides) com uma separação de 55 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.36 (feitas por o programa Nmag).	77

4.39	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 50 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese.	78
4.40	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 50 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese.	78
4.41	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 45 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.43 (feito por o programa de Nmag).	79
4.42	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 45 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.43 (feito por o programa Nmag).	79
4.43	Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 45 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.	80
4.44	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 40 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese (no programa de Nmag).	81
4.45	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 40 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese (no programa Nmag).	82
4.46	Curvas experimentais da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H dos nanofios de Ni e Fe obtidos de nosso laboratório [47].	82
4.47	Comparação das curvas de coercitividade H_C em função do ângulo θ_H do arranjo de 10×10 nanofios de comprimento $L = 60$ nm (1 elipsoide) onde se variam as separação dos nanofios desde $D = 70$ nm até $D = 35$ nm.	83

4.48	Curva de coercitividade H_C no ângulo $\theta_H = 0^\circ$ em função da separação dos nanofios desde $D = 70$ nm até $D = 35$ nm do arranjo de 10×10 nanofios de comprimento $L = 60$ nm (1 elipsoide).	83
4.49	Comparação das curvas da razão M_R/M_S em função do ângulo θ_H do arranjo de 10×10 nanofios de comprimento $L = 60$ nm (1 elipsoide) onde se variam as separação dos nanofios desde $D = 70$ nm até $D = 35$ nm.	84
4.50	Curva de da razão M_R/M_S no ângulo $\theta_H = 0^\circ$ em função da separação dos nanofios desde $D = 70$ nm até $D = 35$ nm do arranjo de 10×10 nanofios de comprimento $L = 60$ nm (1 elipsoide).	84
4.51	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 55 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese (no programa de Nmag).	85
4.52	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 55 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura (do programa Nmag).	85
4.53	Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 60 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.	86
4.54	Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoide) com uma separação de 65 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese (do programa de Nmag).	87
4.55	Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 65 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese (do programa Nmag).	87
4.56	Comparação das curvas de coercitividade H_C em função do ângulo θ_H do arranjo de 10×10 nanofios de comprimento $L = 120$ nm (2 elipsoides) onde se variam as separação dos nanofios desde $D = 70$ nm até $D = 35$ nm.	88

LISTA DE FIGURAS

- 4.57 Comparação das curvas da razão M_R/M_S em função do ângulo θ_H do arranjo de 10×10 nanofios de comprimento $L = 120$ nm (2 elipsoides) onde se variam as separação dos nanofios desde $D = 70$ nm até $D = 35$ nm. 88
- B.1 Vista do programa GMSH que gera a malha da amostra a simular em Nmag. . . 106
- B.2 Mostra da malha de um elipsoide feita com o programa GMSH. 106

Lista de Tabelas

2.1	Modelos para ferromagnéticos [50].	23
3.1	Lista de simuladores micromagnéticos de licenças livre existentes.	38
4.1	Propriedades intrínsecas dos materiais e parâmetros da simulação.	49
B.1	Informação da malha do arranjo de 10×10 de 1 elipsoide	107
B.2	Informação de malha em Nmag de 2 elipsoides	107

Sumário

1	Introdução	18
2	Fundamentação Teórica	22
2.1	A curva de histerese magnética	22
2.2	Energias Magnéticas em Arranjos de Nanofios	24
2.3	Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert	29
2.4	Limites do modelo micromagnético	34
3	Micromagnetismo Numérico	37
3.1	Resolvendo as equações micromagnéticas	37
3.2	Método de diferenças finitas e OOMMF	37
3.3	Método dos elementos finitos e Nmag	41
3.4	Discretização de arranjos de nanofios de níquel	45
4	Simulação de nanofios de Níquel	48
4.1	Amostra de Níquel (por diferenças finitas) OOMMF	49
4.2	Comparação dos resultados em nanofios de Níquel resolvidos por FD (OOMMF) e FE (Nmag)	58
4.3	Nanofios de Níquel com o método do elementos finitos Nmag	65
4.3.1	Variação do comprimento dos nanofios	66
4.3.2	Variação da distância entre os nanofios	72
	Conclusões e Perspectivas	90
	Referências	91
	Apêndices	99
A	Código OOMMF (FD)	100
A.1	script	100
B	Código Nmag (FE)	103
B.1	script	103
B.2	Geração da amostra para a malha	104

Nos últimos anos, há um crescente interesse no desenvolvimento de nanofios, filmes multicamadas finas magnéticas e outras nanoestruturas com propriedades controláveis [1–7]. Os nanofios magnéticos são cientificamente interessantes e tem aplicações potenciais em muitas áreas de nanotecnologia avançada, dispositivos magnéticos e para aplicações de micro-ondas.

Muitos são os trabalhos na literatura onde se estudam as propriedades magnéticas de arranjos de nanofios. Em geral, encontramos trabalhos experimentais e teóricos.

A eletrodeposição de materiais magnéticos em alumina poroso (figura 1.1) pode ser utilizada para produzir arranjos regulares do nanofios [8–11]. Outras maneiras de fabricar nanofios cilíndricos incluem a deposição em peneiras moleculares, onde pode-se produzir nanofios de Fe, Co e Ni com diâmetros de 4 a 200 nm e comprimento de até 1 μm [12–15]. Normalmente os nanofios formam matrizes hexagonais com espaçamentos de centro a centro da ordem de 50 nm [16,17]. Os materiais resultantes são de interesse para mídia de gravação magnética [18–21], para aplicações ópticas e micro-ondas [22] e como dispositivos eletroluminescente.

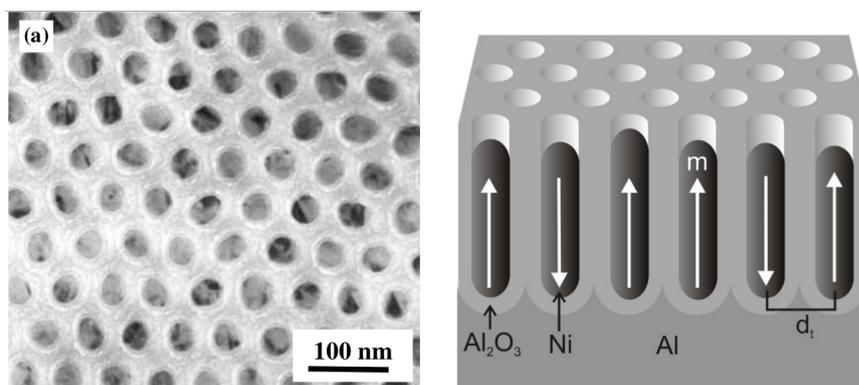


Figura 1.1: Nanofios de Níquel, a) imagem obtida por microscopia eletrônica de transmissão de uma membrana porosa de alumina, b) representação esquemática da alumina anódica porosa vista em seção transversal destacando características importantes. [14, 15]

Grande parte dos trabalhos iniciais de nanofios magnéticos em matrizes foram focados em questões, como o eixo fácil e as condições de preparação, a anisotropia de forma, anisotropia magnetocristalina [23–30]. Mais recentemente, a atenção se voltou para a compreensão de processos de magnetização [31–33]. O nanofio magnético ideal é um sistema unidimensional, com

forma cilíndrica. O nanofio de Ni é magnetizado espontaneamente ao longo do eixo do cilindro. As suas propriedades magnéticas são dominadas por anisotropia de forma e as várias contribuições atuam como perturbações. O efeito de anisotrópica magnetocristalina, desencadeada pelo campo elétrico cristalino ou as tensões induzidas em nanofios de Ni, também pode ter um papel fundamental.

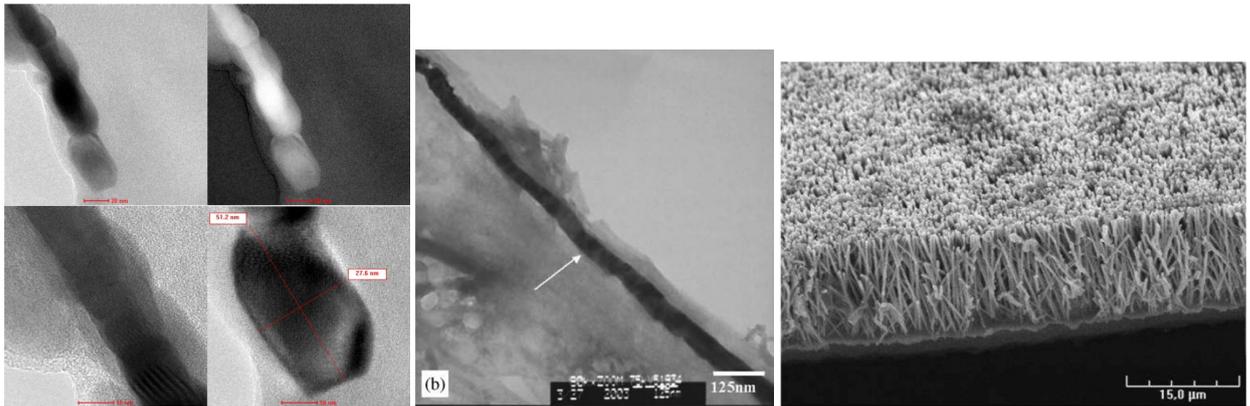


Figura 1.2: Nanofios obtidos nosso laboratório [34], em outros laboratórios [35], [28].

Desde a década de 1950 o estudo de fios magnéticos longos vem chamando a atenção da comunidade científica. Para determinar os modos de reversão da magnetização nestes sistemas têm sido utilizadas tradicionalmente, as equações de Brown [36], o método variacional [37] e outras aproximações.

Uma das tentativas de destaque para explicar o comportamento de arranjos de nanofios ferromagnéticos é a apresentada nos trabalhos de Skomski e colaboradores [38–40]. Em seus trabalhos se defende a ideia de inversão da magnetização a partir da existência de modos localizados. Esta ideia se sustenta a existência de irregularidades na estrutura real dos fios. A ideia de modos localizados toma força quando analisados os dados de viscosidade magnética que revelam que o volume de ativação é muito menor do que o volume de um fio, contradizendo assim a consistência do modo coerente e outros modos não localizados. A tentativa de Skomski et al [38, 39] até o presente é qualitativa e para justificar quantitativamente são utilizados cálculos micromagnéticos através de métodos computacionais, limitando-se a poucos fios e, portanto deixando dúvidas do comportamento sugerido em arranjos.

G. C. Han et al [41] com o estudo do comportamento do campo coercitivo e da quadratura em função do ângulo do campo externo aplicado defenderam a ideia de que a reversão ocorre por meio de modo curling, propondo para o campo de anisotropia, ter seguinte expressão:

$$H_A = 2\pi M_S - 6.3\pi M_S \frac{R^2 L}{d^3}, \quad (1.1)$$

onde R , d e L são respectivamente o raio dos fios, a menor distância entre eles no arranjo e seu comprimento.

A proposta de U. Netzelmann para sistemas de partículas em fitas de gravação magnética [42] pode ser tomada como ponto de partida no estudo de nanofios. De acordo com o resultado do trabalho da referência [43]

$$H_A = 2\pi M_S(1 - 3P). \quad (1.2)$$

A equação 1.2 sugere que para empacotamento P , menor a $1/3$ a direção de fácil magnetização do arranjo é ao longo dos fios, sofrendo uma mudança para plano fácil (perpendicular aos fios) quando o empacotamento aumenta acima de $1/3$.

Entre outros fatores, a forma real dos fios é que determina quais dos mecanismos são responsáveis pela reversão da magnetização. Existe então um tamanho crítico (diâmetro no caso de cilindros e elipsoides) onde ocorre a transição de rotação coerente para modo curling. Nos trabalhos de A. Aharoni, S. Strikman [36], I.S. Jacob, C.P. Beam [44] e outros autores podem-se encontrar os estudos realizados nesta temática para diferentes geometrias. Wei Chen et al. propuseram, em função das falhas já mencionadas dois modelos, em que os fios são considerados como uma cadeia de elipsoides para explicar as propriedades magnéticas de nanofios [45].

O maior problema deste modelo é a não inclusão do fator de empacotamento, P ou em outras palavras as interações entre os fios que desempenham um papel fundamental nas propriedades de arranjos de nanofios magnéticos [46]. Além das propriedades antes mencionadas, a policristalinidade dos fios tem se mostrado como fator determinante na resposta destes sistemas. Outro parâmetro para estudar é o comprimento dos fios, que já ficou explícito em alguns trabalhos ser fator determinante para os valores do campo coercitivo e da remanência. Sendo assim, este trabalho está centrado no estudo dos efeitos do comprimento dos fios num arranjo hexagonal. Todos os nossos resultados são obtidos por simulação computacional derivada da solução das equações micromagnéticas. Também temos como objetivo, verificar os efeitos da distância entre os fios. Os fios foram modelados como cadeias de elipsoides e todos os estudos foram feitos sobre o comportamento da curva de magnetização em função do ângulo do campo aplicado.

Esta dissertação está dividida em capítulos para facilitar a leitura. No capítulo 2 apresentamos um breve resumo dos principais conceitos sobre magnetismo, que foram utilizadas neste trabalho. O capítulo 3 apresenta detalhes sobre os parâmetros de simulação e algumas características dos simuladores utilizados neste trabalho. Finalmente apresentamos um capítulo 4 com os resultados do nosso estudo.

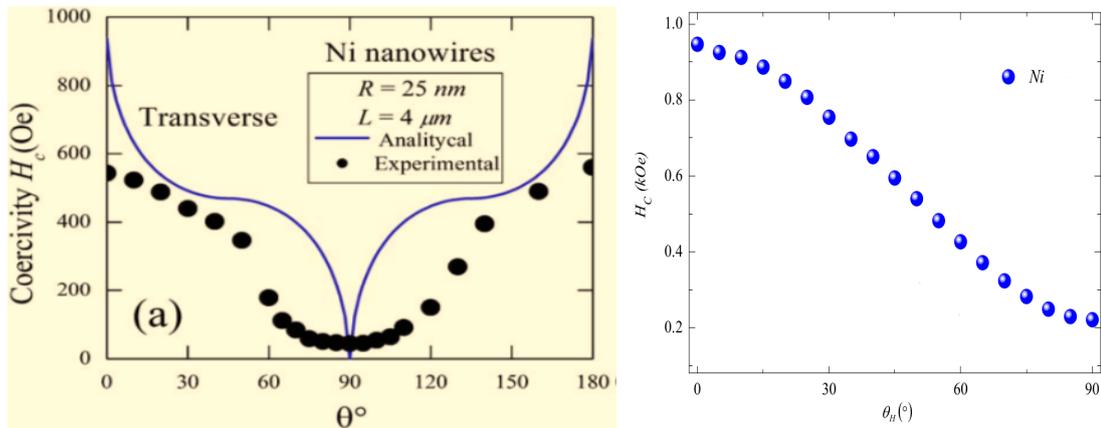


Figura 1.3: O gráfico à direita foi tirada do artigo [6], gráfico esquerdo foi obtido nosso laboratório [47].

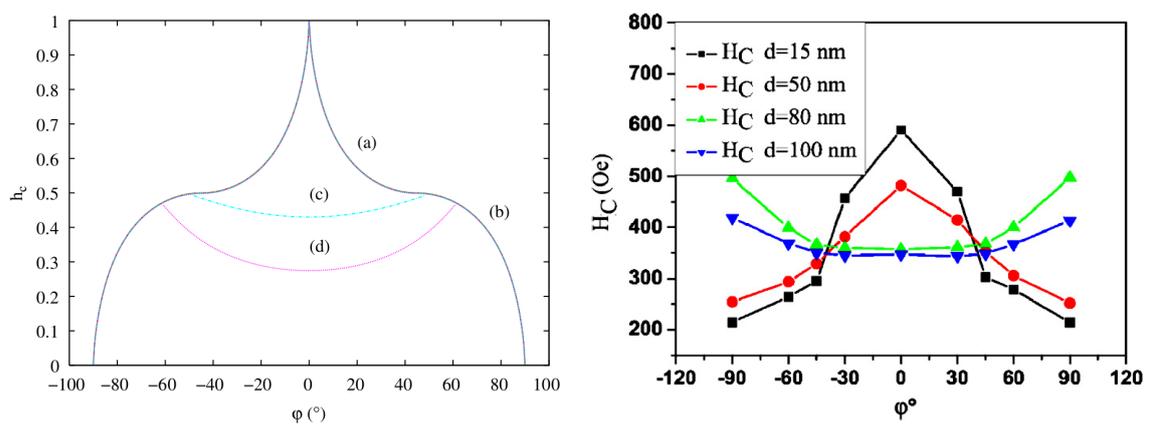


Figura 1.4: Os gráficos à direita foram tiradas do artigo [28]

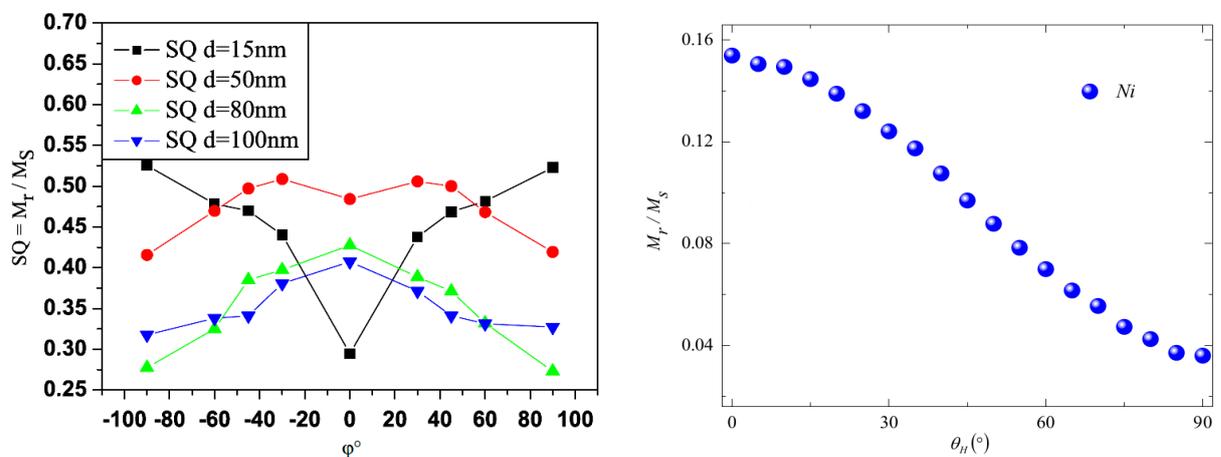


Figura 1.5: O gráfico à direita foi tirada do artigo [28], gráfico esquerdo foi obtido nosso laboratório [47]

Fundamentação Teórica

2.1 A curva de histerese magnética

A principal característica de um sistema ferromagnético é o ciclo de histerese. Este é tradicionalmente representado como a magnetização global da amostra em função do campo magnético aplicado, Figura 2.1(a). O valor do campo aplicado onde o laço cruza o ponto zero de magnetização é conhecido como campo coercitivo H_C , e representa, o campo necessário para inverter a direção de magnetização do material. M_R é a magnetização remanente, magnetização que continua quando o campo aplicado é reduzido a zero. Comparando-se os laços de histerese, na figura 2.1(b), pode-se fazer a observação de que o material mole terá um ciclo de histerese estreito, isto é, o campo de aplicação necessária para inverter a magnetização é relativamente baixo, e o material duro vai possuir um ciclo de histerese relativamente largo.

O ponto em que a magnetização global de uma amostra não pode mais ser aumentada (do ponto de saturação ou M_S) é identificado como um plato nos extremos do ciclo de histerese. Existem amostras em que H_C depende da orientação do campo Figura 2.1(c). Nanofios são tipicamente assim.

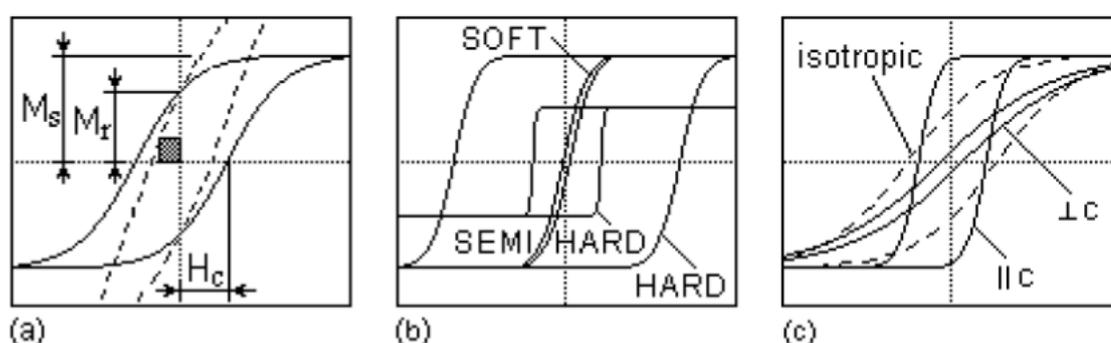


Figura 2.1: Laços de histerese: (a) As quantidades extrínsecas básicas derivadas de um laço de M-H (linha contínua) o laço B-H correspondente (linha tracejada), (b) laços de histerese de materiais duros, semiduros e moles, (c) laços paralelos medida e perpendicular a um eixo c fácil [48].

Para o armazenamento de dados, é desejável ter um material com um ciclo de histerese adequado e, portanto, um campo coercivo, que torna difícil o referido material a perder o seu

estado de magnetização. Um ciclo de histerese estreito é uma característica para aplicações tais como cabeças de gravação.

Materiais ferromagnéticos do ponto de vista da física teórica são descritos com maior precisão pela mecânica quântica. Nesta teoria, o ferromagnético é descrito por um problema de N corpos cuja complexidade cresce exponencialmente com o número N [49].

Tabela 2.1: Modelos para ferromagnéticos [50].

Modelo	Descrição	Escala do comprimento
Histerese magnética	Descrição de magnetização de uma amostra	\forall comprimento
Teoria do fase	Descrição dos ensembles de domínios	> 0.1 mm
Teoria do domínio	Descrição da estrutura de domínio	$1 - 1000$ μ m
Teoria micromagnética	Descrição contínua da magnetização	$1 - 1000$ nm
Teoria nível atômico	Início cálculos da mecânica quântica	< 1 nm

Diferentes modelos foram propostos com o finalidade de descrever aproximadamente materiais ferromagnéticos numa escala macroscópica. Dependendo das simplificações introduzidas por um modelo particular, pode-se descrever o sistema com precisão apenas sob certas premissas e numa escala do comprimento. A Tabela 2.1 apresenta uma visão geral dos modelos estabelecidos para a descrição do ferromagnetismo em diferentes escalas de comprimento.

Para a descrição do ferromagnetismo na escala micrométrica a teoria de micromagnetismo provou ser uma ferramenta confiável. Por outro lado, as equações micromagnéticas só podem ser resolvidas numericamente para sistemas relativamente grandes.

Um material magnético consiste basicamente de dipolos magnéticos chamados de magnetos elementares. Estes dipolos são os átomos que tem a contribuição de spins e momento angular. Propriedades magnéticas macroscópicas conseqüentemente, são derivadas da interação desses dipolos.

No caso especial de materiais ferromagnéticos, os elétrons com funções de onda sobrepostas favorecem um alinhamento paralelo do spin devido à interação de troca. O alinhamento de magnetos elementares m_i em locais r_i pode ser considerado localmente quase paralelo:

$$m_i \approx m_j \quad \text{para} \quad |r_i - r_j| < \lambda, \quad (2.1)$$

onde λ é uma medida da a interação de troca, chamado comprimento de troca. A distribuição discreta de momentos magnéticos m_i pode ser bem aproximada a um vector de densidade contínua $M(r)$, chamado de magnetização. O micromagnetismo descreve a dinâmica do campo de

magnetização pela equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG). Devido a esta combinação de teoria clássica dos campos e da mecânica quântica, micromagnetismo é muitas vezes referida como teoria semi-clássica do contínuo.

A curva de histerese e o tratamento com as equações LLG tem como ponto de partida as energias magnéticas mais relevantes no sistema em estudo. Sendo assim apresentamos alguns conceitos relacionados com as energias geralmente utilizadas em estudos com nanofios magnéticos.

2.2 Energias Magnéticas em Arranjos de Nanofios

A energia total de um ferromagnético em função da magnetização é influenciada por uma grande quantidade de efeitos físicos. Embora alguns desses efeitos tenha uma descrição clássica, como a energia de desmagnetização e a energia Zeeman, outros têm explicação na mecânica quântica, estes últimos, tem que ser adaptados à teoria do micromagnetismo. Exemplo, disso é a energia de troca e a energia magnetocristalina. Ao encontrar mínimos locais da função energia, configurações de magnetização estáveis podem ser obtidas. No entanto, a energia total também desempenha um papel importante no estudo da dinâmica da magnetização.

Tipicamente no estudo de nanofios são incluídas energias magnetocristalina, de troca, auto-desmagnetizante e Zeeman.

Energia de troca

O característica marcante de materiais ferromagnéticos, é a existência de magnetização espontânea [51]. Os magnetos elementares em materiais ferromagnéticos são sujeitos à chamada interação de troca. Este efeito quântico leva a um alinhamento paralelo, energeticamente favorecido, de spins vizinhos e a configurações uniformes de magnetização.

A energia de troca é derivada da interação de Coulomb de duas partículas indistinguíveis com sobreposição de funções de onda. Um sistema de dois férmions dispõe de uma função de onda anti-simétrica. Uma discussão detalhada da interação de troca pode ser encontrada em qualquer livro sobre mecânica quântica [52].

Vamos usar o Hamiltoniano de Heisenberg de dois spins vizinhos como ponto de partida para derivar uma expressão micromagnética para a energia de troca:

$$E_{i,j} = -JS_i \cdot S_j. \quad (2.2)$$

Aqui J é a integral de troca e S_i e S_j são operadores de spins de átomos vizinhos. Com a magnitude dos spins $S = |S_i| = |S_j|$ e os vetores unitários $n_i = S_i/S$ e $n_j = S_j/S$ podemos escrever,

$$E_{i,j} = -JS^2 n_i \cdot n_j \quad (2.3)$$

$$= -JS^2 \left[1 - \frac{1}{2}(n_i - n_j)^2\right]. \quad (2.4)$$

A energia de troca de um corpo magnético é calculada através da soma

$$E = \sum_{i,j} -J_{ij} S^2 \left[1 - \frac{1}{2}(n_i - n_j)^2\right], \quad (2.5)$$

onde J_{ij} é a integral de troca para spins i e j . Isso significa que $J_{ij} \neq 0$ apenas para intercâmbio entre vizinhos. Na teoria do micromagnetismo para esta expressão deve ser adaptada ao campo contínuo de magnetização m . O produto escalar na Eq. 2.3 é analogamente dado por:

$$m(r) \cdot m(r + \Delta r) = 1 - \frac{1}{2}[m(r) - m(r + \Delta r)]^2, \quad (2.6)$$

onde Δr é o vetor distância entre dois momentos magnéticos acoplados. Expandindo $m(r + \Delta r)$ em Δr até primeira ordem e inserindo em Eq. 2.6 teremos

$$m(r) \cdot m(r + \Delta r) \approx 1 - \frac{1}{2} \sum_i (\Delta r \cdot \nabla m_i)^2. \quad (2.7)$$

A energia de troca para um corpo magnético é obtida através da soma das contribuições dependendo da estrutura de cristal e a integração sobre o volume Ω ,

$$E = \int_{\Omega} \sum_i A_i m(r) \cdot m(r + \Delta r_i) dr, \quad (2.8)$$

onde A_j é a constante de troca. Inserindo Eq. 2.7 teremos a expressão global,

$$E = C + \int_{\Omega} \sum_{i,j,k} A_{jk} \frac{\partial m_i}{\partial x_j} \frac{\partial m_i}{\partial x_k} dr, \quad (2.9)$$

para a energia de troca. A constante C resulta da integração do termo constante da Eq. 2.7 e pode ser omitida sem alterar a física do sistema. Aqui A_{jk} é uma matriz de constantes de troca. Por rotação do sistema de coordenadas desta matriz podemos diagonalizar e obtemos,

$$E = \int_{\Omega} \sum_{i,j} A_j \left(\frac{\partial m_i}{\partial x_j} \right)^2 dr. \quad (2.10)$$

No caso de materiais cúbicos e isotrópicos a constante do troca não depende da dimensão, a Eq. 2.10 se reduz ainda mais,

$$E = A \int_{\Omega} \sum_i (\nabla m_i)^2 dr = A \int_{\Omega} (\nabla m)^2 dr. \quad (2.11)$$

Esta expressão descreve com precisão a maioria dos materiais e é normalmente usada em micromagnetismo. A constante de troca A é determinada experimentalmente.

Este resultado foi obtido a partir do modelo de Heisenberg que assume spins localizados. Em ferromagnetos metálicos, os spins não são localizados e o modelo de Heisenberg não se aplica. No entanto, a Eq. 2.11 ainda descreve a interação de troca fenomenologicamente em primeira ordem [50], o que permite o uso em 2.11 em materiais metálicos.

Energia desmagnetizante

O campo desmagnetizante se origina da descontinuidade da componente normal da magnetização através da superfície que contorna o material magnético e tem sentido oposto ao campo aplicado. Isto significa que esta contribuição da energia é responsável pela interação dipolo-dipolo dos magnetos elementares.

A energia desmagnetizante pode ser derivada a partir do electromagnetismo clássico. As equações de Maxwell para a magnetostática, assumindo $J = 0$, são dadas por

$$\nabla \cdot B = 0 \quad (2.12)$$

$$\nabla \times H = 0. \quad (2.13)$$

Aqui o fluxo magnético B é ligado ao campo magnético H através da magnetização M

$$B = \mu_0(H + M). \quad (2.14)$$

A equação 2.13 é equivalente a dizer que o campo magnético H é o gradiente de um potencial escalar u . Por isso, o campo de desmagnetização é a solução para o sistema de equações

$$\Delta u = \nabla \cdot M \quad (2.15)$$

$$H = -\nabla u. \quad (2.16)$$

A condição de contorno para este sistema é dada de uma forma assintótica por

$$u(r) = \mathcal{O}(1/|r|) \text{ para } |r| \rightarrow \infty. \quad (2.17)$$

Esta condição indica que o potencial cai para zero no infinito. Muitas vezes referida à condição de contorno aberto. A equação 2.15 é a equação de Poisson e pode ser resolvida com a função de Green, que, naturalmente, satisfaz a condição de contorno 2.17,

$$u(r) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\nabla' \cdot M(r')}{|r - r'|} dr'. \quad (2.18)$$

Na equação a integração é feita em todo o espaço. No caso de um corpo magnético ideal a magnetização é definida apenas numa região finita Ω ,

$$|M(r)| = \begin{cases} M_s & \text{se } r \in \Omega \\ 0 & \text{se } r \notin \Omega \end{cases} \quad (2.19)$$

o que leva a uma descontinuidade de M na fronteira $\partial\Omega$.

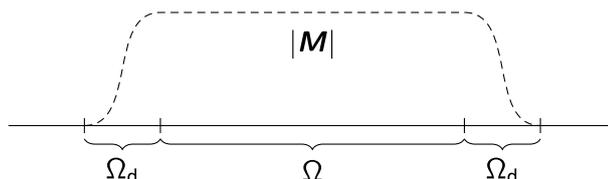


Figura 2.2: Esboço do processo, utilizado para limitar a derivação do termo de fronteira na integral do potencial escalar. A descontinuidade da magnetização do outro lado da fronteira $\partial\Omega$ é suavizada para fora em uma região Ω_d que circunda a amostra.

Neste caso, a solução da Eq. 2.18 pode ser obtida por um processo de limite. Considere uma região finita Ω_d que rodeia o corpo magnético Ω . Além disso assumimos um decaimento suave da magnetização dentro Ω_d , ver Figura 2.2. Como a magnetização e o seu divergente desaparecem na região fora Eq. 2.18 pode ser escrita como,

$$u(r) = -\frac{1}{4\pi} \left[\int_{\Omega} \frac{\nabla' \cdot M(r')}{|r-r'|} dr' + \int_{\Omega_d} \frac{\nabla' \cdot M(r')}{|r-r'|} dr' \right]. \quad (2.20)$$

Aplicando o teorema de Green para a integral sobre Ω_d obtemos

$$\int_{\Omega_d} \frac{\nabla' \cdot M(r')}{|r-r'|} dr' = \int_{\partial\Omega_d} \frac{M(r') \cdot n}{|r-r'|} ds' - \int_{\Omega_d} M(r') \cdot \nabla' \frac{1}{|r-r'|} dr', \quad (2.21)$$

onde ds' é medida da área em r' e n é a normal para fora. Na extremidade existe, um decaimento rápido da magnetização, M da região Ω_d , e pode tornar-se infinitamente pequena, sem alterar o resultado de Eq. 2.21. A fronteira $\partial\Omega_d$ consiste de um interior e um lado externo. A integral sobre o limite exterior desaparece, por causa de um decaimento da magnetização, M . O contorno interior coincide com o contorno do corpo magnético $\partial\Omega$ excepto na orientação. Assim, a integral de contorno pode ser substituída por uma integral sobre $\partial\Omega$ com sinal oposto. Inserindo em Eq. 2.20 resulta

$$u(r) = -\frac{1}{4\pi} \left[\int_{\Omega} \frac{\nabla' \cdot M(r')}{|r-r'|} dr' - \int_{\partial\Omega} \frac{M(r') \cdot n}{|r-r'|} ds' \right]. \quad (2.22)$$

As expressões $\rho = -\nabla M$ e $\sigma = M \cdot n$ são densidade volumétrica e superficial de “carga magnética”, respectivamente. Uma expressão alternativa para a Eq. 2.22 pode ser obtida através

da aplicação do teorema de Green,

$$u(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} M(r') \cdot \nabla' \frac{1}{|r-r'|} dr'. \quad (2.23)$$

O campo de desmagnetização H_{demag} é calculado como o gradiente negativo de potencial u em relação a r ,

$$H_{\text{demag}}(r) = -\nabla u(r) = \int_{\Omega} \tilde{N}(r-r') M(r') dr', \quad (2.24)$$

sendo \tilde{N} o tensor de desmagnetização dado por,

$$\tilde{N}(r-r') = -\frac{1}{4\pi} \nabla \nabla' \frac{1}{|r-r'|}. \quad (2.25)$$

De acordo com a eletrodinâmica clássica a energia magnética é dada por

$$E = -\frac{\mu_0}{2} \int_{\Omega} M \cdot H_{\text{demag}} dr, \quad (2.26)$$

$$E = -\frac{\mu_0}{2} \iint_{\Omega} M(r) \tilde{N}(r-r') M(r') dr dr'. \quad (2.27)$$

O fator 1/2 explica o fato de que o campo é gerado pela própria magnetização. Devido à integração ao longo de r e r' , cada interação dipolo-dipolo entre $M(r)$ e $M(r')$ contribui duas vezes para o resultado, que é corrigido por esse prefactor.

Energia magnetocristalina

Dependendo da estrutura cristalina de um material ferromagnético, é favorecido o alinhamento da magnetização paralelo a certos eixos energeticamente favoráveis. Esta contribuição de energia resulta das interações spin-órbita [50] e é referida como energia magnetocristalina. Os eixos energeticamente favorecidos são chamados eixos fáceis. Estes são eixos sem direção, o que significa que um mínimo local da energia em m_{min} implica um mínimo local em $-m_{\text{min}}$ com,

$$E(m_{\text{min}}) = E(-m_{\text{min}}). \quad (2.28)$$

Dependendo da estrutura, um material pode ter um ou mais destes eixos fáceis. No caso mais simples um material tem um único eixo fácil. Esta energia magnetocristalina uniaxial é dada pela equação,

$$E = - \int_{\Omega} [K_{u1}(m \cdot e_u)^2 + K_{u2}(m \cdot e_u)^4] dr \quad (2.29)$$

onde e_u é um vetor unitário que aponta na direção do eixo fácil e K_{u1} e K_{u2} são chamadas constantes de anisotropia. Esta expressão fenomenológica é o resultado de uma expansão de

Taylor da energia até quarta ordem. Só potências pares são considerados, a fim de cumprir a condição de simetria 2.28. A anisotropia uniaxial ocorre em materiais com uma estrutura cristalina hexagonal ou tetragonal, como o cobalto.

Materiais com uma estrutura de rede cúbica naturalmente possuem três eixos e_i fáceis que são pares ortogonais,

$$e_i \cdot e_j = \delta_{ij}. \quad (2.30)$$

A energia magnetocristalina de um material cúbico é o resultado de uma expansão nas componentes de magnetização ao longo dos eixos fáceis,

$$E = \int_{\Omega} [K_{c1}(m_1^2 m_2^2 + m_2^2 m_3^2 + m_3^2 m_1^2) + K_{c2} m_1^2 m_2^2 m_3^2] dr, \quad (2.31)$$

onde $m_i = e_i \cdot m$ é a componente de magnetização na direção dos eixos e_i . Os termos que violam a condição de simetria 2.28 são desconsiderados. Além disso, somente as contribuições que são constantes sob permutação de componentes m_i são consideradas, a fim de cumprir com a simetria cúbica. Anisotropia cúbica ocorre em materiais tais como ferro, que tem uma estrutura cúbica de corpo centrado e níquel, que tem uma estrutura cúbica de face centrada.

Embora as expressões para a energia magnetocristalina em Eq. 2.29 e 2.31 tenham uma origem fenomenológica, são capazes de descrever os efeitos de anisotropia com uma alta precisão.

Energia Zeeman

A energia Zeeman é relacionada à interação do momento magnético total do material quando é colocado um campo externo. Em termos da magnetização sem dependência espacial a energia Zeeman pode ser expressada como, 2.32, H_{Zeeman} o campo magnético externo e M a magnetização da mostra.

$$E = -\mu_0 \int_{\Omega} M \cdot H_{\text{Zeeman}} dr. \quad (2.32)$$

Para utilizar estas energias em estudo micromagnético, se faz um tratamento no qual há um campo associado a cada interação presente no sistema. A modo de melhor compreender a teoria micromagnética, apresentamos alguns aspectos relevantes para este trabalho.

2.3 Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert

A equação utilizada no micromagnetismo para a descrição da dinâmica da magnetização é a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG), que foi originalmente proposta por Landau e Lifshitz [53], o movimento da magnetização é descrito por um termo de precessão e um termo

de amortecimento. O termo de amortecimento é puramente fenomenológico. Em 1955 Gilbert obteve uma expressão equivalente para a equação LLG a partir de uma formulação de Lagrange, onde o amortecimento é tratado de forma mais rigorosa [54, 55].

Na sequência, o método clássico de Lagrange, bem como uma abordagem quântica são apresentados brevemente para derivar a equação LLG. Ambas as abordagens oferecem uma visão do modelo micromagnético e são, de interesse para a aplicação desta teoria.

Abordagem clássico pelo formalismo Lagrangiano

A equação LLG pode ser obtida pelo formalismo de Lagrange. A magnetização M é assumida ser normalizada, e o seu movimento pode ser localmente bem descrito pela rotação de um corpo rígido. A velocidade angular de um corpo rígido em termos de ângulos de Euler é

$$\Omega = \begin{pmatrix} \dot{\phi} \sin(\theta) \sin(\psi) + \dot{\theta} \cos(\psi) \\ \dot{\phi} \sin(\theta) \cos(\psi) + \dot{\theta} \sin(\psi) \\ \dot{\phi} \cos(\theta) + \dot{\psi} \end{pmatrix}, \quad (2.33)$$

onde a abreviação da notação $\dot{f} = \partial_t f$ é usada. Note-se que a velocidade angular Ω , e os ângulos θ , ϕ e ψ tem que depender do local r , a fim de descrever o campo de magnetização $m(r)$. Sem perda de generalidade, os eixos de rotação podem ser escolhidos de tal modo que o r_3 seja na direção da magnetização, em cada ponto e assim,

$$m = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.34)$$

Na representação de corpo rígido a magnetização é descrita por uma barra com simetria de rotação. Uma vez que o ângulo ψ descreve a rotação da barra em torno do seu eixo de simetria, pode ser ajustada para $\psi = 0$, sem perda de generalidade [56]. Assim Eq. 2.33 reduz-se a

$$\Omega = \begin{pmatrix} \dot{\theta} \\ \dot{\phi} \sin(\theta) \\ \dot{\phi} \cos(\theta) + \dot{\psi} \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

O Lagrangiano de um sistema dinâmico, é dado por

$$\mathcal{L} = T(q, \dot{q}) - V(q) \quad (2.36)$$

onde T é a energia cinética e V é a energia potencial do sistema e q e \dot{q} são as coordenadas generalizadas e sua derivada no tempo, respectivamente. No micromagnetismo a energia potencial é dada por contribuições de energia discutidos na Sec. 2.2. A energia cinética no entanto, não tem qualquer, explicação clássica, uma vez que a magnetização não tem inércia no sentido clássico. Em [54] Gilbert propôs o Lagrangiano

$$\mathcal{L} = -\frac{M_s}{\gamma} \dot{\phi} \cos(\theta) - U(\theta, \phi). \quad (2.37)$$

Podemos também escrever,

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} I [\dot{\phi} \cos(\theta) + \dot{\psi}]^2 - U(\theta, \phi), \quad (2.38)$$

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} I \Omega_3^2 - U(\theta, \phi), \quad (2.39)$$

que descreve uma energia de rotação clássica sendo I o momento de inércia. No entanto, nesta energia somente a rotação em torno do eixo de simetria da magnetização é considerada. De um ponto de vista clássico, não é claro por que Ω_1 e Ω_2 podem ser desprezados. Em [57] esta escolha de \mathcal{L} é discutida em detalhe.

A seguir, vamos ficar com o Lagrangiano 2.37, tal como proposto por Gilbert. De acordo com a formulação de Lagrange, a equação de movimento em termos de coordenadas generalizadas $q = (\theta, \phi)$ é dada por

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \dot{q}_i} - \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta q_i} + \frac{\delta D}{\delta \dot{q}_i} = 0, \quad (2.40)$$

onde $\delta/\delta f$ representa uma derivada funcional e D é uma função de dissipação Rayleigh adicional, que é responsável por perdas de energia do sistema. Inserindo Eq. 2.37 em Eq. 2.40 obtemos

$$\dot{\phi} \sin(\theta) = \frac{\gamma}{M_s} \left[\frac{\delta U}{\delta \theta} + \frac{\delta D}{\delta \dot{\theta}} \right] \quad (2.41)$$

$$\dot{\theta} = -\frac{\gamma}{M_s \sin(\theta)} \left[\frac{\delta U}{\delta \phi} + \frac{\delta D}{\delta \dot{\phi}} \right]. \quad (2.42)$$

Estas equações do movimento descrevem a dinâmica da magnetização pelos ângulos de Euler $\phi(r)$ e $\theta(r)$. De modo a obter uma descrição em coordenadas cartesianas, a derivada temporal da magnetização em coordenadas cartesianas é considerada

$$\partial_t m = \Omega \times m = \begin{pmatrix} \dot{\phi} \sin(\theta) \\ -\dot{\theta} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

Além disso, uma vez que a magnetização é um campo de vetores unidade $|m| = 1$, as variações de ângulos de Euler ϕ e θ são dadas por

$$\delta m_1 = \sin(\theta)\delta\phi \quad (2.44)$$

$$\delta m_2 = \delta\theta. \quad (2.45)$$

Das Eq. 2.41 e 2.42 podem ser escritas como,

$$\partial_t m_1 = \frac{\gamma}{M_s} \left[\frac{\delta U}{\delta m_2} + \frac{\delta D}{\delta \dot{m}_2} \right] \quad (2.46)$$

$$\partial_t m_2 = -\frac{\gamma}{M_s} \left[\frac{\delta U}{\delta m_1} + \frac{\delta D}{\delta \dot{m}_1} \right], \quad (2.47)$$

ou seja,

$$\partial_t m = -\frac{\gamma}{M_s} m \times \left(\frac{\delta U}{\delta m} + \frac{\delta D}{\delta \dot{m}} \right). \quad (2.48)$$

Escolhendo a função dissipativa $D = \alpha^* (\partial_t m)^2$, com $\alpha^* \geq 0$, resulta na equação LLG,

$$\partial_t m = -\gamma(m \times H_{\text{eff}}) + \alpha(m \times \partial_t m), \quad (2.49)$$

onde H_{eff} é o campo efetivo dado por

$$H_{\text{eff}} = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta U}{\delta m} \quad (2.50)$$

e $\alpha \geq 0$ é uma constante de amortecimento.

Abordagem Quântica

Nesta seção uma abordagem quântica é discutida para obter a equação LLG. O campo contínuo de magnetização se deriva de uma distribuição discreta de spins. Na mecânica quântica as componentes do spin são descritas pelos operadores \hat{S}_i . Na representação de Heisenberg da evolução temporal dos operadores de spin

$$\frac{d\hat{S}_j}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{S}_j, \hat{H}]. \quad (2.51)$$

As contribuições para o Hamiltoniano no contexto do micromagnetismo dependerão dos spins. Assim, é razoável expandir o Hamiltoniano nos operadores de spin

$$\begin{aligned} [\hat{S}_j, \hat{H}] &= \sum_k \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{S}_k} [\hat{S}_k, \hat{S}_j] + \mathcal{O}(\hbar^2), \\ [\hat{S}_j, \hat{H}] &= i\hbar \sum_{k,l} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{S}_k} \varepsilon_{jkl} \hat{S}_l + \mathcal{O}(\hbar^2). \end{aligned} \quad (2.52)$$

Inserindo na Eq. 2.51 e usando a notação vetorial $\hat{S} = (\hat{S}_1, \hat{S}_2, \hat{S}_3)$ obteremos,

$$\frac{d\hat{S}}{dt} = -\hat{S} \times \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{S}} + \mathcal{O}(\hbar). \quad (2.53)$$

No limite clássico, os operadores de spin podem ser substituídos pelo vetor de magnetização $M = M_s m$. Além disso, o segundo termo pode ser desconsiderado. Identificar $\partial \hat{H} / \partial \hat{S}$ com o campo efetivo H_{eff} na Eq. 2.50 conduz a

$$\partial_t m = -\gamma' (m \times H_{\text{eff}}). \quad (2.54)$$

Esta equação descreve a precessão da magnetização em torno da direção do campo efetivo, sem qualquer perda de energia. De acordo com o trabalho original de Landau e Lifshitz [53] um termo de amortecimento fenomenológico é adicionado a fim de levar em conta as perdas. Este termo de amortecimento é construído de tal modo que seja perpendicular ao termo de precessão. Além disso deve conservar a norma da magnetização levando a

$$\partial_t m = -\gamma' (m \times H_{\text{eff}}) - \alpha' m \times (m \times H_{\text{eff}}). \quad (2.55)$$

Esta é a forma explícita da equação LLG. Pode-se mostrar que essa forma é equivalente à forma na Eq. 2.49. Isto é feito através da inserção de Eq. 2.49 para $\partial_t m$ no lado direito da Eq. 2.49 e usando a identidade vetorial $a \times (b \times c) = (a \cdot c)b - (a \cdot b)c$. Os coeficientes das diferentes versões da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert cumprem as relações

$$\gamma' = \gamma / (1 + \alpha^2) \quad (2.56)$$

$$\alpha' = \alpha \gamma / (1 + \alpha^2). \quad (2.57)$$

Campo Efetivo

A equação LLG descreve o movimento da magnetização ao redor do campo efetivo definido pela Eq. 2.50. Este movimento pode ser descrito como a soma de um termo de precessão e um termo de amortecimento. A Figura 2.3 ilustra esses dois termos para a formulação explícita da equação LLG 2.55.

No caso da energia Zeeman e a energia desmagnetizante, o campo efetivo é um campo real no sentido clássico. O campo Zeeman é diretamente dado por H_{zeeman} , o campo de desmagnetização é calculado através de Eq. 2.24.

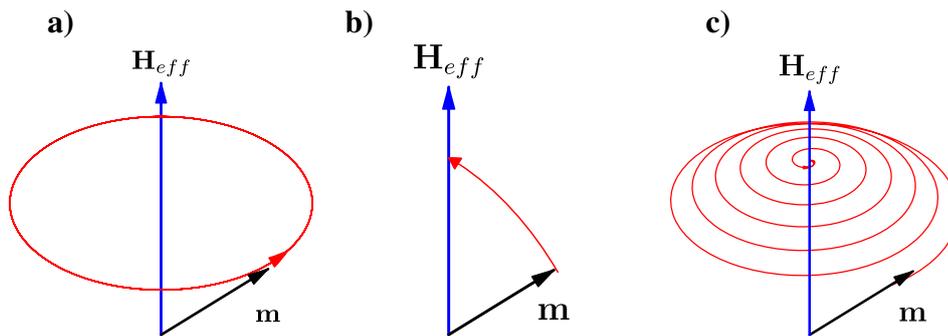


Figura 2.3: A evolução no tempo de um momento magnético como descrito pela equação LLG. O movimento pode ser dividido em uma precessão e uma contribuição de amortecimento. (a) Movimento de precessão em torno do campo efetivo. (b) Movimento amortecido. (c) A magnetização relaxa em direção ao campo efetivo. Resultando movimento incluindo precessão e amortecimento.

O campo de troca, bem como o campo de anisotropia magnetocristalina tem que ser calculados por meio da derivada variacional na Eq. 2.50. A densidade de energia de troca é dada pela integral de Eq. 2.11. Aplicando a regra da cadeia de cálculo das variações obteremos,

$$H_{ex}(r) = -\frac{A}{\mu_0 M_s} \frac{\delta}{\delta m} (\nabla m)^2 \quad (2.58)$$

$$= \frac{2A}{\mu_0 M_s} \Delta m. \quad (2.59)$$

Analogamente os campos efetivos para a anisotropia uniaxial e cúbica são obtidos pelo cálculo da derivada variacional de Eq. 2.29 e 2.31, respectivamente,

$$H_u(r) = \frac{2K_{u1}}{\mu_0 M_s} e_u (e_u \cdot m) + \frac{4K_{u2}}{\mu_0 M_s} e_u (e_u \cdot m)^3 \quad (2.60)$$

$$H_c(r) = -\frac{2K_{c1}}{\mu_0 M_s} \begin{pmatrix} m_1 m_2^2 + m_1 m_3^2 \\ m_2 m_3^2 + m_2 m_1^2 \\ m_3 m_1^2 + m_3 m_2^2 \end{pmatrix} - \frac{2K_{c2}}{\mu_0 M_s} \begin{pmatrix} m_1 m_2^2 m_3^2 \\ m_1^2 m_2 m_3^2 \\ m_1^2 m_2^2 m_3 \end{pmatrix}. \quad (2.61)$$

2.4 Limites do modelo micromagnético

O modelo micromagnético introduz um conjunto de simplificações para a descrição de materiais magnéticos. Enquanto justificada para uma ampla gama de aplicações, estas simplificações podem ser inadequadas em alguns casos. A aplicação bem sucedida do micromagnetismo a problemas físicos requer uma sólida compreensão da origem deste modelo. É crucial considerar suas suposições e simplificações, a fim de prever a validade dos resultados de simulação

para problemas físicos específicos. Sem a pretensão de ser completa, esta seção discute uma série de limitações para o modelo micromagnético introduzido nas seções anteriores.

Pontos de Bloch O pressuposto central no micromagnetismo é a magnetização de saturação homogênea M_s . Esta suposição é justificada pelo fato de que os materiais ferromagnéticos são sujeitos a acoplamento de troca, o que leva ao alinhamento local dos momentos magnéticos.

No entanto, determinados processos magnéticos envolvem a criação de singularidades magnéticas chamadas pontos de Bloch. Nesses pontos há mudanças de magnetização rapidamente no espaço, o que é inconsistente com a suposição básica de uma M_s homogênea. Apesar deste fato foi demonstrado em [58] que as simulações micromagnéticas que envolvem a criação de pontos de Bloch são capazes de descrever os processos correspondentes, de acordo com os experimentos, embora a densidade de energia no ponto de Bloch seja subestimada.

Temperatura Outro exemplo da violação do micromagnetismo de uma magnetização localmente homogênea é dada por efeitos térmicos. Os efeitos térmicos são refletidos mais naturalmente por perturbação local dos momentos magnéticos. A perturbação de um único momento magnético, no entanto, quebra a homogeneidade da magnetização. No âmbito do micromagnetismo uma possível aproximação para a consideração da temperatura finita é a redução da magnetização de saturação de acordo com uma aproximação de campo médio, ver [59]. Outra aproximação é a de adicionar um campo oscilante para o campo operacional, a qual converte à equação LLG em uma equação diferencial estocástica, ver [60]. Ambas técnicas não leva em conta as alterações locais na magnetização de saturação e, como resultado os métodos não conseguem descrever a dinâmica da magnetização corretamente, quando se aproxima da temperatura de Curie. Esta deficiência é superada pela equação de Landau-Lifshitz-Bloch, que é uma extensão à equação LLG não só por um campo oscilante, mas também por um termo que permite a alteração do módulo de magnetização [61].

Interfaces O modelo micromagnético foi projetado para descrever a energia e a dinâmica em um material homogêneo. Assim, a descrição da interface entre materiais diferentes, dá origem a um outro limite do modelo. O acoplamento magnético a essas interfaces muitas vezes não são totalmente claros e podem estar sujeito a efeitos quânticos que não são cobertos pelo modelo micromagnético. Estes efeitos incluem a interação Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) [62] a Interação Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) [63]. Trabalhos tem sido feitos sobre

a integração desses efeitos em teoria micromagnética e cálculos, ver [64, 65]. A simplificação comum para a descrição dos materiais com multicamadas finas, é a suposição de um bulk do material com constantes efetivas . Estas constantes efetivas são determinadas através de experimentos.

A equação LLG com contribuições de campo efetivo como introduzidas nas seções anteriores é uma equação diferencial parcial não-linear no espaço e no tempo. Além de alguns casos o sistema de equações resultante não pode ser resolvido analiticamente. Este trabalho é dedicado à solução numérica das equações micromagnéticas para um arranjo hexagonal de nanofios.

Micromagnetismo Numérico

3.1 Resolvendo as equações micromagnéticas

Para resolver a equação diferencial parcial (EDP) de LLG que descreve a dinâmica da magnetização, a complexidade limita soluções analíticas, sendo a tendência para utilizar métodos numéricos.

Existem códigos abertos e comerciais, simuladores baseados em método de diferenças finitas (FD) e método de elementos finitos (FE). Quanto à discretização, simuladores baseados em FD como *Object Oriented MicroMagnetic Framework* (OOMMF) [66] são geralmente mais rápidos e exigem menos memória do que [67] ferramentas simuladores baseados em FE como Magpar [68] ou Nmag [69]. Mas os baseados no FD são utilizados para as amostras em que a forma pode ser descrita por uma malha regular de paralelepípedos. Como demonstrado por vários grupos, rugosidade de superfície tem um grande efeito sobre a dinâmica, [70, 71] que significa modelagem de configurações experimentais reais geralmente com a utilização de simuladores baseados em FE. Portanto, a escolha de um simulador depende de requisitos de precisão e tempo de execução dependendo do problema particular.

3.2 Método de diferenças finitas e OOMMF

FD é um método para resolver equações diferenciais parciais numericamente. A ideia básica do FD é discretizar a função de referência $f(x)$ em pontos da malha x_i e substituir as derivadas espaciais por diferenças finitas [67] entre os pontos da malha. Muitos simuladores micromagnéticos à base de FD utilizam uma malha regular, uma vez que permite a aplicação de métodos de convolução rápidos para o cálculo do campo de desmagnetização. A malha regular é mostrada na Fig. 3.1. Aqui, o espaço é subdividido em uma malha regular, em que o valor da função é assumida no centro do cuboide.

A magnetização é uma função de tempo e espaço. No método FD, o volume simulado é $V = XYZ$ dividido em n_x, n_y, n_z blocos chamados células de simulação de igual tamanho $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ (em coordenadas cartesianas). Cada dimensão do volume simulado deve ser dividida em um

Nome	Licença	scripting	método	paralelização	linguagem de programação	Bibliotecas
AlaMag	GPL	-	FD	-	C++	-
JaMM	PDC	-	FD	-	Java/XML	-
OOMMF	código aberto	sim	FD	SMP	C++, TCL/TK	VODE
RKMAG	código aberto	não	FD	não	FORTRAN	Intel MKL
MagFEM3D	GPL	-	FE	-	FORTRAN	-
Magpar	GPL	TAO, Python	FE	MPI	C++	TAO, PVODE, Sundials, PETSc
Nmag	GPL	sim	FE	MPI	Python OCaml	PVODE, Sundials, PETSc, HLib

Tabela 3.1: Lista de simuladores micromagnéticos de licenças livre existentes. Para cada simulador o tipo de licença, o apoio linguagem de script, o método de discretização utilizado, o suporte para computação paralela, a linguagem de programação básica, e as bibliotecas numéricas utilizados são listados.

número inteiro de células, apenas estruturas retangulares são eficazes. Para geometrias curvas, os erros nas bordas ocorrem e a solução aproximada pode ser muito diferente do correto. No modelo de micromagnético FD é menos dispendioso computacionalmente como suas malhas regulares permitem a utilização de algoritmos de convolução rápidos para o cálculo do campo de desmagnetização. Vamos limitar-nos ao sistema de coordenadas cartesianas.

Depois de discretização do volume de simulação em células, as propriedades micromagnéticas em função dos materiais, ou seja, magnetização de saturação, o coeficiente de troca e a constante de anisotropia, deve ser definida para cada célula. A solução da equação LLG, é então determinada como o produto de espaço e tempo dependente de um vector da norma 1 (dependente espacialmente) com um parâmetro do material M_S . A equação LLG pode ser resolvida para cada célula individual de modo que a solução do problema micromagnético torna-se em encontrar a solução para $n = n_x \cdot n_y \cdot n_z$ equações diferenciais ordinárias do tipo

$$\frac{d\mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t)}{dt} = -|\bar{\gamma}|\mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t) \times \mathbf{H}_{eff}(\mathbf{r}_j, t) - \frac{|\bar{\gamma}|\alpha}{M_S(\mathbf{r}_j)} \mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t) \times \mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t) \times \mathbf{H}_{eff}(\mathbf{r}_j, t). \quad (3.1)$$

O acoplamento entre as células individuais só entra em jogo nas interações magnéticas que são resumidos pelo campo efetivo. A discretização do campo efetivo é o grande desafio na

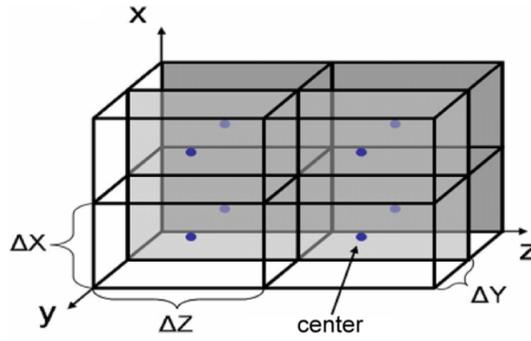


Figura 3.1: Resultante de malha regular de cuboide usando o método FD. O valor da função espacialmente resolvido é assumida para ser localizada no centro de cada cuboide. [72]

implementação do modelo micromagnético.

$$\mathbf{H}_{eff}(\mathbf{r}_j, t_i, \mathbf{M}(\mathbf{r}_{all}, t_i), \mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t_i)) = \mathbf{H}_Z(\mathbf{r}_j, t_i) + \mathbf{H}_E(\mathbf{r}_j, t_i, \mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t_i), \mathbf{M}(\mathbf{r}_{nn}, t_i)) \\ + \mathbf{H}_D(\mathbf{r}_j, t_i, \mathbf{M}(\mathbf{r}_{all}, t_i)) + \mathbf{H}_A(\mathbf{r}_j, t_i, \mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t_i)), \quad (3.2)$$

onde *all* são os índices de todas as células, e os índices do *nn* vizinhos mais próximos para a célula *j* – *sima*. Para computar o campo de troca deve encontrar uma discretização eficiente para calcular a diferencial parcial em Eq. 3.1. Usa um polinômio de Taylor para determinar a mudança na magnetização entre duas células. Já que a interação de troca de curto alcance é geralmente suficiente para limitar o cálculo para os vizinhos mais próximos. Para as células *j* – *sima*

$$\mathbf{H}_E(\mathbf{r}_j, t_i) = \frac{A \cdot M_S}{\mu_0} \cdot \sum_{k=nn} \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t_i) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}_k, t_i)}{(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)^2}, \quad (3.3)$$

sendo *A* é a constante de troca. Há várias maneiras de selecionar os vizinhos mais próximos. Para problemas tridimensionais, pode-se selecionar qualquer uma das seis células com superfícies comuns ou as 26 células com vértices compartilhados. Em qualquer modo, a complexidade computacional é $O(N)$ [73]. Para discretizar o campo de desmagnetização é preciso primeiro resolver o tensor de desmagnetização $\hat{\mathbf{N}}$ para cada célula. A soma dupla, levaria a uma complexidade $O(N^2)$, pode então ser convertido em uma integral de convolução. Newell e Dunlop [74], pela primeira vez encontraram uma solução para o tensor de desmagnetização de corpos retangulares.

Através da aplicação de integral de Gauss, Newell reduziu os elementos do tensores desmagnetização para integrais de superfície de uma célula de simulação.

$$\mathbf{H}_D(\mathbf{r}_i, t, \hat{\mathbf{N}}) = \sum_j \hat{\mathbf{N}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}_j) \quad (3.4)$$

$$\hat{\mathbf{N}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{1}{4\pi} \int_{S_i} \int_{S_j} \frac{d\mathbf{S}_j \mathbf{S}_i}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (3.5)$$

Os elementos diagonais, N_{ii} , descrevem a interação da magnetização em superfícies opostas de uma célula, e os elementos não diagonais N_{ij} descrevem a interação entre as outras superfícies Newell et al. derivado uma fórmula fechada para os elementos tensores (ver Ref. [74] para mais detalhes). Para uma implementação do algoritmo computacional, deve-se também tratar as células na superfície do volume simulado, ou seja, quando, $n_x n_y n_z = 0$ ou $N_{i, mx}$. A integral de convolução pode, então, ser substituído por uma soma de convolução discreta

$$\mathbf{H}_D(\mathbf{r}_i, t_i, \hat{\mathbf{N}}) = \sum_k \hat{\mathbf{N}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}_k, t_i) \quad (3.6)$$

O campo de desmagnetização H_D precisa ser calculado para todas as células j em cada passo de tempo, tornando-se, de longe, a parte mais difícil da computação. Para reduzir o tempo de processamento, pode-se fazer uso da grade regular de FD com transformada de Fourier do tensor $\hat{\mathbf{N}}$ e os vectores de magnetização. O cálculo em seguida, é constituído por nove multiplicações (para cada elemento tensor) e duas transformações de Fourier. Uma vez que a geometria do volume simulado não se altera durante a simulação, os elementos do tensor de desmagnetização só precisam ser calculados uma vez, na fase de inicialização e é armazenada como sua transformada de Fourier. Ao utilizar a simetria do problema no espaço de Fourier, pode-se ainda reduzir o número de operações necessárias [66].

Para simular a dinâmica do sistema magnético, o tempo deve ser discretizado para uma série de pontos $[t_i]$. O modelo é assim alterado como segue:

$$\frac{d\mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t_i)}{dt} = -|\tilde{\gamma}| \mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t_i) \times \mathbf{H}_{eff}(\mathbf{r}_j, t_i) - \frac{|\tilde{\gamma}| \alpha}{M_S(\mathbf{r}_j)} \mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t_i) \times \mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t_i) \times \mathbf{H}_{eff}(\mathbf{r}_j, t_i) \quad (3.7)$$

Para a solução passo a passo para da Eq. 3.7 devemos integrar numericamente. Os valores para a magnetização de cada célula $\mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t_i)$ são calculados e adicionando o resultado para a função de valores de $\mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t_{i-1})$, tal como representado na Fig. 3.2. A partir dos novos valores $\mathbf{M}(\mathbf{r}_j, t_i)$ os componentes de campo efetivo são calculados e a integração é repetida. Para uma integração numérica eficiente é viável a utilização de várias etapas ou métodos de Runge-Kutta. O método de passos múltiplos avalia a função, neste caso $d\mathbf{M}/dt$ em vários intervalos de tempo (no método de Adams-Bashforth) incluindo o próximo passo de tempo

para um preditor-corretor para aumentar a precisão da integração [75]. Para uma determinada precisão o intervalo de tempo pode então, ser aumentada substancialmente, de modo que o cálculo da integração torna-se muito mais rápida. Alternativamente um intervalo de tempo $[t_i, t_i + 1]$ pode ainda ser dividido por pontos médios adicionais em que a função é avaliada (método Runge-Kutta). Para mais informação do algoritmo usado no programa OOMMF ver apêndice A.

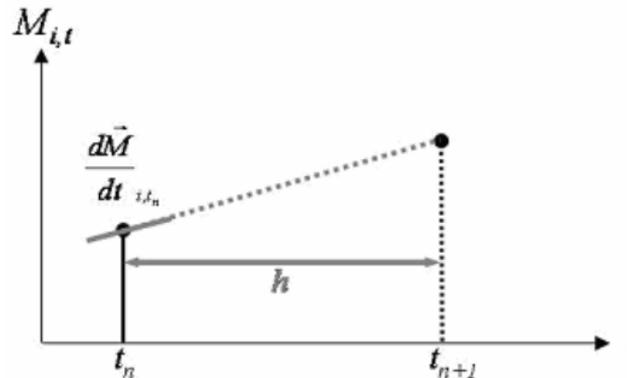


Figura 3.2: Computação numérica da integral da equação Landau-Lifshitz. [76]

3.3 Método dos elementos finitos e Nmag

O método dos elementos finitos EF requer a discretização do domínio espacial com elementos finitos uma triangulação T regular. Por dois problemas triângulos e retângulos tridimensionais, em três dimensões tetraédricos Fig. 3.3 e elementos hexaédricos são comumente usados. Também uma mistura de diferentes tipos de elementos é possível, mas após a avaliação de várias outras formas e para simplificar a discretização o tetraédrico foi escolhido.

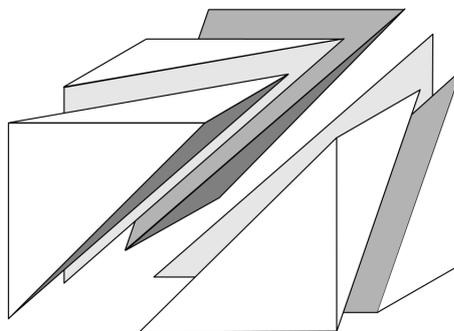


Figura 3.3: Kuhn triangulação de um cubo em seis elementos finitos tetraédricos (vista explodida) [77].

Em comparação com métodos de diferenças finitas [50], a malha de elementos finitos pode ser inteiramente não-estruturada. Tornando-se uma modelagem de geometrias complexas em

microestruturas irregulares mais convenientes. Ainda assim, uma triangulação de um corpo de forma arbitrária com elementos tetraédricos tridimensional pode descrever melhor objeto.

A fim de tratar as interações magnetostáticas de peças magnéticas distintas, o método dos elementos finitos pode ser combinado com um método de elementos de contorno. O espaço de discretização das equações diferenciais parciais que descrevem a dinâmica de magnetização conduz a um sistema de equações diferenciais.

As equações diferenciais parciais para o potencial escalar magnético (2.15 - 2.17) definem um problema de fronteira aberto. O potencial ou sua derivada normal apenas são conhecidos no infinito. Em princípio, temos que utilizar uma ampla região fora das partículas magnéticas, a fim de esclarecer as condições de contorno no infinito (2.17). A fim de superar estes problema, várias técnicas para tratar limites abertos em simulações de elementos finitos tem sido propostos [78]. Um método híbrido elemento finito/contorno finito foi introduzido originalmente por Fredkin e Koehler [79] sendo muito apropriado para simulações micromagnéticas. Isto é porque trata as interações magnetostáticos, sem a necessidade de malha do espaço fora dos corpos magnéticos.

O conceito básico desta abordagem é dividir os cálculos usando o princípio da superposição. Primeiro um potencial, U_1 , que surge a partir das cargas magnéticas dentro dos corpos magnéticos individuais é calculado. Em uma segunda etapa, um potencial, U_2 , que representa as interações magnetostáticas entre corpos e as condições de contorno no infinito. O potencial U_1 é assumido para resolver um problema do valor limite fechado. Em seguida, as equações para U_2 podem ser derivadas a partir de (2.15 - 2.17), que possuem potencial total $U = U_1 + U_2$. O potencial U_1 pode ser computado a partir do problema de contorno,

$$\Delta U_1(\mathbf{r}) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r})}{\mu_0} \text{ se } \mathbf{r} \in \Omega_{int}, \quad (3.8)$$

$$U_1 = 0 \text{ se } \mathbf{r} \in \Omega_{ext}, \quad (3.9)$$

$$\Delta U_1 \cdot \mathbf{n} = \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}}{\mu_0} \text{ se } \mathbf{r} \in \Gamma. \quad (3.10)$$

O potencial U_1 é a solução da equação de Poisson dentro das partículas magnéticas e igual a zero no exterior dos magnetos. Na superfície dos ímãs condições de contorno naturais são validas. O potencial U_2 satisfaz a equação de Laplace em todos os lugares

$$\Delta U(\mathbf{r}) = 0 \text{ se } \mathbf{r} \in \Omega_{int} \cup \Omega_{ext}, \quad (3.11)$$

com as seguintes condições de contorno para $r \in \Gamma$

$$U_2^{int} - U_2^{ext} = U_1, \quad (3.12)$$

$$(\nabla U_2^{ext} - \nabla U_2^{int} \cdot \mathbf{n}) = 0. \quad (3.13)$$

O potencial U_2 mostra um salto nas superfícies dos corpos magnéticos. O problema em (3.8 - 3.10) pode ser resolvido através de um método padrão de elementos finitos. Tanto o potencial U_1 potencial e os cossenos diretores da polarização magnética, são interpolados por funções lineares em um malhado tetraédrico de elementos finitos. A equação linear resultante é resolvida usando um método do gradiente conjugado [80]. Durante a integração no tempo da equação LLG, a solução iterativo pode ser iniciado com a solução anterior para U_1 como suposição inicial. Tipicamente cerca de 25 iterações são necessárias num sistema com 2×10^4 nodos. As equações (3.11 - 3.13) definem um potencial de dupla camada,

$$U_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} U_1(\mathbf{r}') \nabla' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \cdot \mathbf{n}' dr'^2, \quad (3.14)$$

que é criado por uma folha de dipolo com magnitude U_1 . Em princípio U_2 pode ser avaliada em todos os lugares dentro dos corpos magnéticos utilizado (3.14). No entanto, em vez do cálculo direto da discretização U_2 (3.14), nós avaliamos U_2 no limite e, depois, resolvemos (3.11) dentro Ω_{int} , usando os valores limite conhecidos como condições de Dirichlet. Para calcular U_2 em Γ , temos que tomar o limite $\mathbf{r} \rightarrow \Gamma$ do integral da superfície de dentro Γ_{int}

$$U_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} U_1(\mathbf{r}') \nabla' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \cdot \mathbf{n}' dr'^2 + \left(\frac{\Omega(\mathbf{r})}{4\pi} - 1 \right) U_1(\mathbf{r}). \quad (3.15)$$

Nós discretizamos (3.15) usando as funções lineares para interpolar U_1 em uma malha de superfície triangular. U_2 Resulta de um produto $U_2 = \mathbf{B}U_1$. A matriz de elementos de contorno, \mathbf{B} , depende apenas da geometria do problema e tem de ser calculada apenas uma vez. \mathbf{B} é $m \times m$ matriz que relaciona os nós m do contorno. Em resumo, temos de executar o procedimento a seguir para calcular o campo de desmagnetização. Geralmente estamos interessados na resposta dinâmica de um sistema ao longo de um período de tempo que é cerca de duas ordens de magnitude maior do que o tempo de precessão intrínseca. Assim, o tempo de CPU da fase de instalação é apenas uma pequena fração do tempo total da CPU. A cada iteração durante a integração no tempo que temos para realizar as seguintes etapas para atualizar o campo magnetostático são:

1. Solução iterativa de um sistema linear de U_1 (equação 3.8).
2. Matriz de produto vetor para obter U_2 , na fronteira dos corpos magnéticos (equação 3.15).

3. solução iterativa de um sistema linear para U_2 dentro dos corpos magnéticos (equação 3.11).

4. Soma U_1 e U_2 e criar um gradiente (equação 2.16).

Usamos um método para integrar a equação LLG (2.55) e assumir que a equação seja valida até os nós da malha de elementos finitos. Usando média espacial vamos atribuir um momento magnético

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{\mu_0} \int_{V_i} \mathbf{J}(\mathbf{r}) d^3 r, \quad (3.16)$$

para o nó i da malha de elementos finitos. A caixa de volume V_i têm as seguintes propriedades

$$\sum_{i=1}^N V_i = \int_{\Omega_{int}} d^3 r, \quad (3.17)$$

$$V_i \cap V_j = 0 \text{ para } i \neq j, \quad (3.18)$$

em que a soma de (3.17) vai de 1 ao número total de nós da malha de elementos finitos, N . O campo efetivo no nó i pode ser aproximado como

$$\mathbf{H}_{eff}^i = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_t}{\partial \mathbf{m}^i}. \quad (3.19)$$

Mais uma vez uma interpolação linear por partes do vector de polarização magnética em uma malha tetraédrica dos elementos finitos é utilizado para discretizar a energia livre de Gibbs magnética total, E_t .

Usando as equações (3.16) e (3.19) definimos um vector de momento magnético e um vector de campo efetivo em cada nó da malha de elementos finitos que conduz a um sistema de $3N$ equações diferenciais ordinárias. Os vetores são resolvidos através do método BDF [81].

O tratamento numérico de processos de magnetização envolve uma ampla margem de escala de comprimento. A malha de elementos finitos suficientemente fina é necessária para prever com precisão o campo de comutação de partículas magnéticas. Experimentos numéricos por Rave e colaboradores [82] mostraram que a simulação correta da nucleação de domínios requer um tamanho de malha comparável com o comprimento característico do material. À medida que o tamanho da malha atinge o comprimento crítico da densidade de energia e a troca de equilíbrio de densidade de energia magnetostática e o campo de nucleação torna-se independente do espaçamento da grade. A escala de comprimento crítico depende da força relativa da densidade de energia de troca em relação aos outros termos energéticos. Em materiais magnéticos moles a contribuição das energias mais dominante é a energia magnetostática. O comprimento

significativo é dado pelo comprimento de troca,

$$l_{ex} = \sqrt{\frac{2\mu_0 A}{M_S^2}}. \quad (3.20)$$

Em materiais magnéticos duros a contribuição das energias mais dominante é a energia magnetocrystalina. O comprimento significativo é dado pelo parâmetro de Bloch

$$\delta_0 = \sqrt{\frac{A}{K_u}} \quad (3.21)$$

As escalas típicas de comprimento envolvidas são as seguintes:

* A maioria materiais magnéticos exibe uma estrutura policristalina. O tamanho de grão de elementos magnéticos de filmes finos é na ordem de 10 nm [83].

* O comprimento característico é uma propriedade intrínseca tipicamente no intervalo de 3 nm a 5 nm. É a escala de comprimento em que o vector de polarização magnético muda de direção [82].

Esquemas de refinamento e processo adaptativos são aplicadas, a fim de trabalhar com estas escala de comprimento em simulações micromagnéticas. Hertel e Kronmuller [84], introduziram um regime de refinamento adaptativo em simulações micromagnéticas, para calcular configurações de domínio em elementos de filme fino. Para mais informação do algoritmo usado no programa Nmag ver apêndice B.

3.4 Discretização de arranjos de nanofios de níquel

Como mencionado no capítulo 2, utilizamos neste trabalho a simulação micromagnética para o estudo de propriedades estáticas de arranjos de nanofios de níquel. A maioria dos cálculos foram realizados utilizando o método FE. Realizamos uma análise prévia, onde comparamos os resultados gerados com os programas: OOMMF e Nmag, para este último a malha é gerada por meio do programa Gmsh [85] no apêndice B.2 mostra informação da malha. Usando um CPU *Intel(R) Core(TM) i5-3330S CPU @ 2.70GHz* com 4GiB de RAM

Para começar a explicação, fizemos arranjos compostos por 100 nanofios. Os estudos foram sobre a base das curvas de histerese para diferentes ângulos de campo aplicado. A figura 3.4 apresenta uma representação esquemática do arranjo do cilindros e mostra o ângulo medido em relação à normal (eixo dos cilindros). Observemos ademais, que os fios estudados neste trabalho, se encontram dispostos em um arranjo hexagonal. A distância entre os fios no arranjo foi um dos parâmetros estudados durante nosso trabalho, assim como o comprimento dos fios.

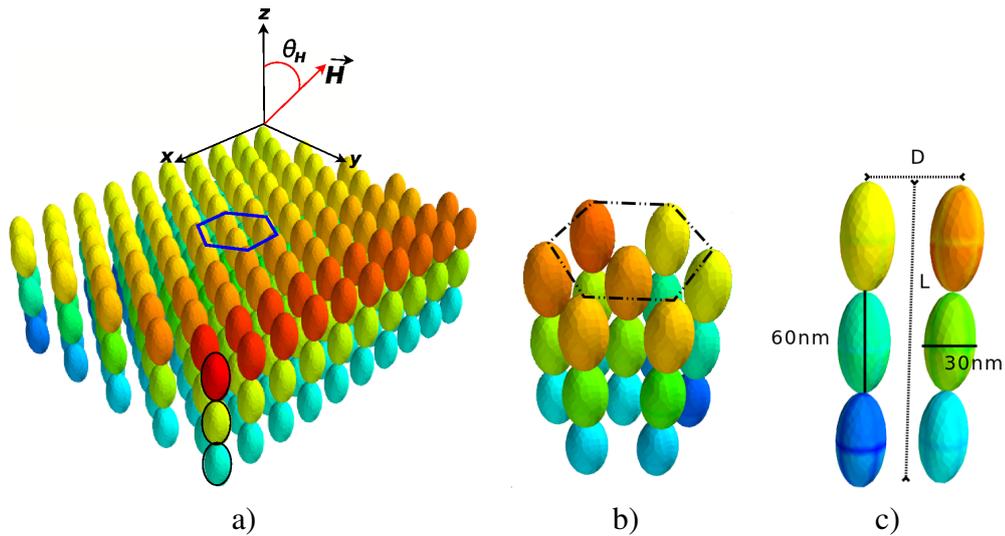


Figura 3.4: Amostra do arranjo de 10×10 nanofios de níquel formadas por cadeias de elipsoides. a) Mostra o arranjo a simular onde se aplica um campo externo. b) Mostra que consiste um arranjo hexagonal. c) Cada cadeia esta formada por elipsoides de eixo menor 30 nm e eixo maior 60 nm e distância entre elas de D .

Considerando que os fios na literatura geralmente são policristalinos, utilizamos uma cadeia de elipsoides para modelar os fios. Os elipsoides foram adotados com dimensões de 30 nm de diâmetro perpendicular ao eixo do fio e 60 nm ao longo da cadeia. As dimensões aqui escolhidas são sobre o critério de que a maior parte dos fios na literatura são fabricados em membranas de alumina, que quando feitos com ácido oxálico tem poros de 20 nm a 40 nm de diâmetro.

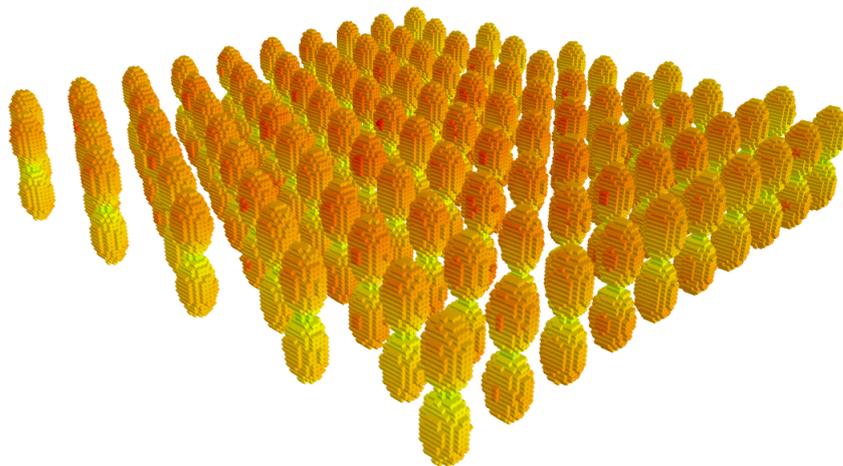


Figura 3.5: Amostra do arranjo de 10×10 nanofios de níquel com um comprimento de 2 elipsoides, discretizado em cuboides de ≈ 4 nm para OOMMF.

A figura 3.4 c) apresenta um esquema mais detalhado do modelo de nanofio utilizado, composto por uma cadeia de elipsoide. Neste caso, a distância D entre as cadeias corresponde

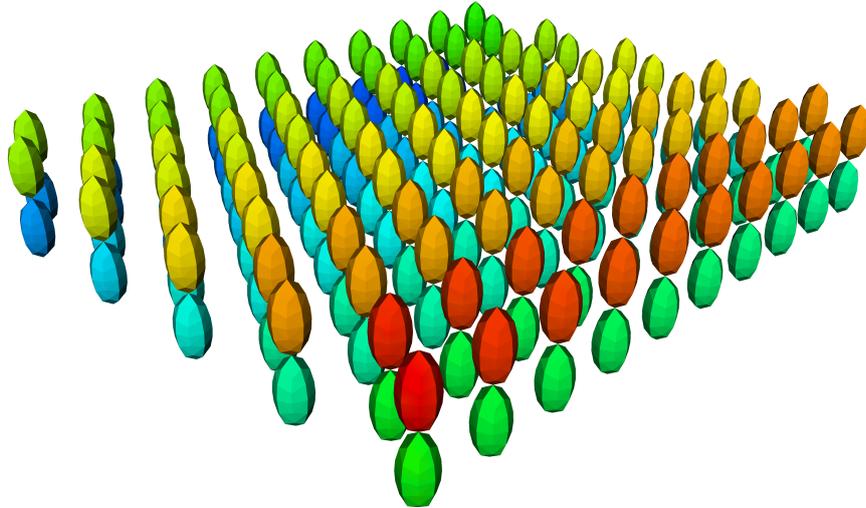


Figura 3.6: Amostra do arranjo de 10×10 nanofios de níquel com um comprimento de 2 elipsoides, discretizado em tetraedros com o programa Gmsh [85] para simular em Nmag.

àquela entre os fios. Para controlar o comprimento L dos fios utilizamos o critério de mudar o número de elipsoides na cadeia. Dessa forma, o comprimento L dos fios é sempre múltiplo de 60 nm. Em nosso trabalho utilizamos os valores de: 60 nm, 120 nm, 180 nm e 240 nm. Os valores usados para os efeitos da distância D entre os fios foram 70 nm, 65 nm, 60 nm, 55 nm, 50 nm, 45 nm, 40 nm e 35 nm, também são encontrados na literatura. Para realizar os estudos em OOMMF, analisamos a discretização de cada elipsoide em celas de 4 nm e de 2 nm. A Figura 3.5 apresenta elipsoides depois de discretizado em DF.

Observemos que à medida que a cela é maior, os contornos do malhado são mais distantes do elipsoide. A Figura 3.6 mostra uma discretização em FD, diferente da FD. Observe que dada a natureza do objeto a ser estudado, os segmentos que delimitam as celas em FE são de tamanhos diferentes por isso, neste método temos uma distribuição dos volumes, que na hora de discretizar com uma malha mais fina, apresentará corrimentos do valor máximo da distribuição e algumas modificações no formato da distribuição. No próximo capítulo, onde apresentamos os resultados, podemos ver com maior detalhe.

Simulação de nanofios de Níquel

Como mencionamos, realizamos estudos em arranjos de nanofios de níquel. Para organizar o estudo, tomamos parâmetros de análise de acordo com os nossos objetivos. Nós consideramos uma amostra feita com um sistema de 100 nanofios em arranjo hexagonal, onde cada um tem estrutura cristalina baseada em cadeias de elipsoides. Neste caso, estamos mudando o comprimento L desde um até quatro elipsoides, os nanofios estão separados a uma distância de 70 nm, cada elipsoide está com uma tamanho de eixo maior de 60 nm e eixo menor do 30 nm esta consideração é tomada da a imagem da Figura 4.1 A). Esta amostra é colocada no plano XY , e aplica-se um campo magnético na direção Z , variando o ângulo de aplicação desde 0° até 90° , para obter a curva de magnetização em função destes ângulos. Num primeiro estudo

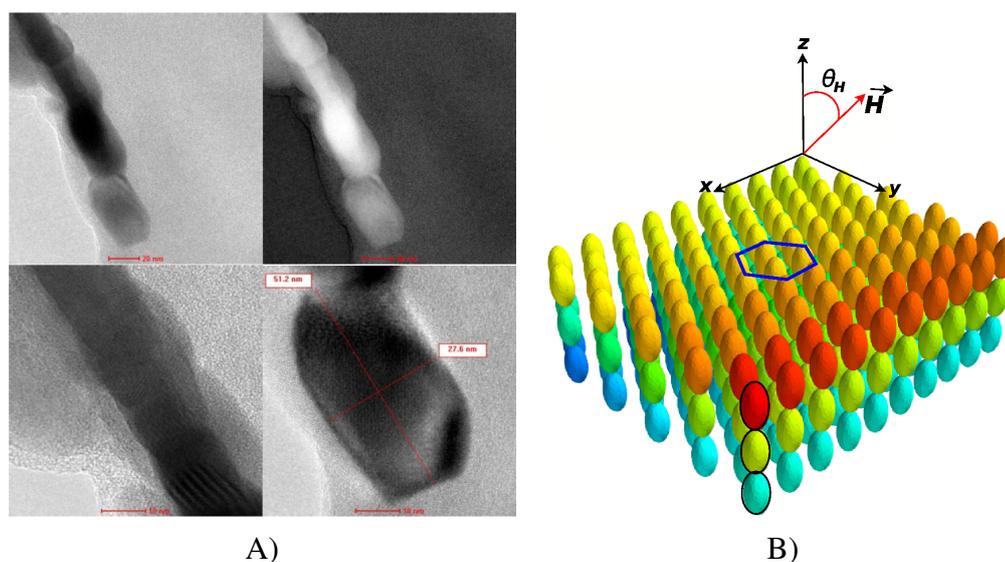


Figura 4.1: A) Microscopia eletrônica de transmissão mostrando a morfologia da amostra de grãos em fios de níquel. [34]. B) Mostra o arranjo que será utilizado no simulação e direção do campo magnético H e o ângulo θ_H .

fizemos uma análise do tamanho da malha tanto para OOMMF como para Nmag. Para isso discretizamos os fios em FD com tamanho de célula menor que o comprimento de troca do níquel. Escolhemos células de 4 nm, para as quais o cálculo devolve resultados em tempos apropriados (3 horas cada curva de magnetização). Para verificar se este tamanho garante resultados representativos fizemos os mesmos cálculos com célula de 2 nm.

Também foi utilizado método de FE por meio do Nmag utilizando tamanho de malha diferentes a fim de verificar a convergência e também comparar o tempo de cálculo e os resultados obtidos com OOMMF e Nmag. Logo depois de escolher o método mais eficiente e o malha, começamos o estudo das influências do comprimento dos fios nas propriedades dos arranjos e também verificamos os efeitos da distância entre os fios no arranjo. Como mencionamos todos os estudos foram feitos, sobre a base do comportamento da coercitividade e da remanência, em função do ângulo do campo aplicado.

4.1 Amostra de Níquel (por diferenças finitas) OOMMF

Para o método de diferenças finitas, primeiro foi feita a simulação do arranjo do 100 nanofios de níquel de um elipsoide, numa matriz hexagonal, no OOMMF, com uma malha cúbica de 2 nm com os parâmetros da Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Propriedades intrínsecas dos materiais e parâmetros da simulação.

<i>Materiais</i>	$M_s(A/m)$	$A(J/m)$	$H_{max}(kOe)$	$l_{ex}(nm)$	<i>Malha(nm)</i>		
					ΔX	ΔY	ΔZ
Ni	413.8×10^3	1.05×10^{-11}	5	7.72	4	4	4
Ni	413.8×10^3	1.05×10^{-11}	5	7.72	2	2	2

Como mencionamos antes, o objetivo aqui é verificar qual seria o tamanho de célula adequado para gerar resultados representativos do sistema. A Figura 4.2 apresenta as curvas de histerese para o arranjo com fios formados por apenas um elipsoide de 60 nm de comprimento. As curvas foram calculadas para ângulos desde 0° até 90° com passo de 10° . As curvas vistas progressivamente nessa ordem apresentam um laço largo e quadrado com campo coercitivo de 1.5 kOe. É importante destacar que este laço é típico de elipsoides semelhante aos trabalhos utilizando o modelo de Stonner. À medida que o campo é inclinado procurando a direção do plano do arranjo, podemos observar um estreitamento da curva e também diminuição do formato quadrado apresentado em 0° . Observe que em 90° , a curva é uma linha sem histerese, semelhante aos resultados de Stonner.

As Figuras 4.3, 4.4 apresentam um resumo do comportamento de H_C e M_R/M_S respectivamente para cada ângulo no arranjo de cadeias de um único elipsoide e com malha de 2 nm obtido com OOMMF.

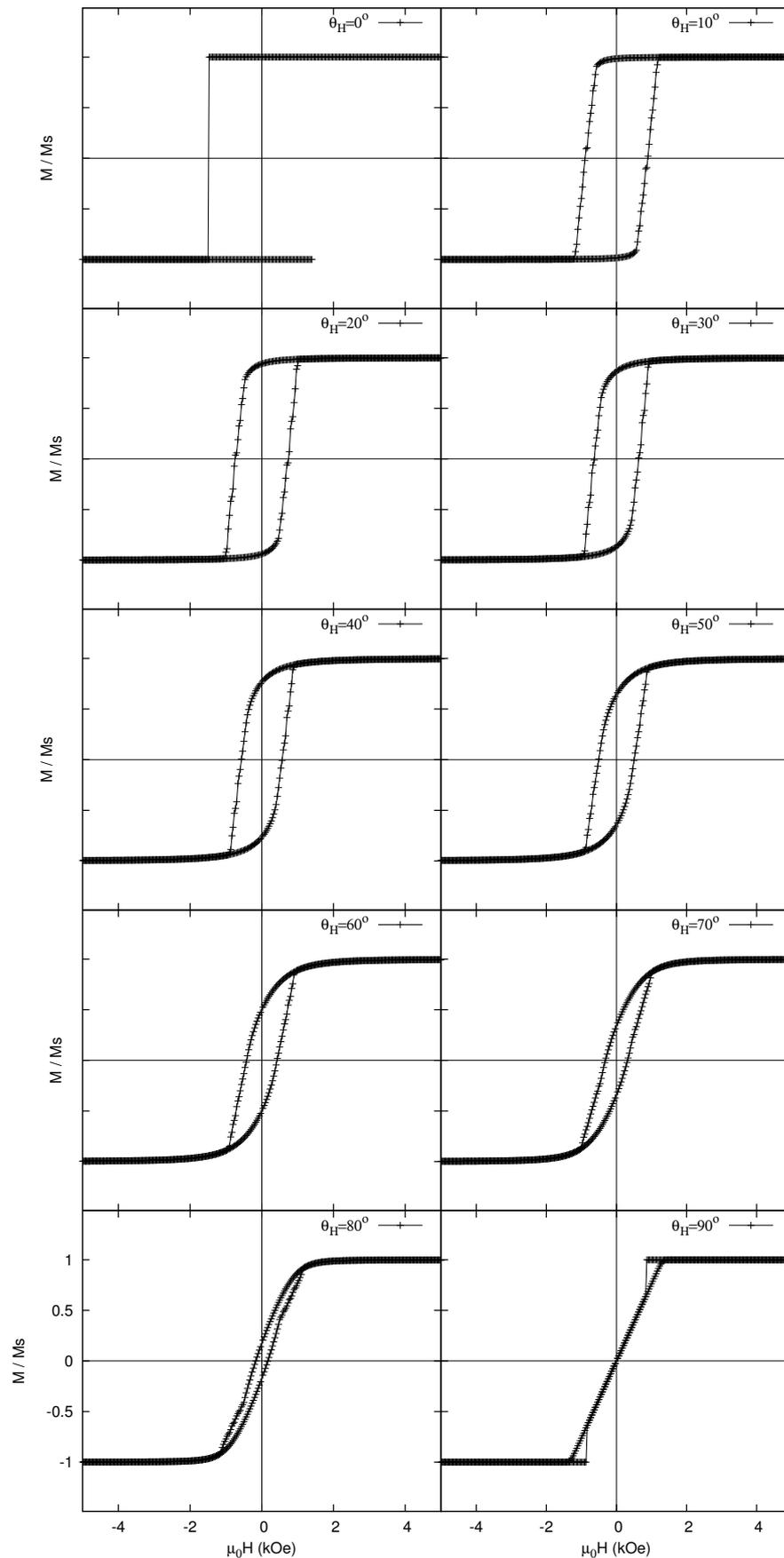


Figura 4.2: Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha 2 nm para o programa OOMMF.

A simbologia na legenda dos referidos gráficos, para identificar as simulações com diferenças finitas adotamos a seguinte simbologia : $cx-ye-Dz$, onde x é o tamanho da célula em nm, y é numero de elipsoides de fio (cada elipsoide tem comprimento de 60 nm) e z é a distância entre os fios em nm (esta distância es medida de centro de eixo de elipsoide á eixo do outro elipsoide) ver Figura 3.4 (c). Olhando para o comportamento nos referidos gráficos podemos ver curvas típicas de sistema uniaxial e variação muito forte no valor de H_C .

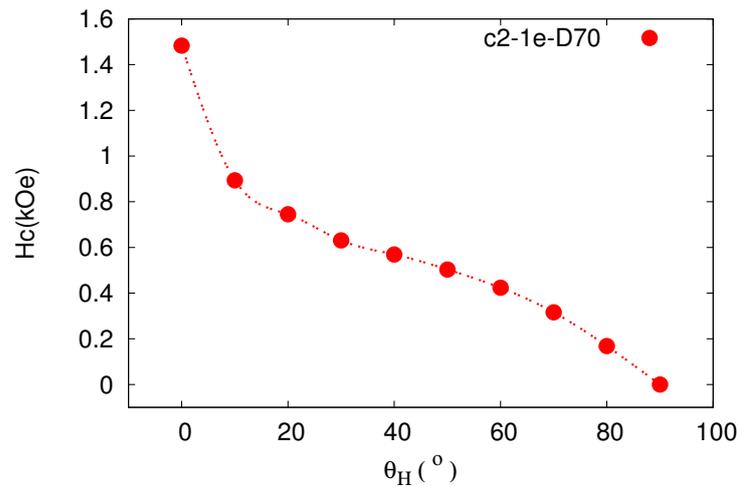


Figura 4.3: Curva de coeritividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coeritividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.2 (para o malha de 2 nm no programa de OOMMF).

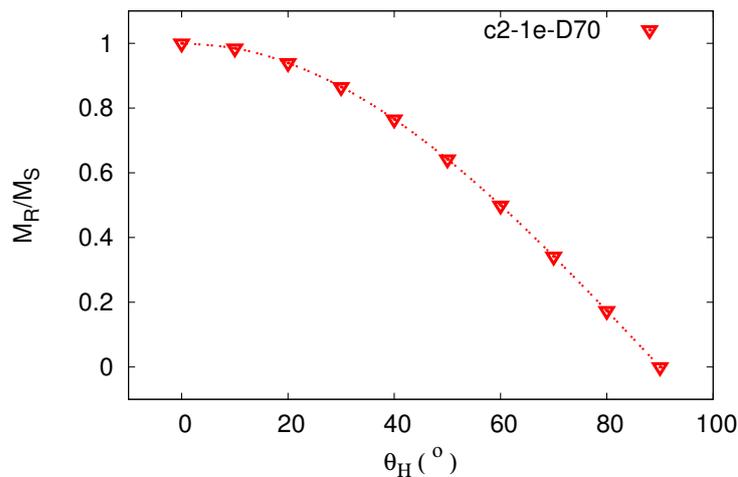


Figura 4.4: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios, A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.2 (para o malha de 2 nm no programa de OOMMF).

É importante mencionar que a diferença entre o valor máximo e o mínimo na curva de H_C em função do ângulo, é um valor que iremos monitorar durante todo este trabalho. Isto porque na literatura são apresentados valores que variam muito de um autor para outro.

Observamos também que a remanência reduzida tem uma queda continua desde 0° até 90° , enquanto que H_C apresenta uma queda abrupta até 30° e depois uma mudança na derivada da curva até H_C atingir o valor nulo. É importante falar, que nos arranjos de nanofios reportados na literatura, H_C nunca tem valor nulo, mesmo para 90° .

Os mesmos cálculos foram realizados em fios de um único elipsoide mas agora com uma célula de 4 nm no OOMMF. Os resultados dos cálculos são apresentados na Figura 4.6. Quando comparamos com as curvas de magnetização obtidas em malha de 2 nm, apresentados anteriormente, podemos observar que há semelhança de uma figura a outra. Esta semelhança é vista para cada ângulo de campo aplicado o que nos leva a pensar que com 4 nm o cálculo é possível sem perder as informações genéricas das amostras.

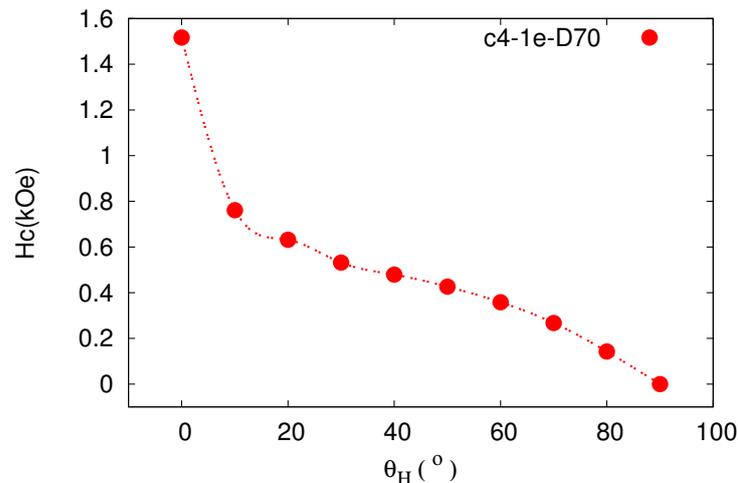


Figura 4.5: Curva de coeritvidade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coeritvidade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura4.6 (para o malha de 4 nm no programa de OOMMF).

É importante mencionar que os cálculos para célula de 2 nm é realizado com tempo de execução de aproximadamente 7 horas cada curva, lembrando que para célula de 4 nm foram de 3 horas. Este é um dos motivos que nos levou a pensar que seria mais adequado a escolha de 4 nm para nossos cálculos. Observando as gráficas das Figuras 4.5 e 4.7 podemos verificar o mesmo comportamento que na amostra com malha de 2 nm, como mencionamos na comparação entre as curvas de magnetização.

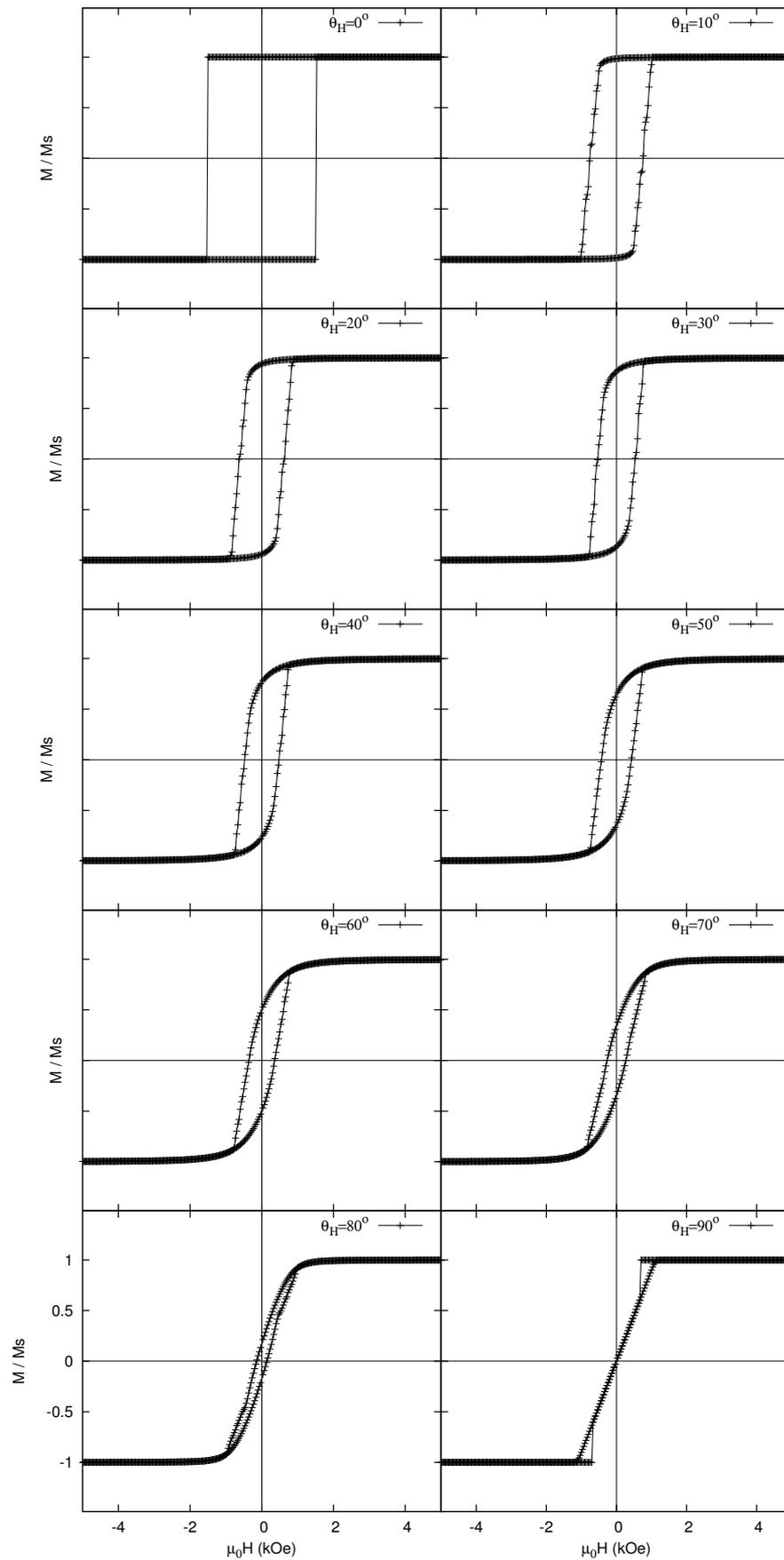


Figura 4.6: Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha 4 nm para o programa OOMMF.

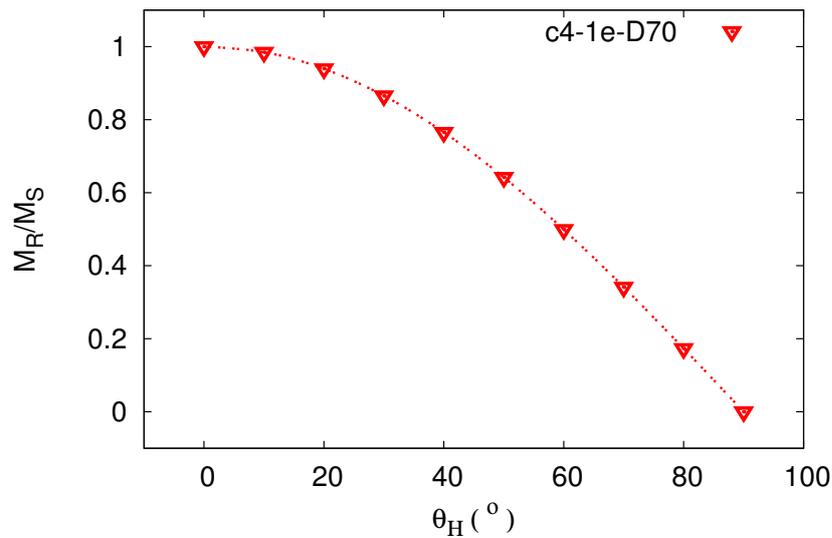


Figura 4.7: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios, A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.6 (para o malha de 4 nm no programa de OOMMF).

Como forma de verificar se com FD em OOMMF era possível obter mudanças aparentes com o aumento do comprimento dos fios, decidimos realizar os cálculos para arranjos de cadeias de dois elipsoides para um malha de 4 nm. Também aproveitamos esta tarefa no sentido de avaliar o aumento do tempo com a aumento de elipsoides no fio. Lembrando que agora o número de nós no malha duplica com a duplicação do comprimento dos fios.

Observamos que as curvas da Figura 4.8 podemos verificar que agora em 0° há uma leve curvatura no momento da mudança do sinal da magnetização global da amostra. Observemos também que os gráficos apresentam mudança em outros ângulos. Observemos que o tempo de cálculo quase duplica para cada ângulo do campo aplicado o qual nos faz concluir que para o estudo de dependência das propriedades com o comprimento dos fios, não é eficiente o trabalho com OOMMF.

Quando olhamos os gráficos das Figuras 4.9 e 4.10, podemos verificar mudança no comportamento de H_C em função do ângulo do campo aplicado. Por outro lado surge a incógnita de utilizar outro código para poder analisar um estudo detalhado como comprimento dos fios em arranjos.

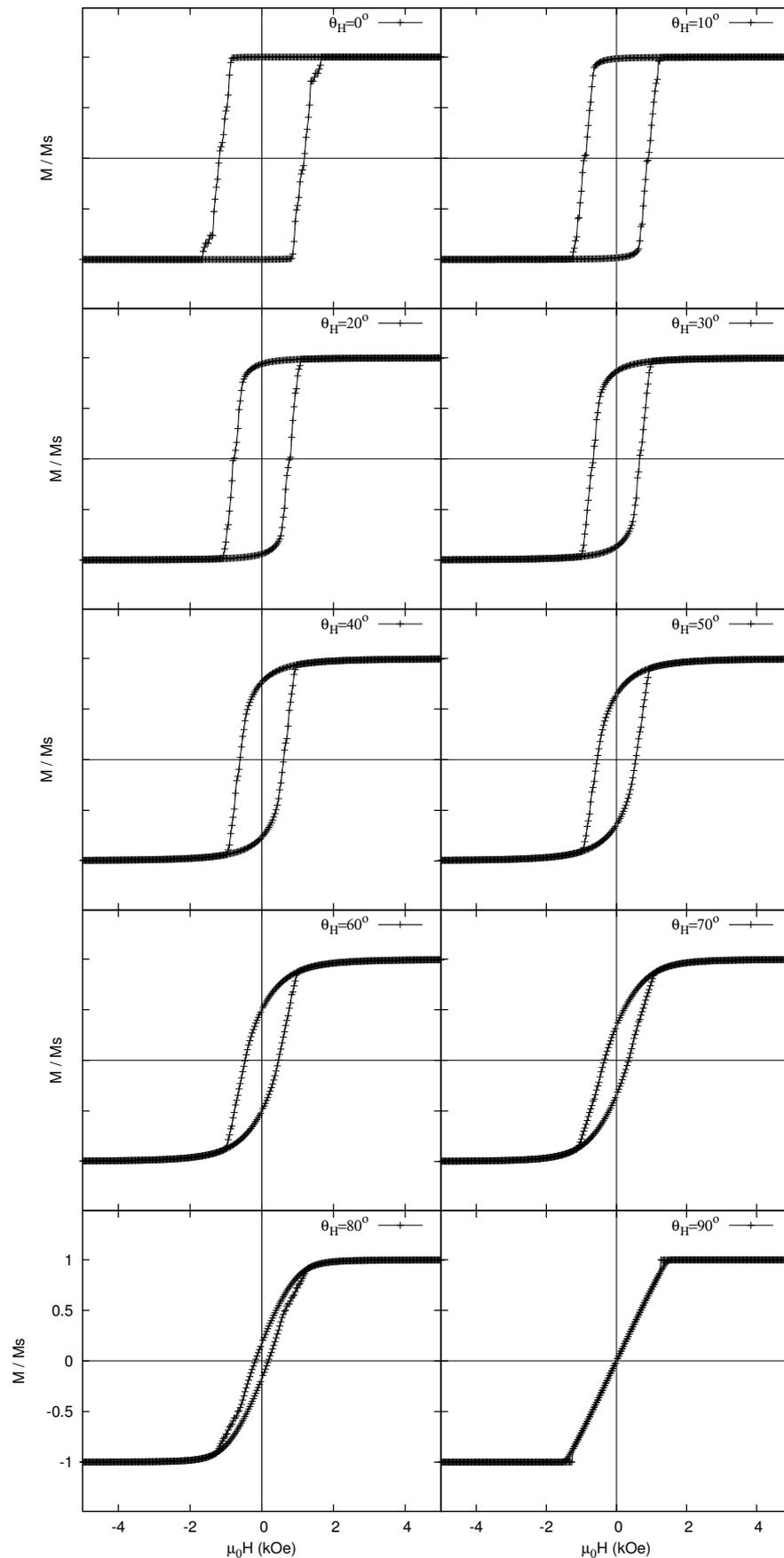


Figura 4.8: Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha 4 nm para o programa OOMMF.

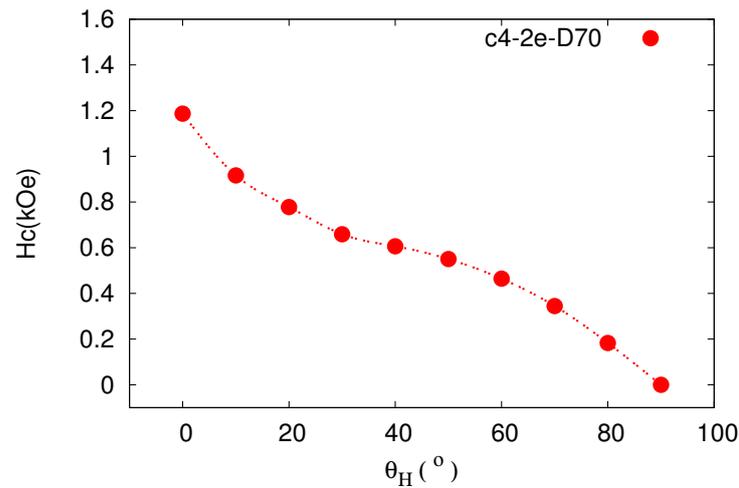


Figura 4.9: Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.8 (para o malha de 4 nm no programa de OOMMF).

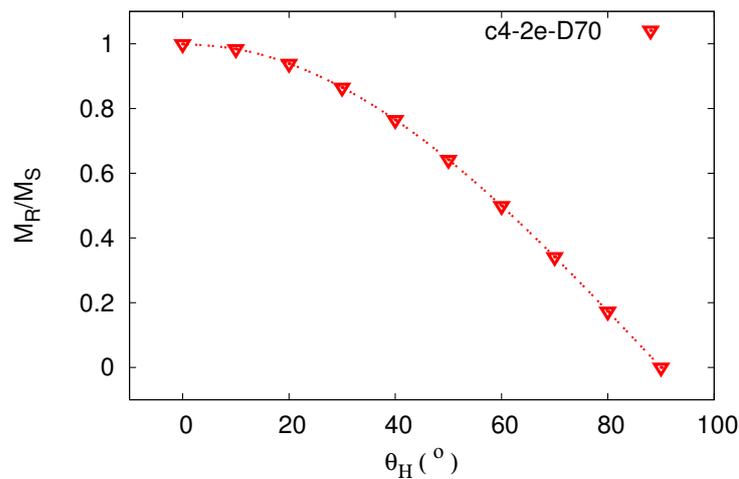


Figura 4.10: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.8 (para o malha de 4 nm no programa de OOMMF).

Para melhor comparar todos os resultados até aqui expostos, a Figura 4.11 apresenta os resultados de dependência da coercitividade H_C com o ângulo do campo aplicado θ_H . Observe que as curvas para arranjo com um único elipsoide apresentam comportamentos muito próximos. A maior diferença entre estas curvas se apresenta entre 20° e 40° e chega um valor de 20%. É importante destacar que é esperada esta diferença, já que em ângulos com estes valores, o sistema se encontra em uma condição geométrica de instabilidade e qualquer mudança pode

ser representativo.

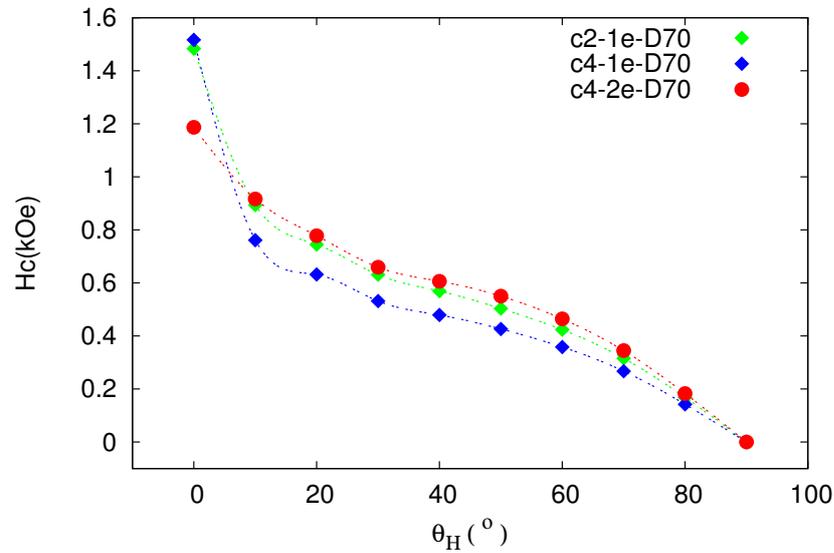


Figura 4.11: Comparação das curvas de coeritividade H_C em função do ângulo do campo aplicado θ_H de 1 elipsoide com malha 2 nm e 4 nm e 2 elipsoides com malha de 4 nm no programa OOMMF.

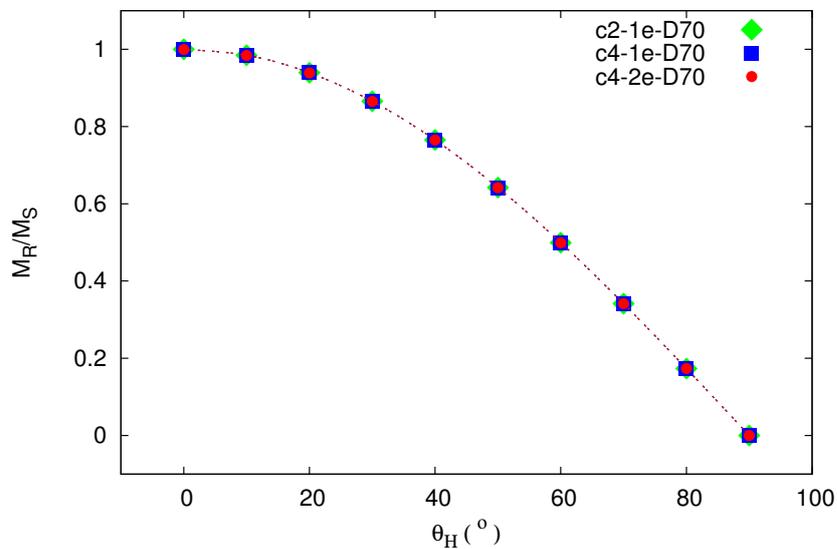


Figura 4.12: Comparação das curvas da razão M_R/M_S em função do ângulo do campo aplicado θ_H para um elipsoide com malha 2 nm e 4 nm e dois elipsoides com malha de 4 nm.

As curvas da razão M_R/M_S em função do ângulo θ_H , são todas com o mesmo comportamento, se sobrepondo todas independentemente do tamanho do malha e do comprimento da cadeia. A Figura 4.12 apresenta estas curvas detalhadamente. Como comentamos, o OOMMF não é eficiente para o cálculo em arranjos de 100 nanofios e tamanhos diferentes. Por esse

motivo, decidimos adotar o Nmag, que se baseia em FE, para executar os mesmos cálculos e monitorar o tempo na geração de cada ciclo de histerese.

4.2 Comparação dos resultados em nanofios de Níquel resolvidos por FD (OOMMF) e FE (Nmag)

Ao comparar os resultados dos cálculos com base nos métodos de diferenças finitas e elementos finitos. Como mencionamos, o trabalho com OOMMF para arranjos de 10×10 nanofios não é viável para o estudo magnético mudando o comprimento. Mesmo sabendo que o método de elementos finitos é mais complicado, tratamos alguns cálculos com Nmag para verificar eficiência nos cálculos. Com a finalidade de tomar um critério de triangulação, adotamos o princípio de trabalhar com volumes aproximadamente iguais aos utilizados no teste com o OOMMF. Sendo assim geramos malhas cujo volume dentro dos nodos é aproximadamente de 8 nm^3 semelhante ao da célula de 2 nm de FD. A distribuição de tamanhos dos arestas para esta malha é apresentado na Tabela B.1.

Da mesma forma foi gerado um malha cujo volume comparado com da célula de 4 nm gerado em FD. Este malha depois de feito apresentou uma distribuição de tamanhos de arestas relatado na Tabela B.1. Para também fazer o malha correspondente correspondente ao de 4 nm, mas em fios compostos por dois elipsoides, geramos uma distribuição de distâncias que é semelhante á anterior. Isto mostra que a geração do nosso malha é reproduzível independente do tamanho dos fios aqui estudados. Os valores podem ser observados na Tabela B.2, onde podemos verificar a semelhança com anterior.

Os gráficos na Figura 4.13 apresentam as curvas geradas com a maior das malhas aqui mencionada. Observemos que em 0° a curva tem o mesmo formato quadrado apresentado nas mesmas curvas calculadas em OOMMF e que com o aumento do ângulo a curva começa um estreitamento semelhante ao existente nos cálculos por FD. Da mesma forma, a curva de 90° é uma linha passando pela origem. Mais importante do que tudo aqui é verificar o comportamento de H_C e M_R/M_S como função do ângulo de aplicação do campo.

As curvas dos gráficos 4.14 e 4.15 apresentam as referidas dependências angulares, que mostram o mesmo comportamento visto nas curvas obtidas por FD. Principalmente vemos a mudança na derivada da curva de H_C vs θ_H , que também começa com um valor grande em 0° de 1.15 kOe e apresenta uma queda forte até 40° onde inicia uma diminuição suave até zero.

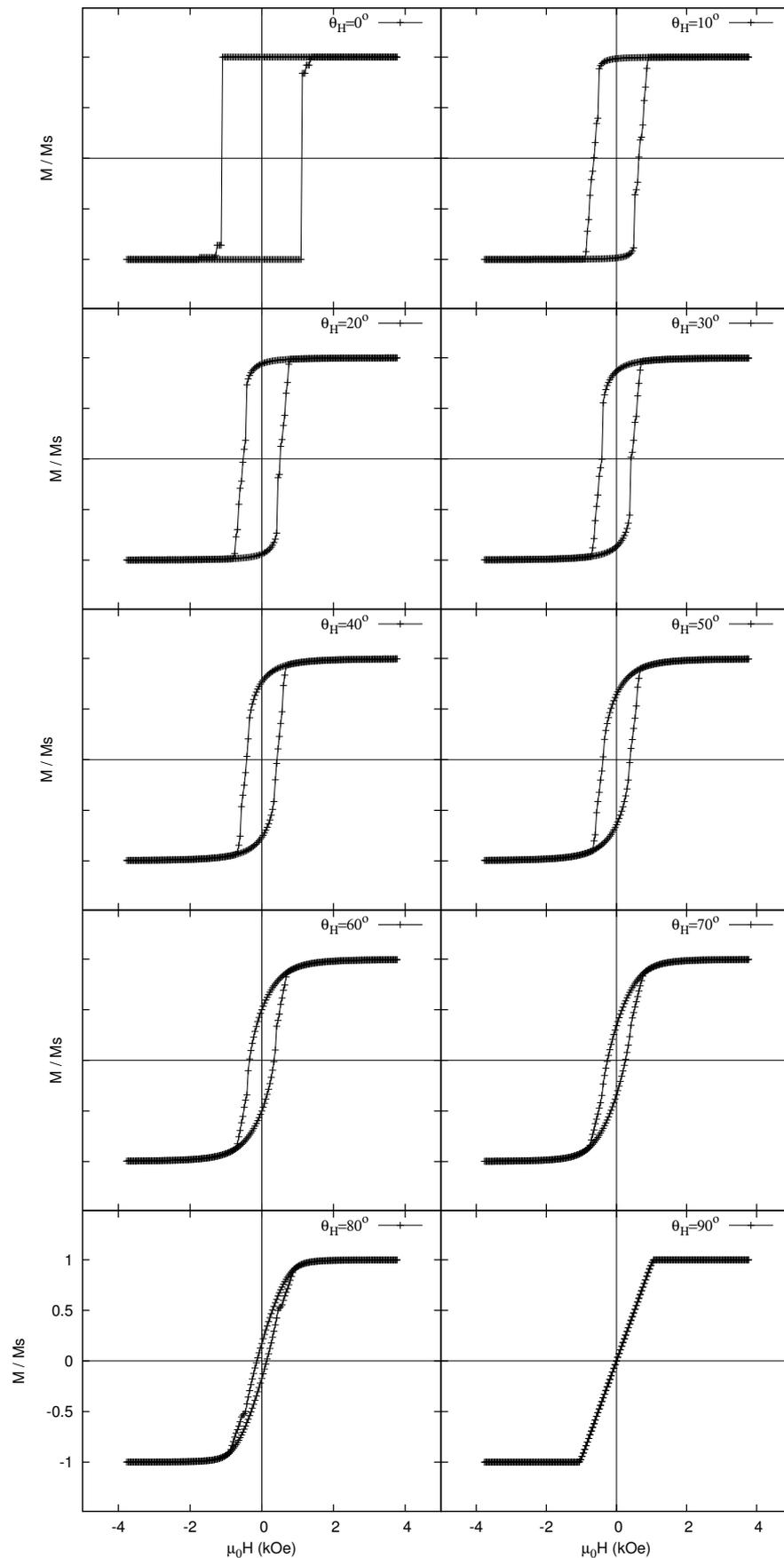


Figura 4.13: Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.

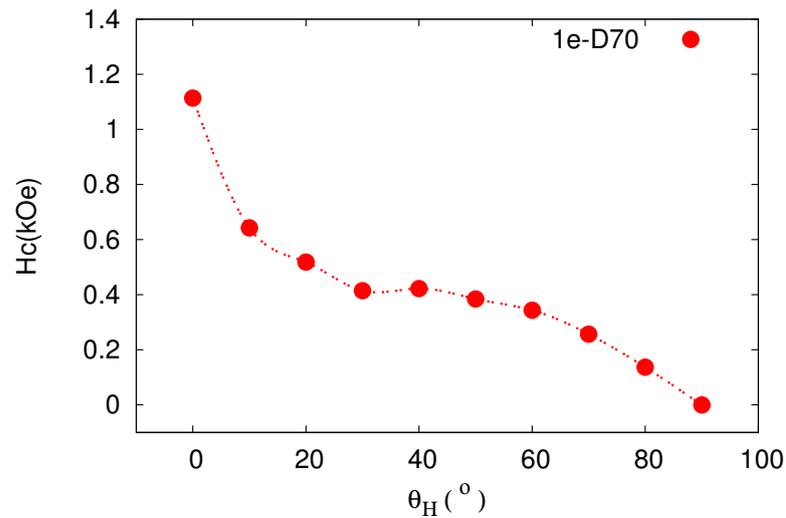


Figura 4.14: Curva de coeritividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coeritividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.13 ,no programa de Nmag.

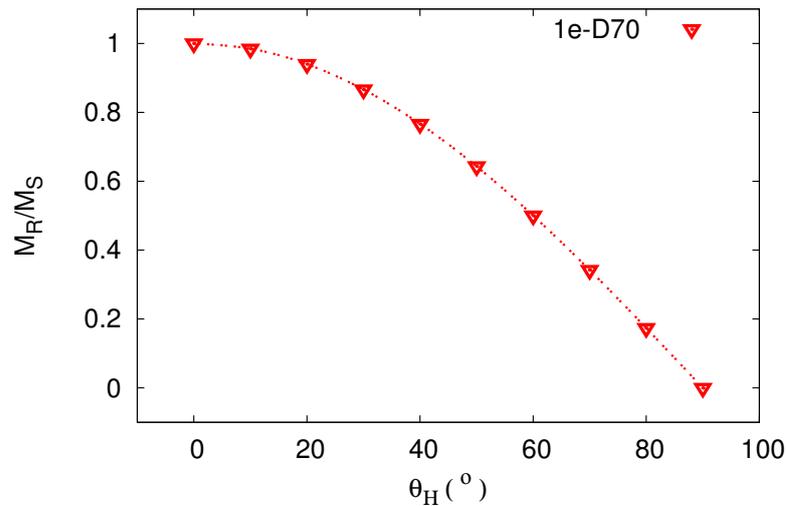


Figura 4.15: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.13, no programa de Nmag.

As curvas histerese magnética geradas para o arranjo 10×10 e dois elipsoides (comprimento $L = 120$ nm) são apresentadas na Figura 4.16 apresentam de um modo geral um comportamento, que quando comparado ao arranjo de um elipsoide (comprimento $L = 60$ nm), apresenta se uma grande diferença em 0° . Esta consiste basicamente, num estreitamento da curva e que seguramente está associado com efeitos de interação entre elipsoides.

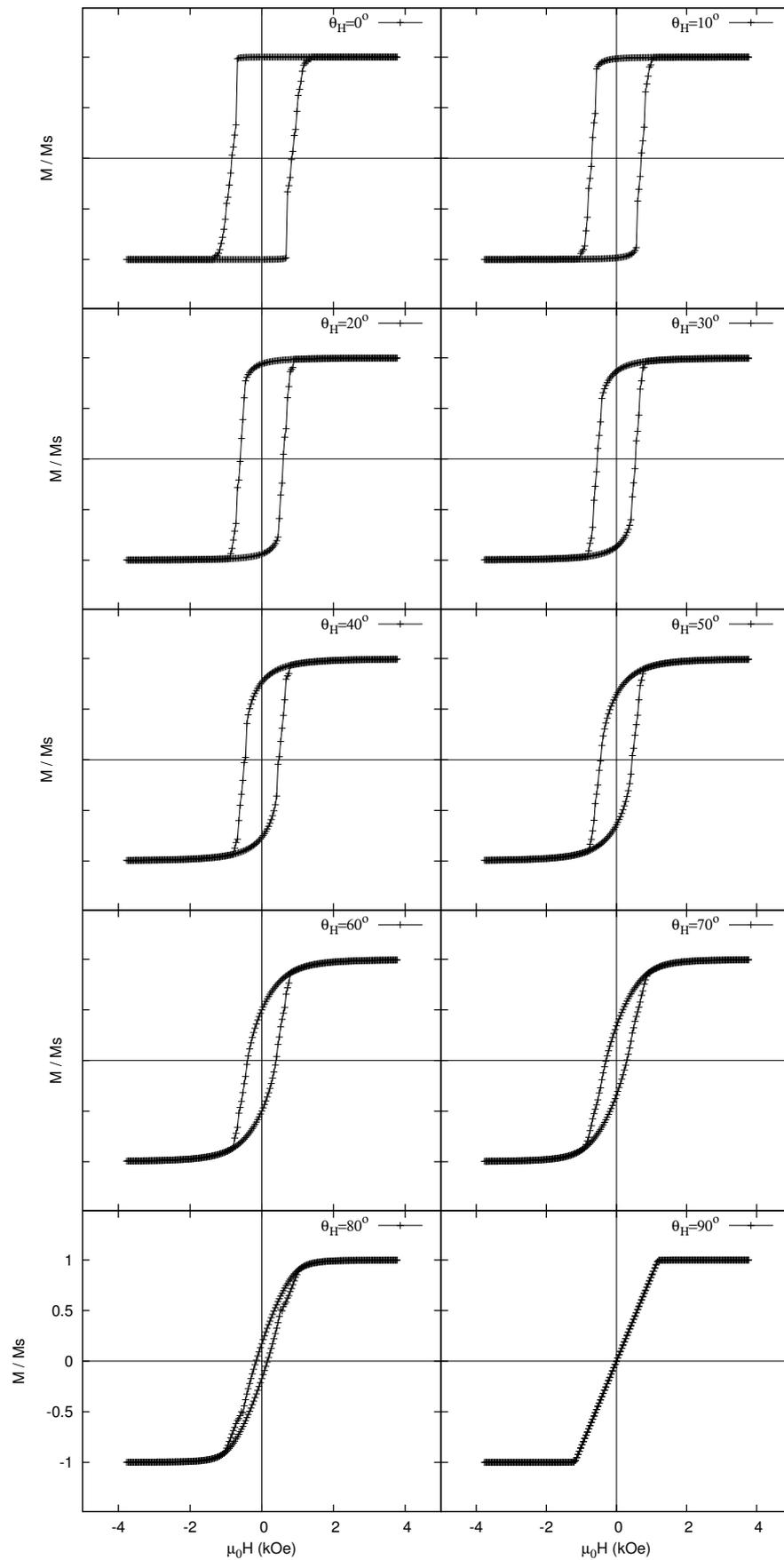


Figura 4.16: Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.

Observando os valores apresentados nas Figuras 4.51 e 4.18, podemos ver que neste caso há mudanças significativas em valou máximo de H_C para 0° . Este fato é de grande importância de acordo com a discussão que apresentamos mais na frente.

Observando as curvas de remanência reduzida, podemos verificar que há novamente sobreposição dos curvas independentemente do tamanho dos fios. Os resultados para o malha menor, não são aqui apresentados já que o tempo de cálculo é extremamente elevado e não é viável o uso deste malha em Nmag para 10×10 nanofios de um elipsoide. Certamente, o aumento de elipsoides geraria um aumento no tempo de cálculo.

Levando em conta estes comentários vale ressaltar que o tempo para gerar as curvas dos últimos gráficos é estremadamente pequeno quando comparado ao resto dos cálculos aqui mencionados. No caso do arranjo de fios formados por um único elipsoide, todas as curvas de magnetização foram calculadas em apenas 3 horas. Este fato é de grande importância neste trabalho. Devido ao fato que para fios mais longos, compostos por um número maior de elipsoides os cálculos mesmo aumentando em tempo de execução, não deverão ser extremamente demorados. Sendo assim, vale a pena fazer uma análise cuidadosa de todos os resultados até o momento gerados.

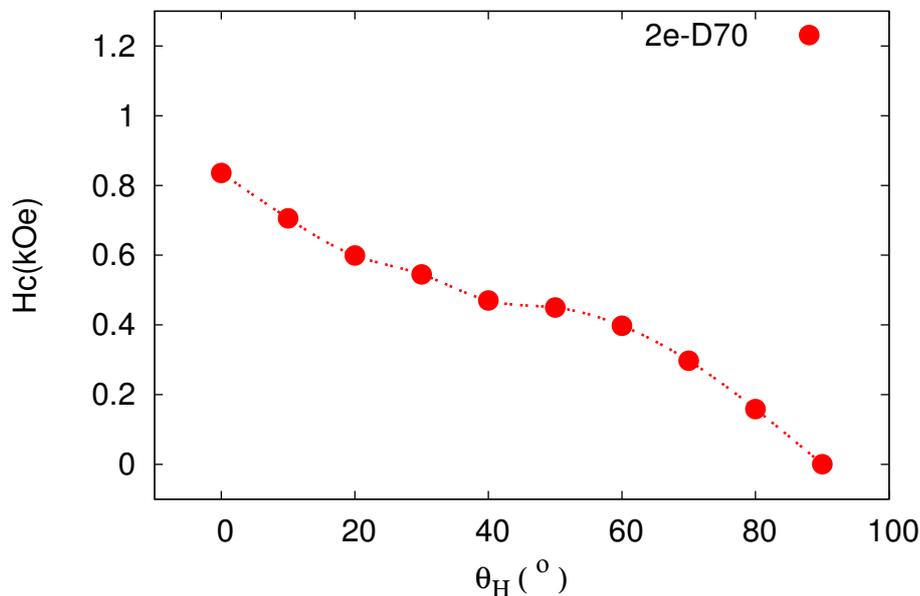


Figura 4.17: Curva de coeritividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coeritividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.16, no programa de Nmag.

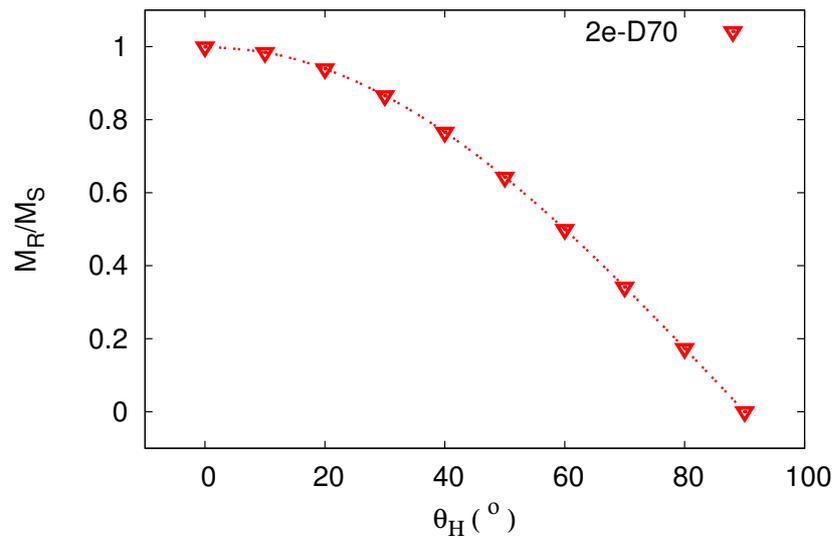


Figura 4.18: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoide) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.16, (no programa Nmag).

Para melhor comparar os resultados com FE e FD em cada malha utilizado, juntamos os gráficos de remanência reduzida obtidos até aqui na Figura 4.19. No mencionado gráfico, podemos observar que todas as curvas são exatamente sobrepostas, sendo assim teremos que realizar outras comparações.

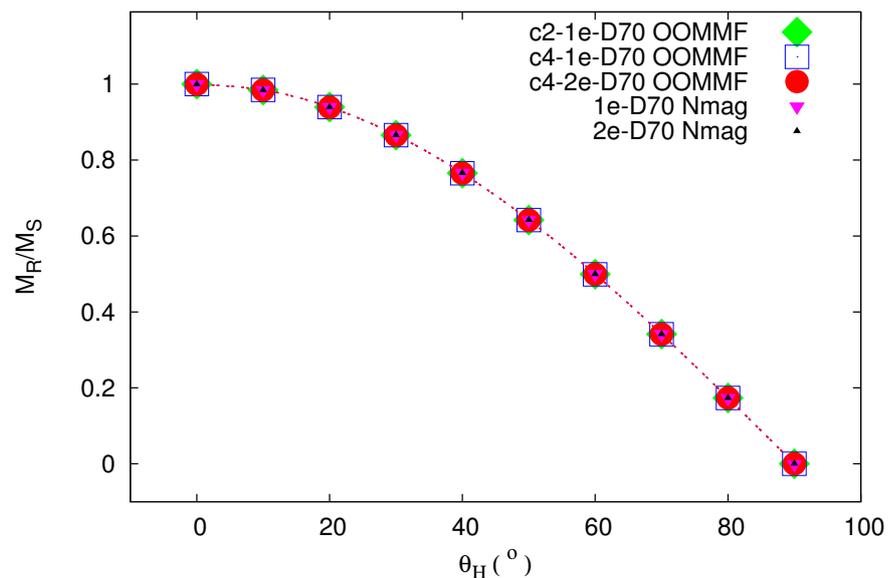


Figura 4.19: Comparações das curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm e 120 nm (1 elipsoide e 2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios, A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese que foram feitas com o programa OOMMF e o programa de Nmag.

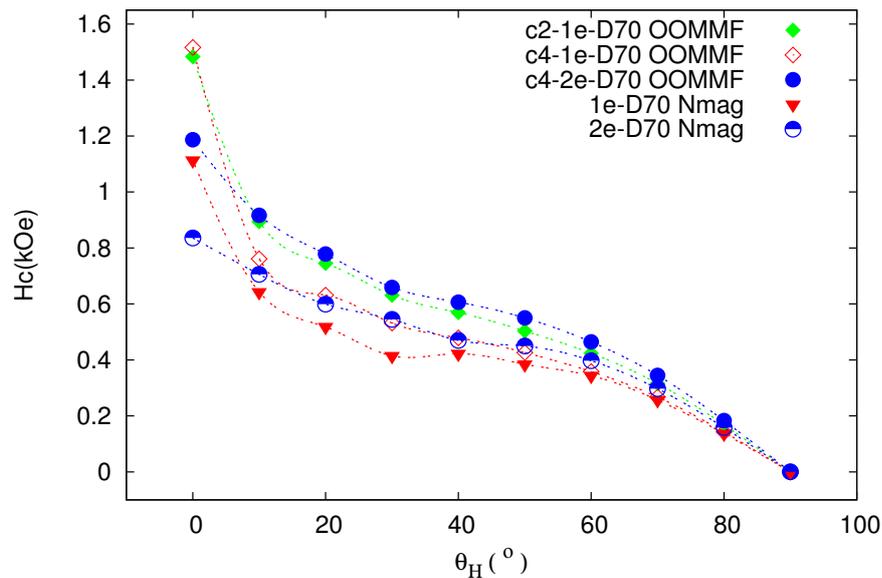


Figura 4.20: Comparações das curva de coeritividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm e 120 nm (1 elipsoide e 2 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios, A coeritividade H_C é obtida através das curvas de histerese que foram feitas com o programa OOMMF e o programa de Nmag.

Nas curvas de H_C vs θ_H da Figura 4.20 podemos observar como se comporta cada malha em relação ao campo coercitivo. Observando a legenda, as curvas claras representam o cálculo para FD em cadeias de um único elipsoide. As curvas de triângulo invertido (60 nm) e de círculo de duas cores (120 nm) apresentam o resultado para a mesma amostra em FE. Da comparação entre as duas por FD, já feita anteriormente, podemos escolher a de 4 nm pelo fato de um tempo de cálculo viável. Por outro lado, quando aumentamos o número de elipsoides na cadeia, o tempo deveram aumentar consideravelmente e OOMMF não é eficiente. Quando comparamos as duas curvas para FD com a curva de triângulo invertido, podemos observar que mesmo com valores menores, o comportamento é reproduzido. No mesmo gráfico, as arranjos de cadeias de dois elipsoides apresentam dependência semelhante com os valores reduzidos. Por uma parte é difícil escolher o método a ser utilizado tendo em conta apenas o tempo de cálculo. Por outra parte, os valores reportados na literatura para fios curtos mostra sue coeritividade de 1 kOe [47].

Na Figura 4.21 segue a dependência de H_C com θ_H para fios de níquel eletrodepositados em membranas de alumina. Observe que neste caso o valor de H_C em 0° é de 947 Oe. Outros trabalhos tem apresentado valores baixos motivo pelo qual tentamos entender os mecanismos que influenciam o comportamento de H_C vs θ_H .

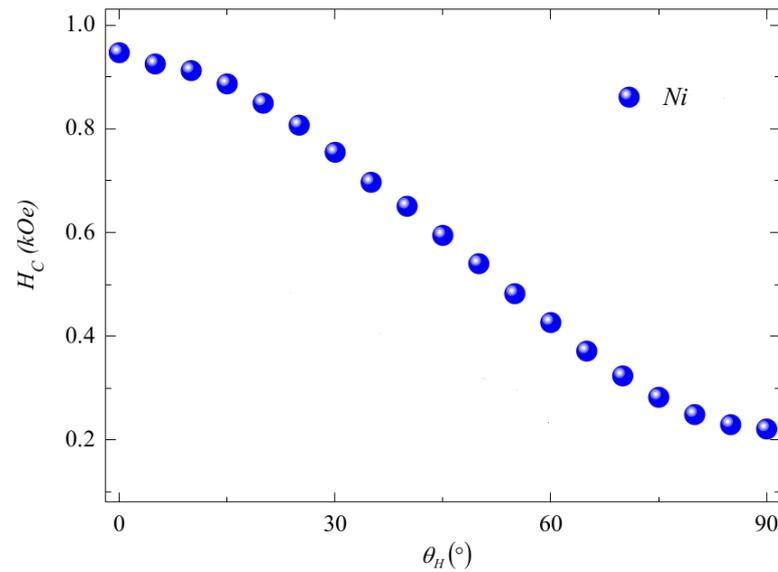


Figura 4.21: Curvas experimentais de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H dos nanofios de níquel obtidos de nosso laboratório [47].

Além dos pontos aqui mencionados, podemos voltar à malha que origina os cálculos. Observando os valores, a malha de 4 nm em relação ao diâmetro de 30 nm gera um erro na superfície geométrica do elipsoide que em FE não é tão crítico. Como podemos ver na Figura 3.6 em FE a geometria é melhor reproduzida. O ponto de contato muda de FE para FD. Sendo assim escolhemos para o nosso estudo o Nmag a fim de poder gerar cálculos em nanofios curtos arranjados hexagonalmente.

4.3 Nanofios de Níquel com o método do elementos finitos Nmag

Mostramos aqui o estudo por FE da dependência angular de H_C e M_R em arranjos de nanofios. Voltando ao comportamento apresentado na curva da Figura 4.21 obtida nas medidas de amostra real de nanofios de níquel vemos dois aspectos importantes. Um deles é o baixo valor de H_C em 0° . Outro é que o comportamento da curva não correspondem com os reproduzidos até aqui neste trabalho. Estamos aqui nos referindo à queda abrupta até 40° e ao leve decaimento observado no comportamento angular de H_C para a amostra formada por fio de um único elipsoide. Além disso, quando examinamos as medidas de M_R/M_S em função do ângulo, vemos para esta amostra, que o valor em 0° é muito menor que a unidade.

Diversos trabalhos atribuir om este comportamento a um modo transversal que se propaga pelos fios e origina reversão dos momentos da amostra. Por outro lado, muitos trabalhos repor-

tam características angulares de H_C para fios supostamente iguais, resultado este que é suficiente à finalidade de estudar estes comportamentos numericamente. Propomos daqui para frente, apresentar os resultados de cálculos de curvas de magnetização em nossos arranjos e fazer do duas mudanças. Uma delas seria o comprimento dos fios como já mencionamos, isto também acompanhado da mudança na distância entre os fios no arranjo.

4.3.1 Variação do comprimento dos nanofios

Nesta subseção apresentamos os resultados dos cálculos em arranjos mudando o comprimento dos fios do arranjo por Nmag. A mudança é feita até no máximo quatro elipsoides no fio, para um comprimento total de 240 nm da cadeia de elipsoides. A Figura 4.23 apresenta as curvas obtidas para fios compostos por três elipsoides, lembrando que os resultados de um e dois elipsoides já foram apresentados na seção 4.2.

Observando os gráficos nas Figuras 4.22 e 4.24 podemos verificar que além de uma pequena mudança na derivada na curva da razão M_R/MS , há variações no valor de H_C em 0° , quando comparados com o valor pra arranjos de nanofios de um e dois elipsoides. Este resultado é relevante pois há indícios de que a estrutura de elipsoides pode ser capaz de gerar resultados compatíveis com os experimentos. Resultados estes que não foram gerados nos trabalhos que simulam os fios cilíndricos perfeitos.

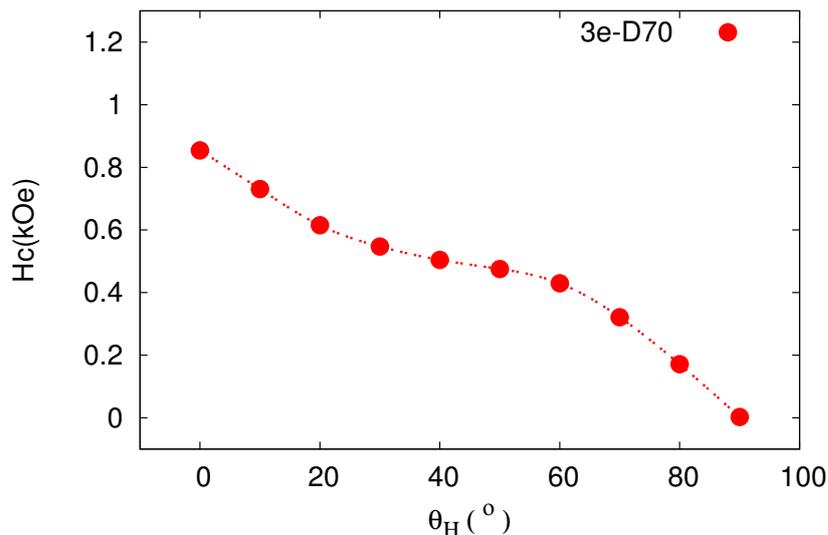


Figura 4.22: Curva de coeritividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 180 nm (3 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coeritividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.23 (no programa de Nmag).

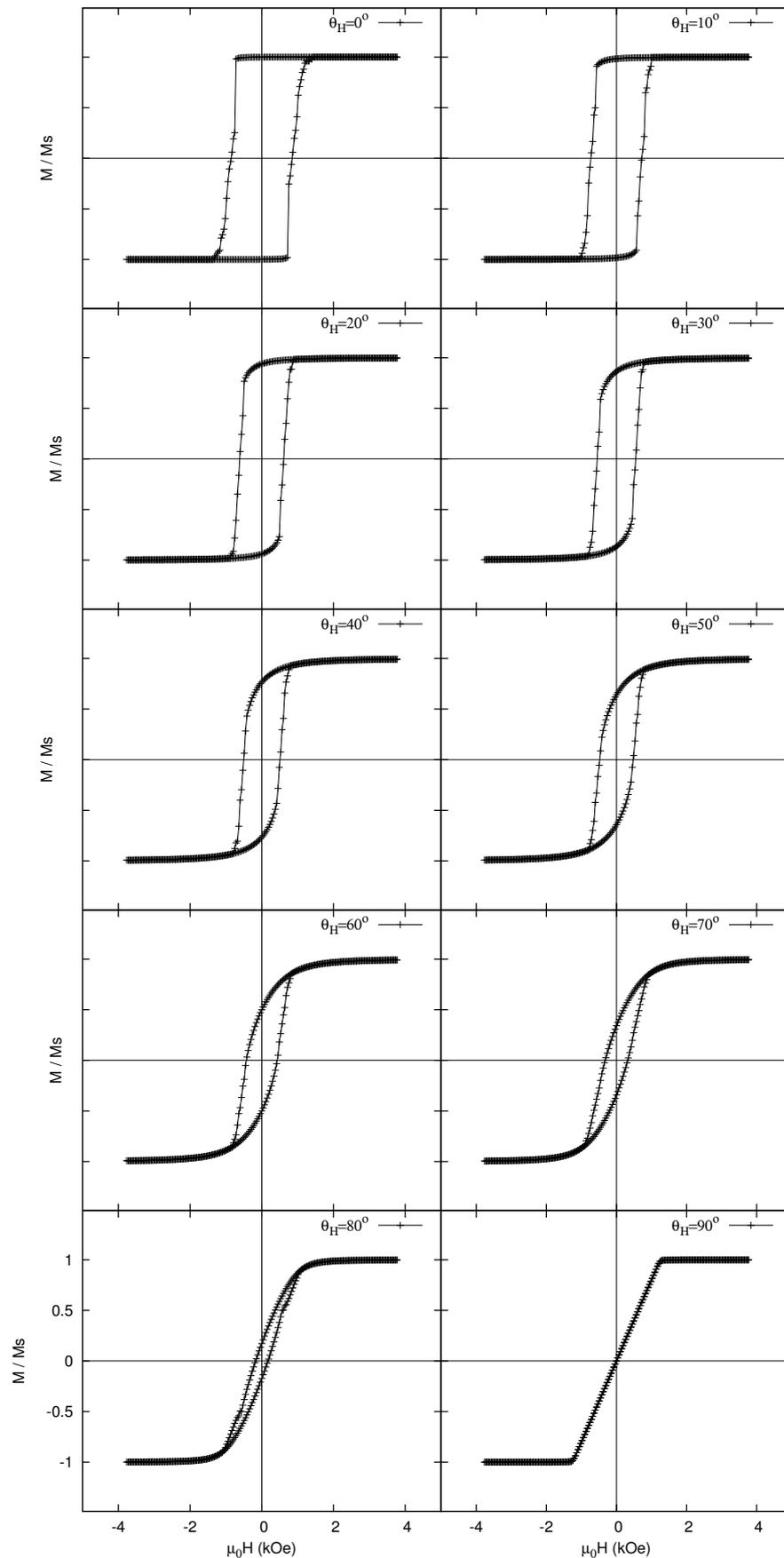


Figura 4.23: Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 180 nm (3 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.

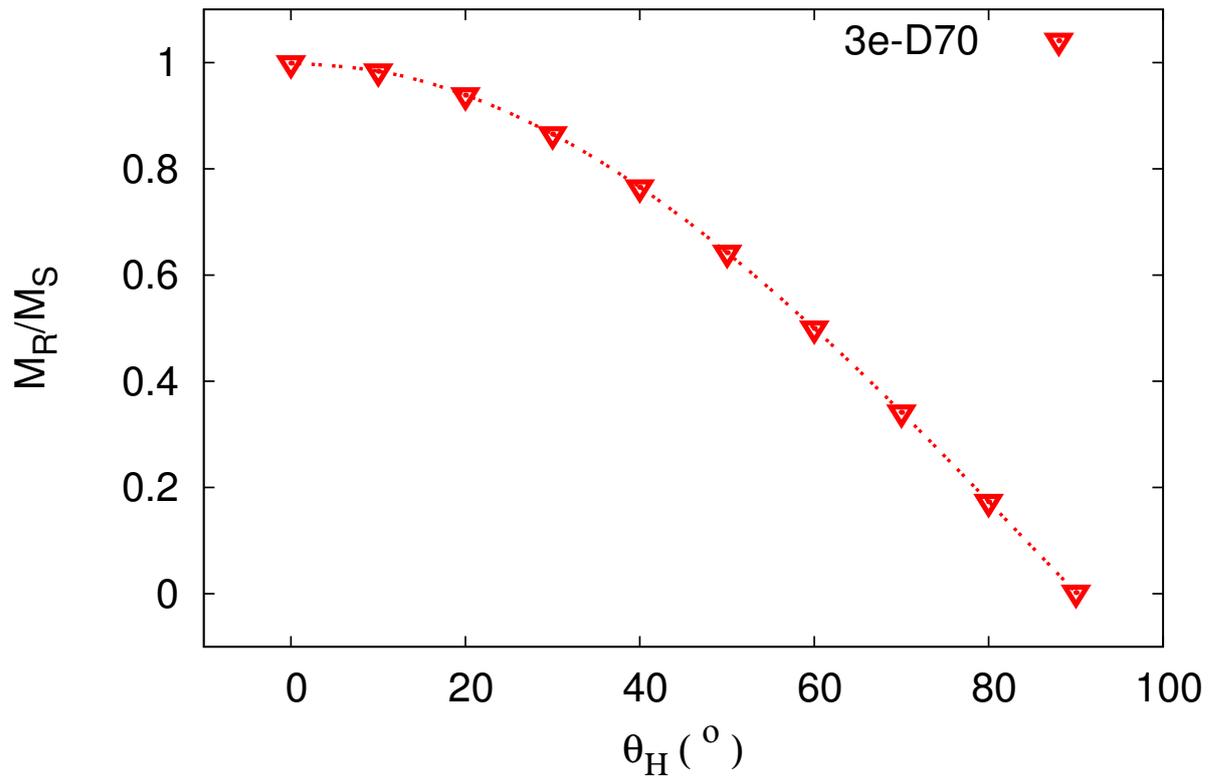


Figura 4.24: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 180 nm (3 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.23 (no programa Nmag).

As curvas de magnetização para o arranjos de 10×10 nanofios formados por um comprimento quatro elipsoides ($L = 240$ nm) são apresentados nos gráficos da Figura 4.25. As grandes mudanças destes gráficos quando comparados com os gerados para nanofios curtos, são basicamente os mesmos valores encontrados para H_C .

Observamos também que em 0° a curva apresenta um formato mais reto (menos inclinação) do que as curvas em 0° de fios mais curtos. A Figura 4.25 apresenta resultados das curvas histerese magnética geradas para o arranjo 10×10 para 4 elipsoides de comprimento ($L = 240$ nm). Observe que nas Figuras 4.26 e 4.27, os gráficos apresentam comportamentos que vão mudando em relação aos do fio de um elipsoide por exemplo.

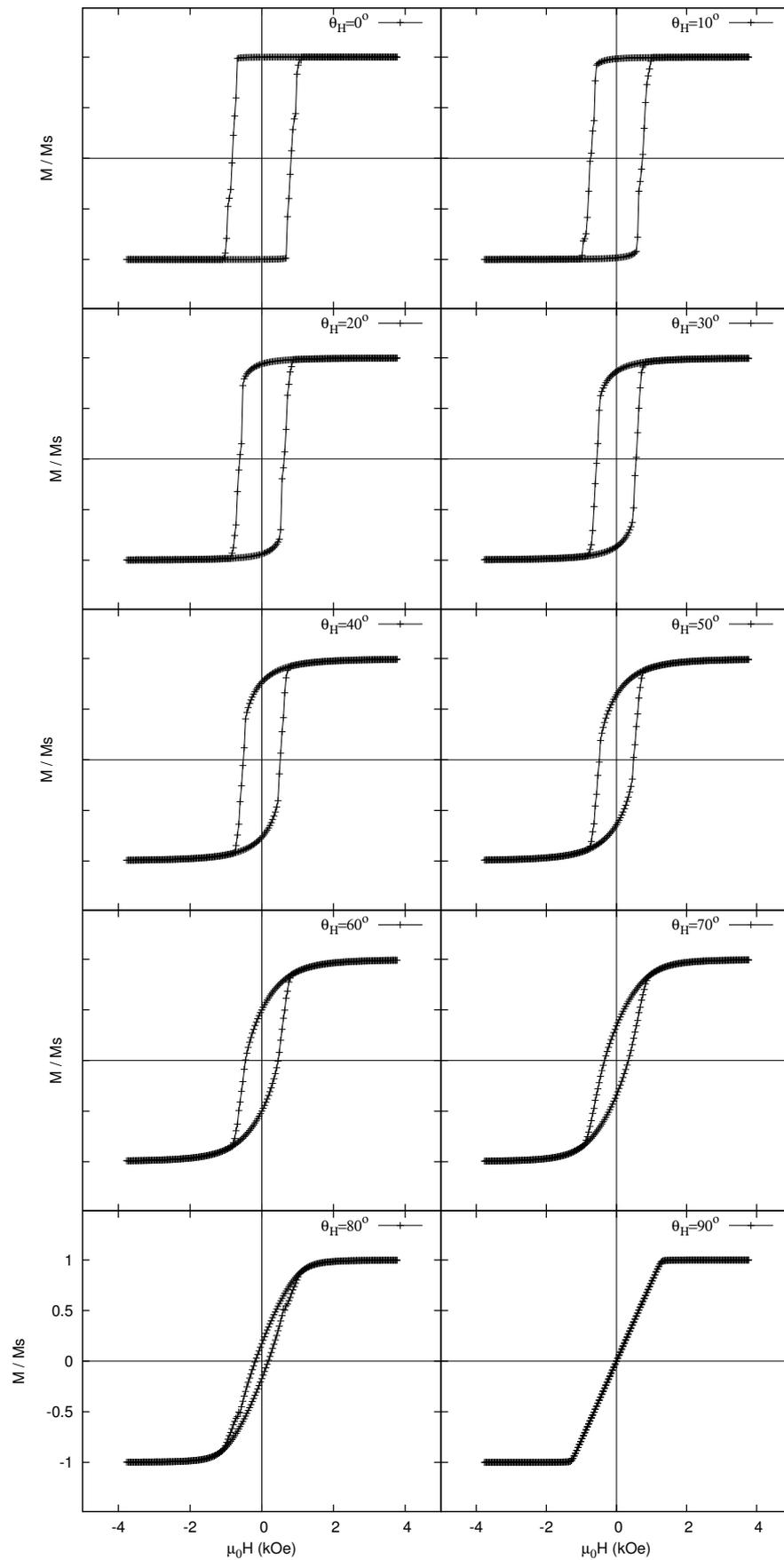


Figura 4.25: Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 240 nm (4 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.

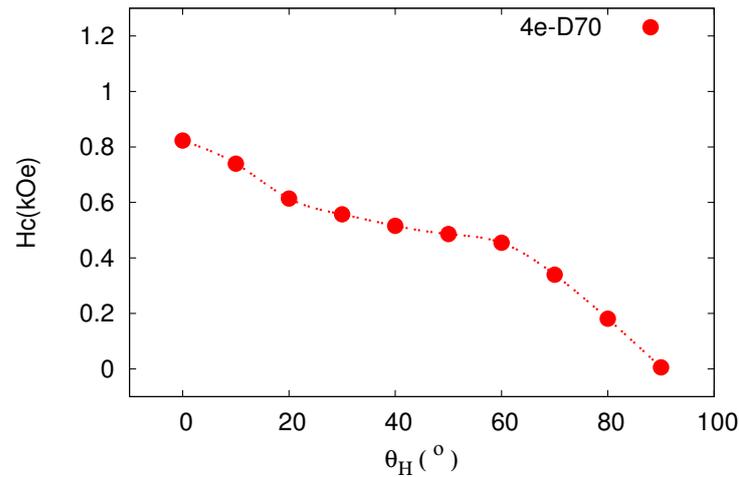


Figura 4.26: Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 240 nm (4 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.25 (no programa de Nmag).

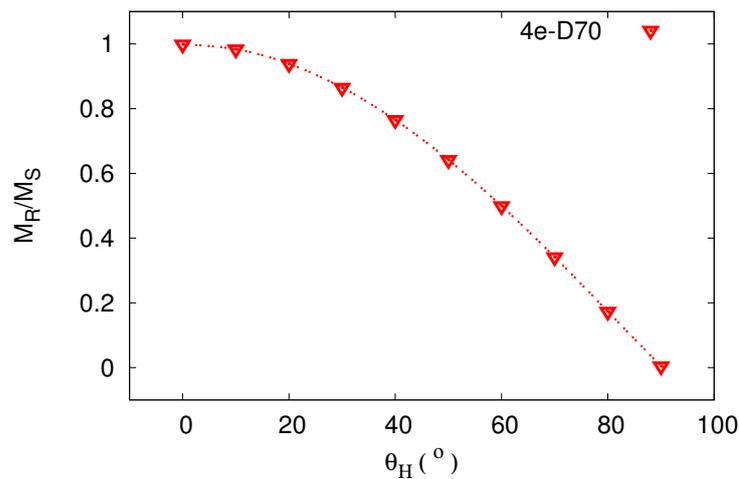


Figura 4.27: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 240 nm (4 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.25 (no programa Nmag).

A curva para da razão M_R/M_S vai adotando um formato mais plano, o que pode ser devido às interações dipolares entre fios e também à dos elipsoides entre se. A curva de H_C vs θ_H se apresenta neste caso com um formato mais diferente ainda ao do nanofio do comprimento de $L = 60$ nm (um elipsoide) o valor em 0° é cada vez menor.

Para melhor entender os comentários anteriores, primeiramente se apresentam os resultados para dependência de H_C Figura 4.28. Observe que em baixos ângulos a coercitividade tem uma diminuição brusca em 0° e para o resto das orientações o valor de H_C aumenta suavemente

com uma convergência aparente com uma curva para fios longos. É provável que para obter comportamento semelhante aos experimentais como o da Figura 4.21 seria preciso mudar a elipticidade dos elementos da cadeia. Por outro lado, outros trabalhos nossos [34,47] mostram que a mudança somente ocorre no valor máximo, enquanto o comportamento segue sendo o mesmo.

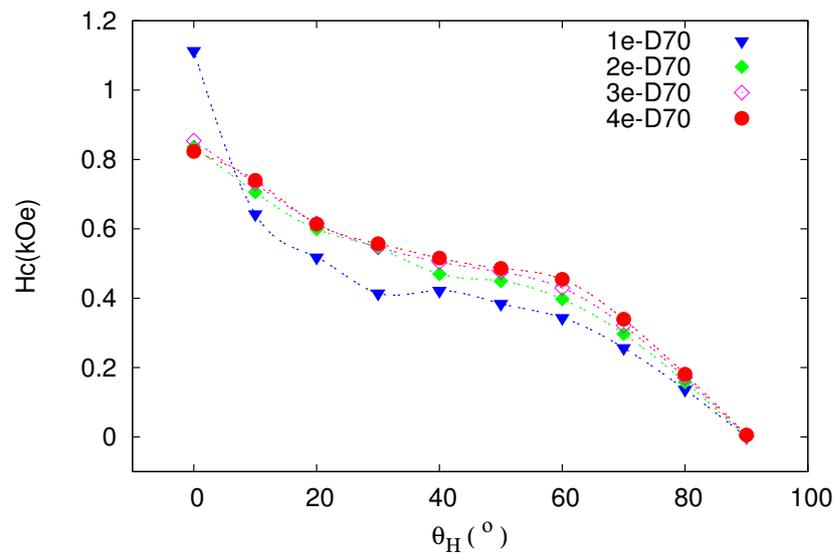


Figura 4.28: Comparações das curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm, 120 nm, 180 nm e 240 nm (de 1 até 4 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios.

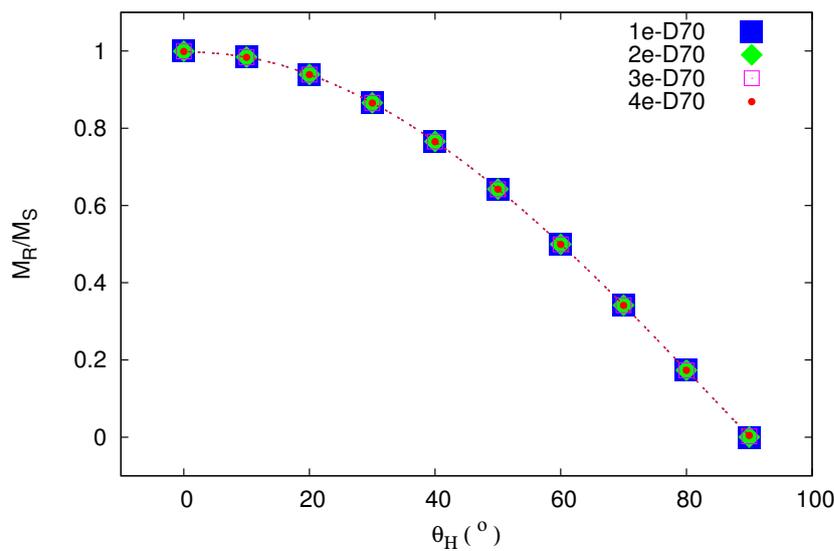


Figura 4.29: Comparações das curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm, 120 nm, 180 nm e 240 nm (de 1 até 4 elipsoides) com uma separação de 70 nm entre os nanofios.

Para outro lado sabemos, que as interações dipolares são sensíveis à distância entre fios. Além disso a Figura 4.29 não mostra mudança aparente o que faz pensar que não seria possível reproduzir os experimentos. Vemos também que as curvas experimentais da Figura 4.30 que a derivada de M_R/M_S vs θ_H muda em altos ângulos, comportamento que não vemos até o momento.

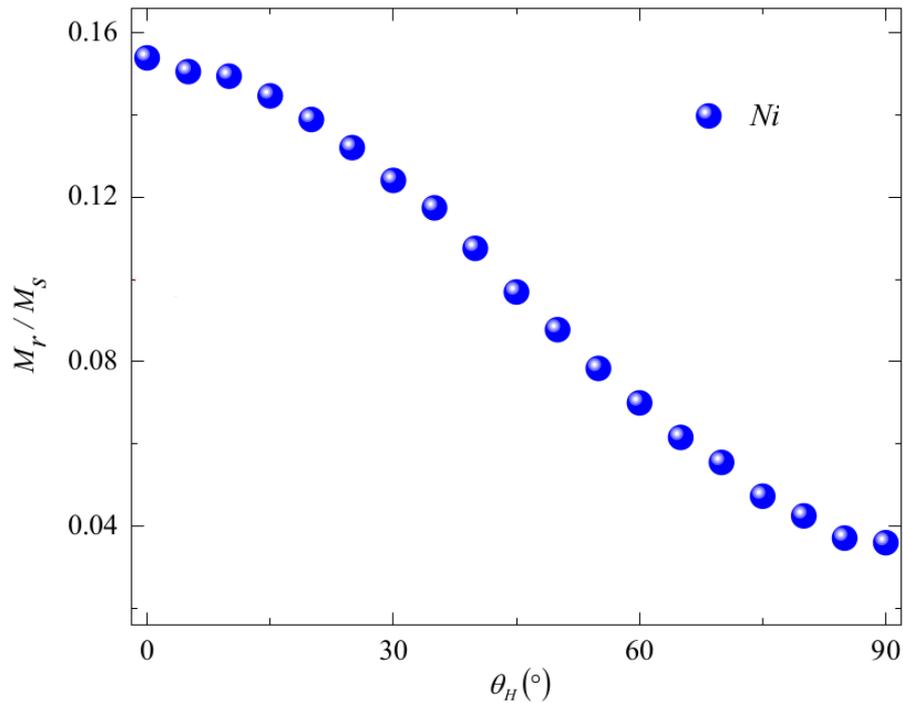


Figura 4.30: Curvas experimentais da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H dos nanofios de níquel obtidos de nosso laboratório [47].

4.3.2 Variação da distância entre os nanofios

Para entender os efeitos de distância entre fios geramos curvas para arranjos de fios com um e dois fios em distâncias menores a 70 nm. As distâncias escolhidas neste caso são 65 nm, 60 nm, 55 nm, 50 nm, 45 nm, 40 nm e 35 nm de centro a centro dos fios.

A Figura 4.31 ilustra os laços calculados para o arranjo de 10×10 de nanofios compostos por um elipsoide (comprimento $L = 60$ nm), agora calculada com distância de centro a centro de 65 nm. Observe que tanto para a curva 0° como para a de 80° se apresenta uma mudança significativa se comparado com os resultados para distância de 70 nm já apresentado no tópico anterior.

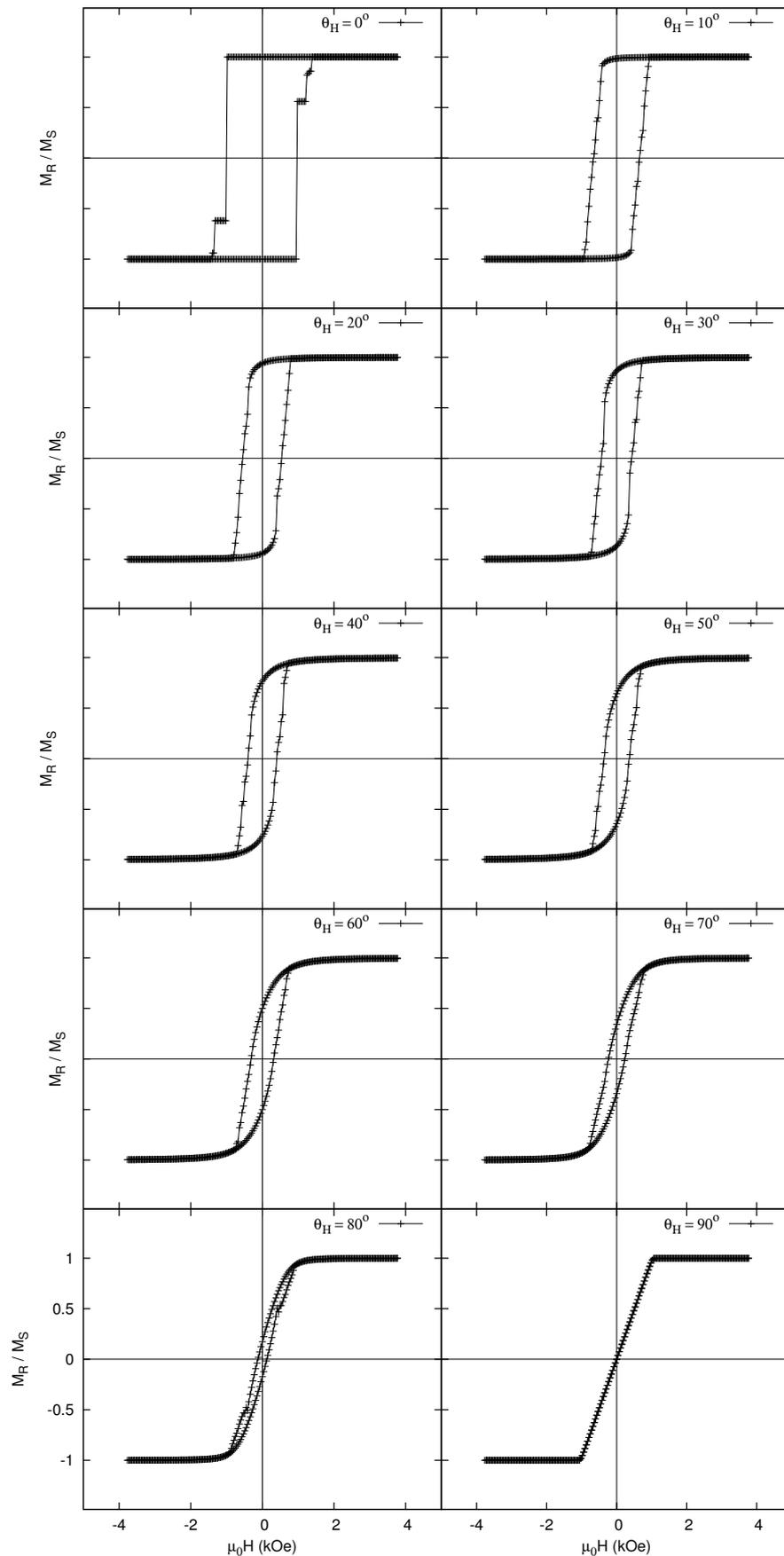


Figura 4.31: Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 65 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.

A diferença antes mencionada, certamente está relacionada com o aumento na interação dipolar de fio para fio. Para verificar a mudança com o ângulo de H_C e M_R/M_S , apresentamos as Figuras 4.32 e 4.33 onde se observa principalmente, que o comportamento para amostra com um elipsoide é semelhante para distâncias de 65 nm e 70 nm. O valor de H_C em 0° para 65 nm se mostra menor, portanto a interação entre os fios favorece esta diminuição.

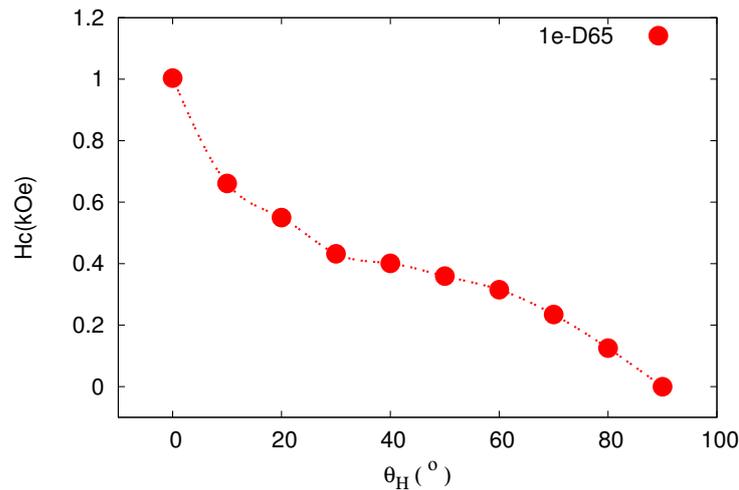


Figura 4.32: Curva de coeritividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 65 nm entre os nanofios. A coeritividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.31.

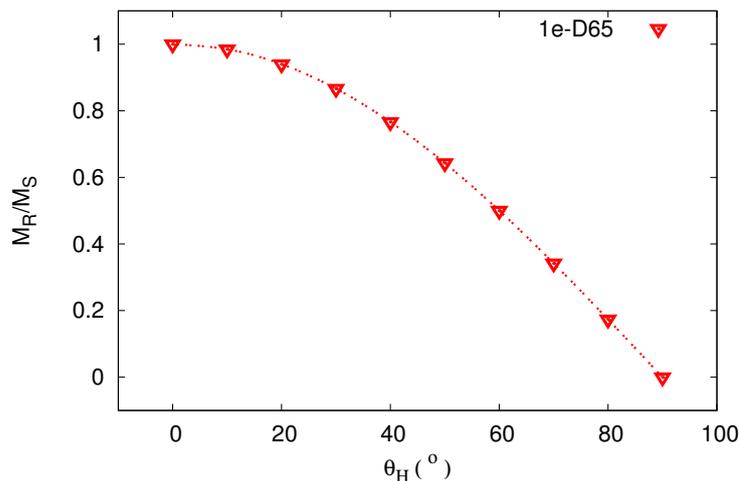


Figura 4.33: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 65 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.31 (feitas por o programa Nmag).

Os cálculos para distâncias entre nanofios de 60 nm devolvem resultados para os curvas de histerese, que aparentemente não mudam. A mudança mais significativo está no valor de H_C em

0° . Observemos nas curvas das Figuras 4.34 e 4.35, que o comportamento para a remanência é mantido, por outro lado $H_C = 0.9$ kOe em 0° e apresenta uma leve mudança na derivada na curva que mais uma vez mostra a sensibilidade de H_C em relação as mudanças da distância entre os fios.

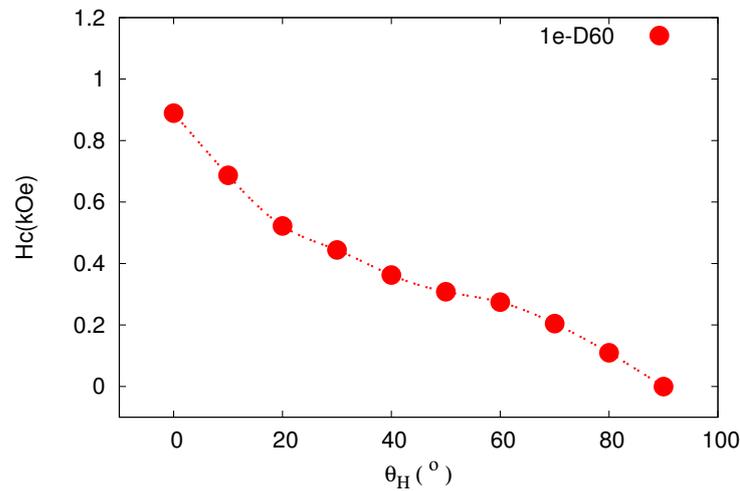


Figura 4.34: Curva de coeritividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 60 nm entre os nanofios. A coeritividade H_C é obtida através das curvas de histerese (feitas por o programa de Nmag).

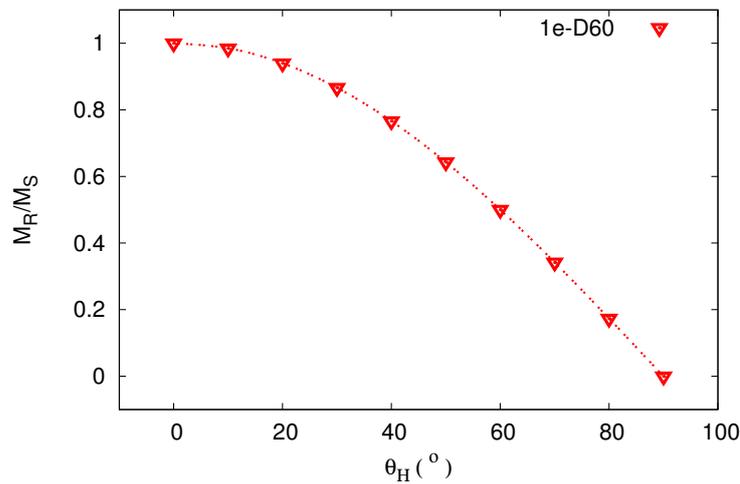


Figura 4.35: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoides) com uma separação de 60 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese (feitas por o programa Nmag).

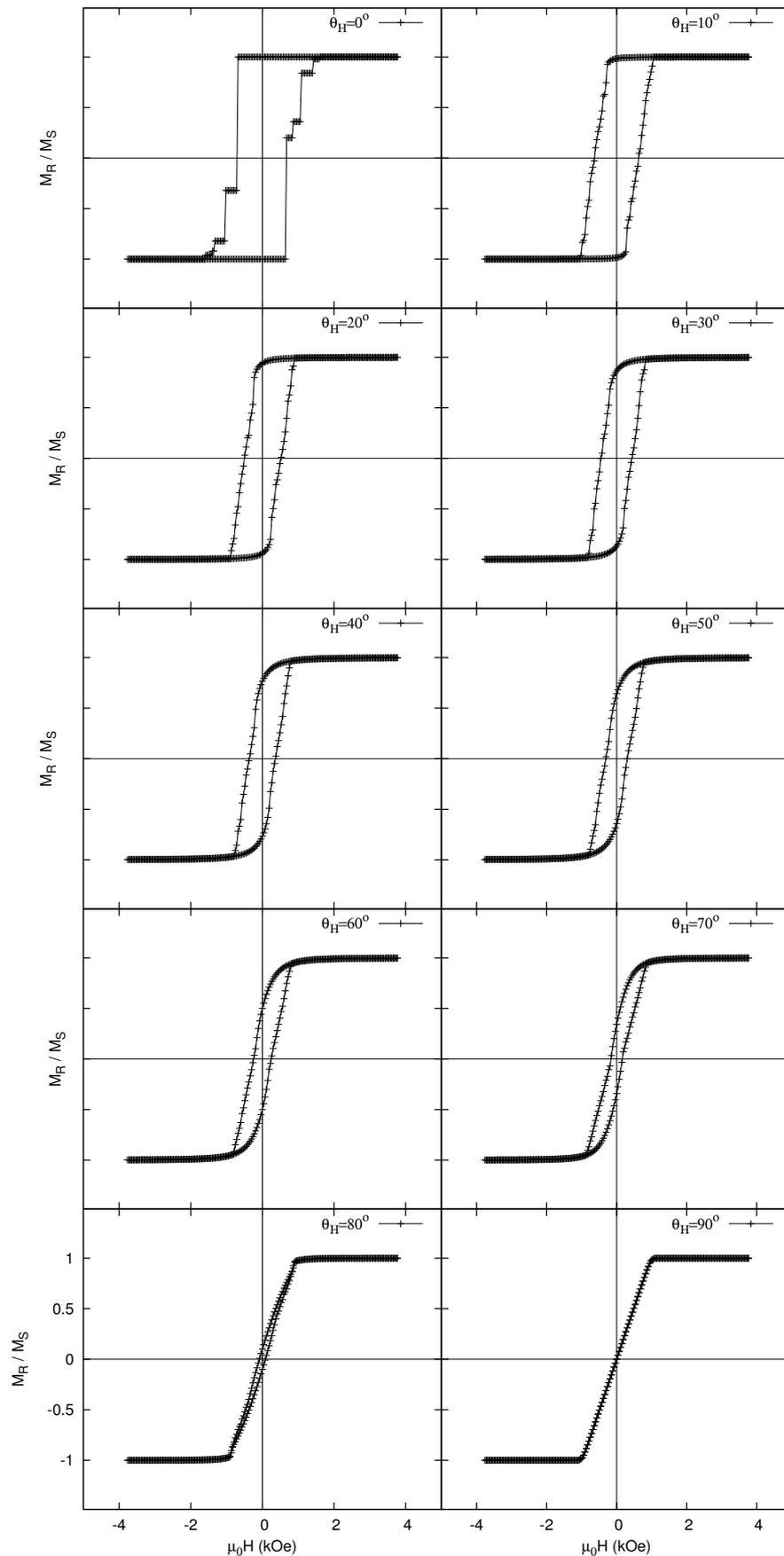


Figura 4.36: Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 55 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.

Em arranjo com nanofios distanciados em 55 nm, as variações são mais significativas, principalmente na curva de magnetização para 0° e 80° , que mostram um estreitamento e mudança na inclinação. Observe na Figura 4.36 que arranjos, mesmo formados por fios de um único elipsoide, apresentam um comportamento bem diferente em distâncias de 55 nm.

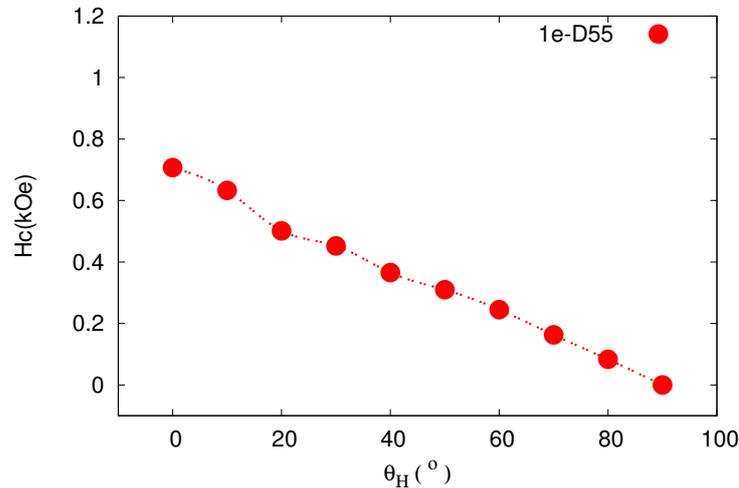


Figura 4.37: Curva de coeritvidade H_C em função do ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 55 nm entre os nanofios. A coeritvidade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.36 (feitas por o programa Nmag).

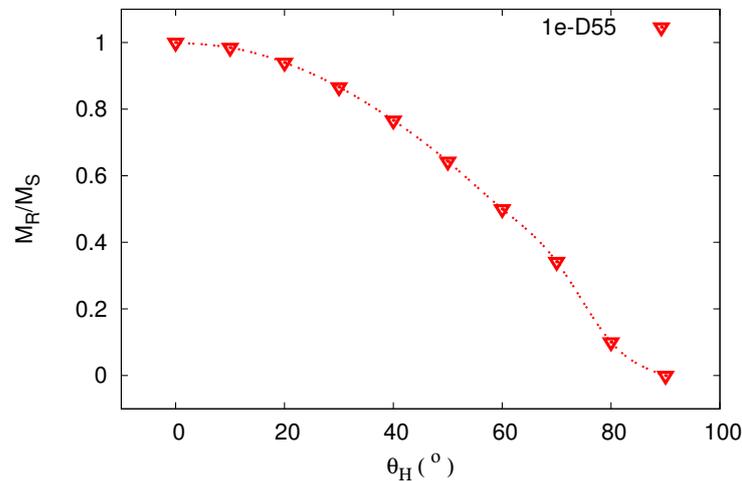


Figura 4.38: Curva da razão M_R/M_S em função do ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoides) com uma separação de 55 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.36 (feitas por o programa Nmag).

Para melhor mostrar as mudanças, as Figuras 4.37 e 4.38 apresenta a dependência angular de H_C e M_R/M_S . Primeiro que tudo é importante chamar atenção para o formato da curva de M_R em ângulos elevados. Observe que a coeritvidade que começa em 80° é a mesma

apresentada anteriormente para fio de níquel. Por outra lado, para um ângulo pequeno o valor de M_R/M_S ainda é grande, sendo assim, é possível mudar a estrutura do fio para gerar os resultados experimentais.

O gráfico de H_C é que apresenta mais mudanças, principalmente porque o comportamento típico de elipsoide que vemos em distância de 70 nm agora não aparece mais. Observe que agora as interações levaram a um comportamento quase linear e também á diminuição de H_C em 0° . *Isto pode ser o sinal de uma mudança de regime no comportamento e pode ser que em distâncias abaixo de 55 nm os resultados se apresentam mais próximos dos experimentais.*

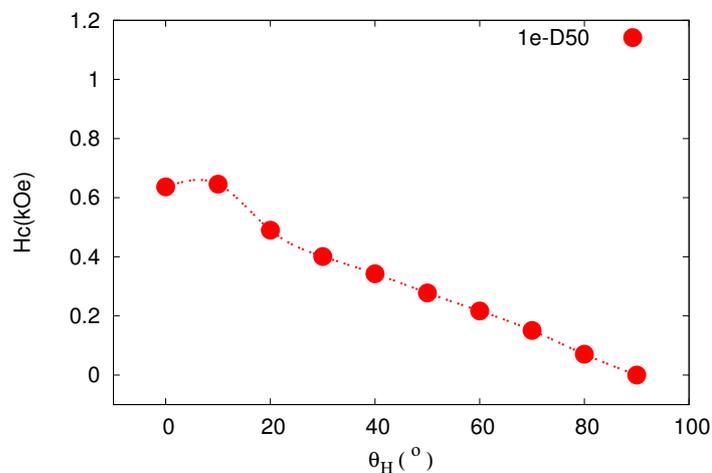


Figura 4.39: Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 50 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese.

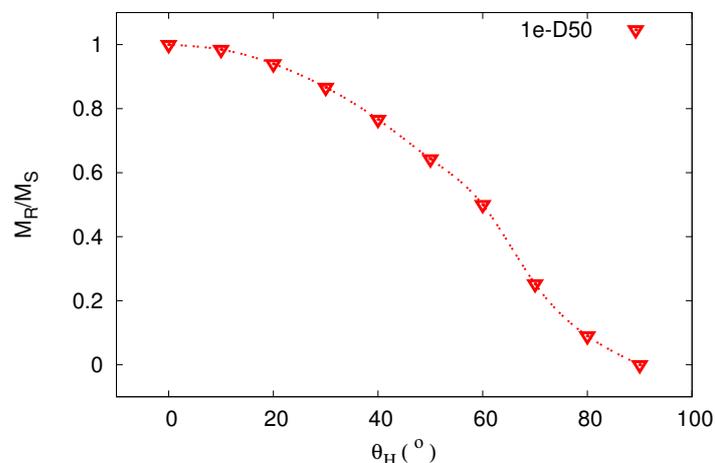


Figura 4.40: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 50 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese.

As curvas das Figuras 4.39 e 4.40 para nanofios de um único elipsoide (comprimento $L = 60$ nm) e distância $D = 50$ nm apresentam um comportamento que em baixos ângulos é interessante. Observe que a curva de H_C em função do ângulo não apresenta mais um máximo valor em 0° . Podemos ver também que em 10° aparece um pico e logo depois o comportamento linear é recuperado, de acordo com o descrito para 55 nm. No gráfico de remanência reduzida, podemos ver que em ângulo alto, a curvatura se acentua, adotando forma semelhante às experimentais da Figura 4.30, mesmo com valores numéricos bem diferentes.

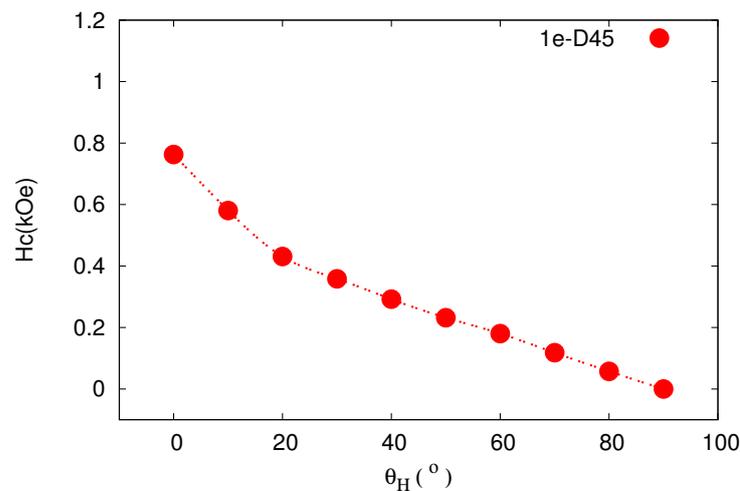


Figura 4.41: Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 45 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.43 (feito por o programa de Nmag).

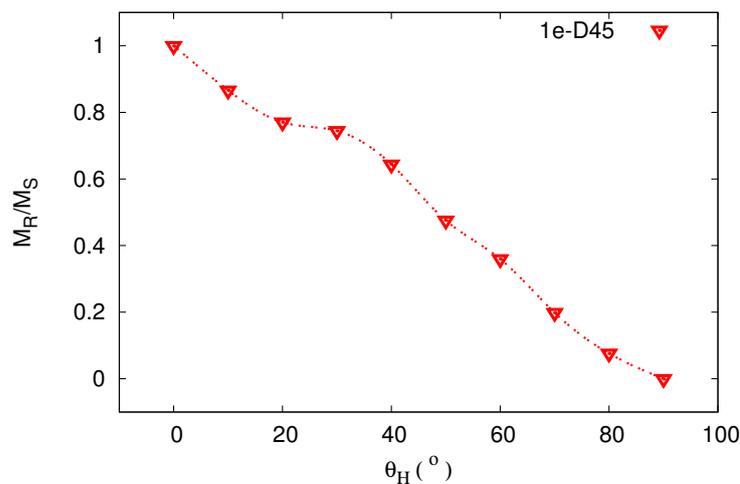


Figura 4.42: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 45 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura 4.43 (feito por o programa Nmag).

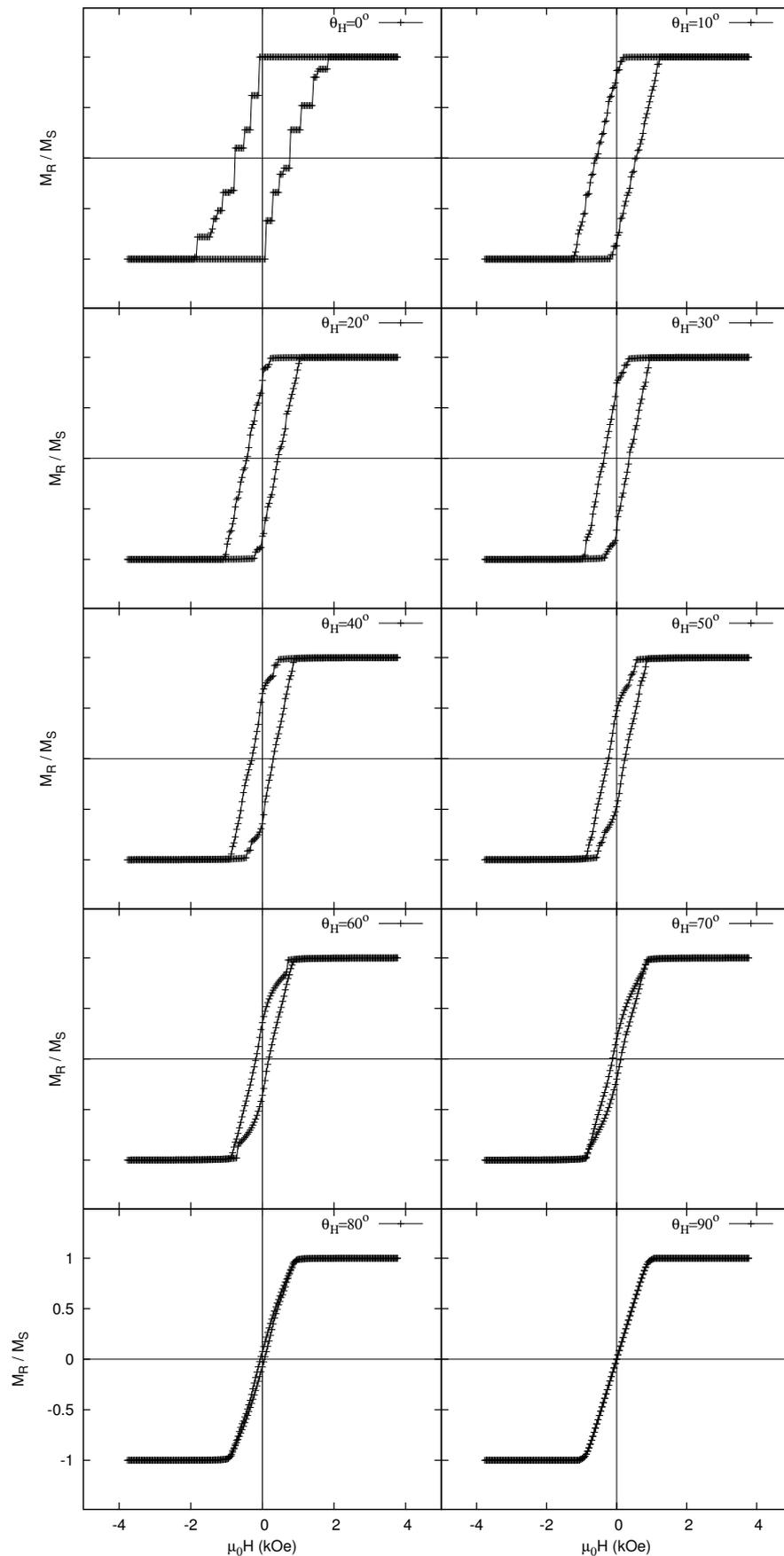


Figura 4.43: Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 45 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.

Verificando o formato das curvas de magnetização para $D = 45$ nm, podemos ver na Figura 4.43, que em 0° a curva segue sendo larga mas apresenta uma inclinação pronunciada que não vemos em outras amostras. De forma geral todas as curvas têm comportamento diferente e os valores de remanência e coercitividade começam a ter mudanças de comportamento mais acentuadas para fios cada vez mais próximos.

Podemos ver nas curvas das Figuras 4.41 e 4.42 que a dependência angular de H_C e M_R/M_S apresenta mudanças significativas. Observe primeiro, que a curvatura inicial é muito modificada quando comparada à amostra com $D = 50$ nm.

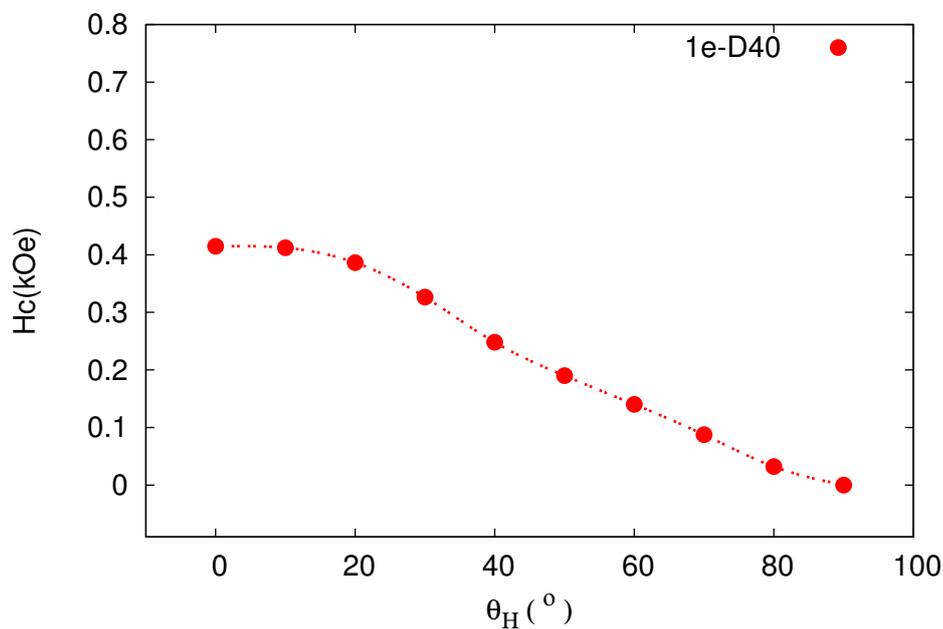


Figura 4.44: Curva de coeritividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 40 nm entre os nanofios. A coeritividade H_C é obtida através das curvas de histerese (no programa de Nmag).

Um resultado muito importante foi obtido para amostra com $D = 40$ nm. Observemos que na Figura 4.45 a remanência tem um comportamento idêntico ao apresentado em medidas de níquel e ferro. As referidas medidas se apresentam na Figura 4.46. Para o nosso cálculo podemos verificar, que H_C também tem o comportamento semelhante ao experimental apresentado na Figura 4.21.

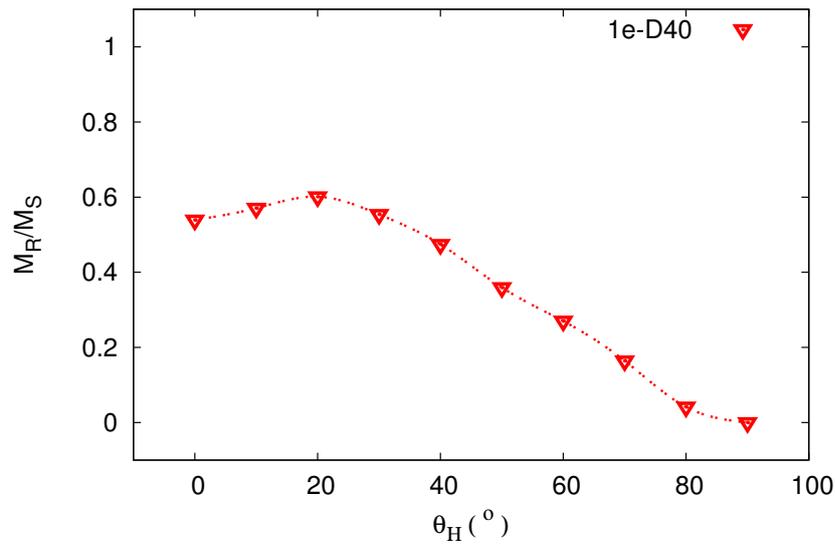


Figura 4.45: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 60 nm (1 elipsoide) com uma separação de 40 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese (no programa Nmag).

Podemos verificar também que os valores no nosso cálculo tem semelhança aos apresentados em experimentos. *Estes resultados são muito significativos, já que a estrutura de elipsoides aqui apresentada é capaz de reproduzir os resultados experimentais.*

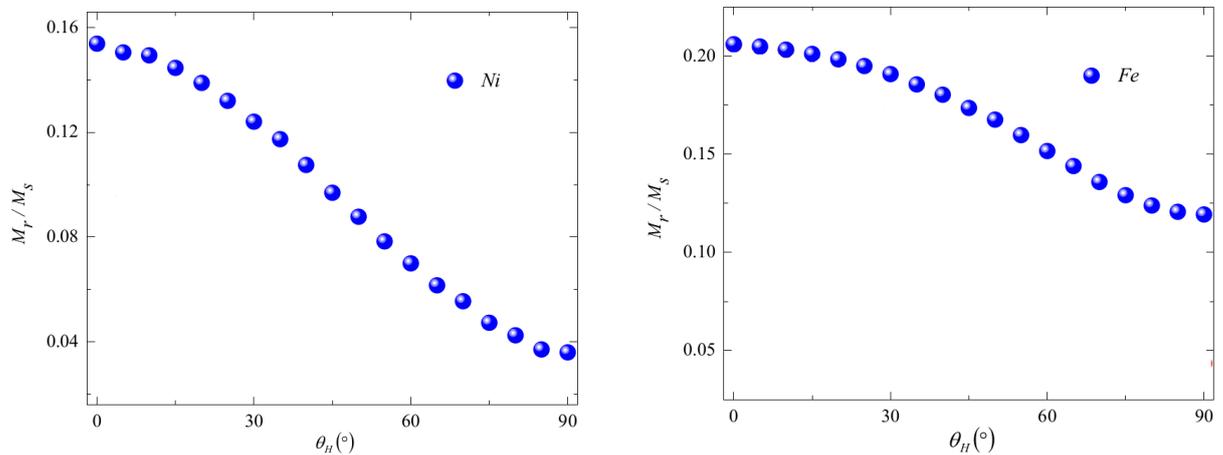


Figura 4.46: Curvas experimentais da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H dos nanofios de Ni e Fe obtidos de nosso laboratório [47].

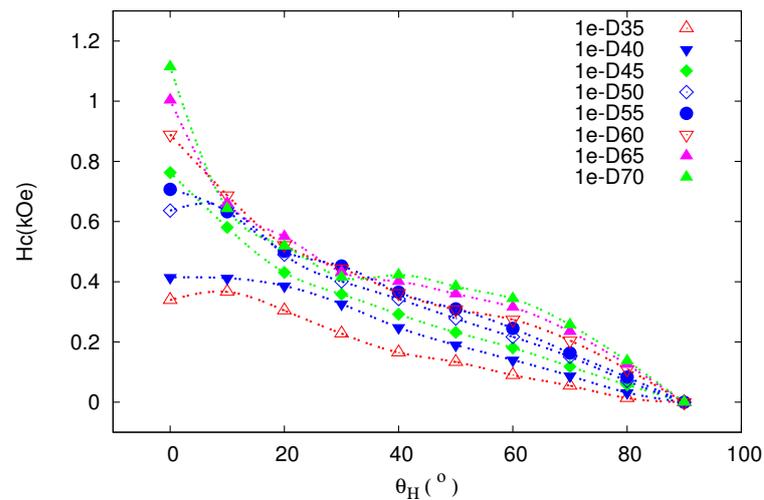


Figura 4.47: Comparação das curvas de coeritividade H_C em função do ângulo θ_H do arranjo de 10×10 nanofios de comprimento $L = 60$ nm (1 elipsoide) onde se variam as separação dos nanofios desde $D = 70$ nm até $D = 35$ nm.

Uma forma de juntar e comparar diretamente todos os comportamentos descritos aqui é apresentada na Figura 4.47 observamos que há uma evolução no comportamento que apresenta mudança de comportamento para $D = 55$ nm (círculo sólido). Como já mencionado, é neste valor que as curvas apresentam o formato semelhante ao das curvas em nossos experimentos.

Para representar a mudança do valor de H_C em 0° para todas as nossas amostras, a Figura 4.48 o gráfico apresenta uma queda de H_C com a diminuição da distância entre os fios. Aparece um pico justo em 45 nm que novamente leva ao comportamento anterior. Observemos também que em 90° o valor de H_C sempre é o mesmo e igual a zero.

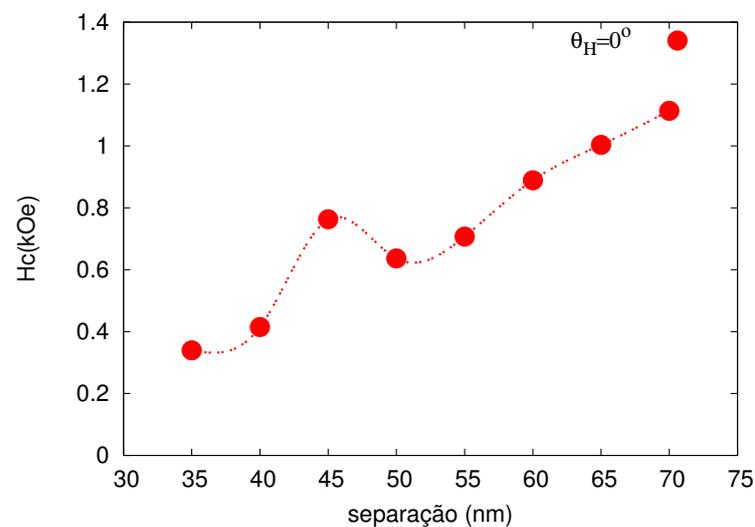


Figura 4.48: Curva de coeritividade H_C no ângulo $\theta_H = 0^\circ$ em função da separação dos nanofios desde $D = 70$ nm até $D = 35$ nm do arranjo de 10×10 nanofios de comprimento $L = 60$ nm (1 elipsoide).

Uma análise comparativa entre os valores de M_R/M_S pode ser feita utilizando as curvas na Figura 4.49. Nestas curvas vemos fundamentalmente que o comportamento com o ângulo é sempre o mesmo apresentado valores máximos que diminuem com o aumento das interações dipolares entre os fios (diminuição da distância). A Figura 4.50 mostra que o valor em 0° começa a diminuir em $D = 45\text{nm}$.

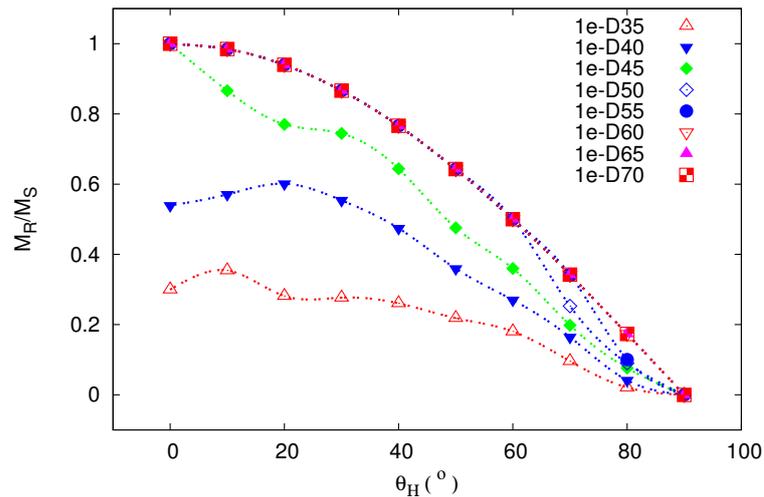


Figura 4.49: Comparação das curvas da razão M_R/M_S em função do ângulo θ_H do arranjo de 10×10 nanofios de comprimento $L = 60$ nm (1 elipsoide) onde se variam as separação dos nanofios desde $D = 70$ nm até $D = 35$ nm.

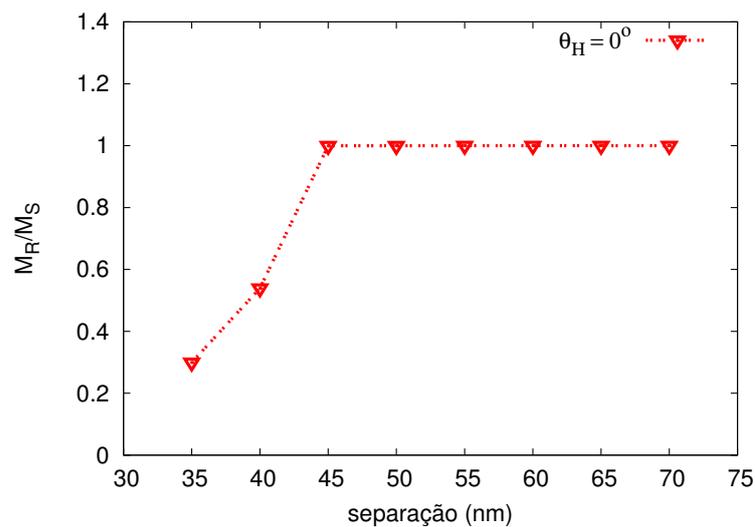


Figura 4.50: Curva de da razão M_R/M_S no ângulo $\theta_H = 0^\circ$ em função da separação dos nanofios desde $D = 70$ nm até $D = 35$ nm do arranjo de 10×10 nanofios de comprimento $L = 60$ nm (1 elipsoide).

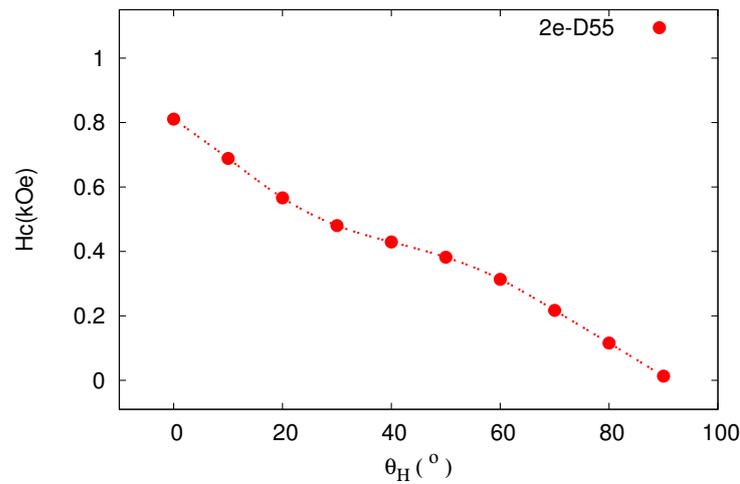


Figura 4.51: Curva de coeritividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 55 nm entre os nanofios. A coeritividade H_C é obtida através das curvas de histerese (no programa de Nmag).

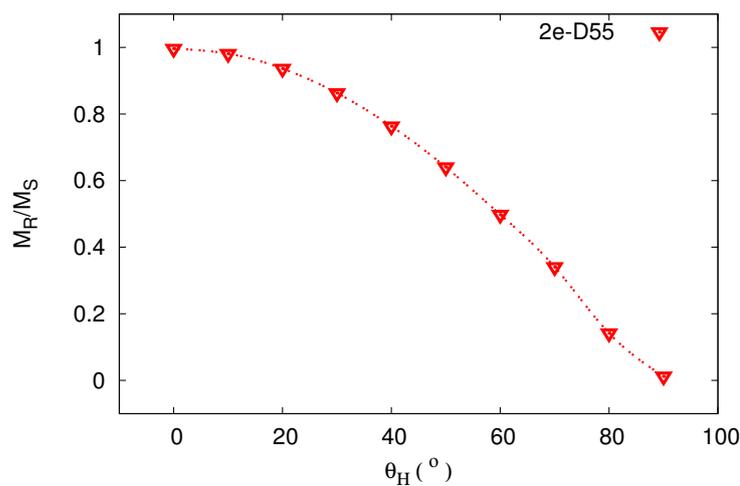


Figura 4.52: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 55 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese ilustrada na Figura (do programa Nmag).

A mesma análise foi feita em uma amostra formada por nanofios com dois elipsoides com o objetivo de verificar alguns aspectos que ficam como incógnita, como $H_C = 0$ Oe para 90° para todas as distâncias.

As curvas na Figura 4.53 apresentam os resultados para nanofios formados por duas cadeias de elipsoides. Cabe destacar que de modo geral as curvas têm um comportamento semelhante ao visto em outras amostras antes analisadas.

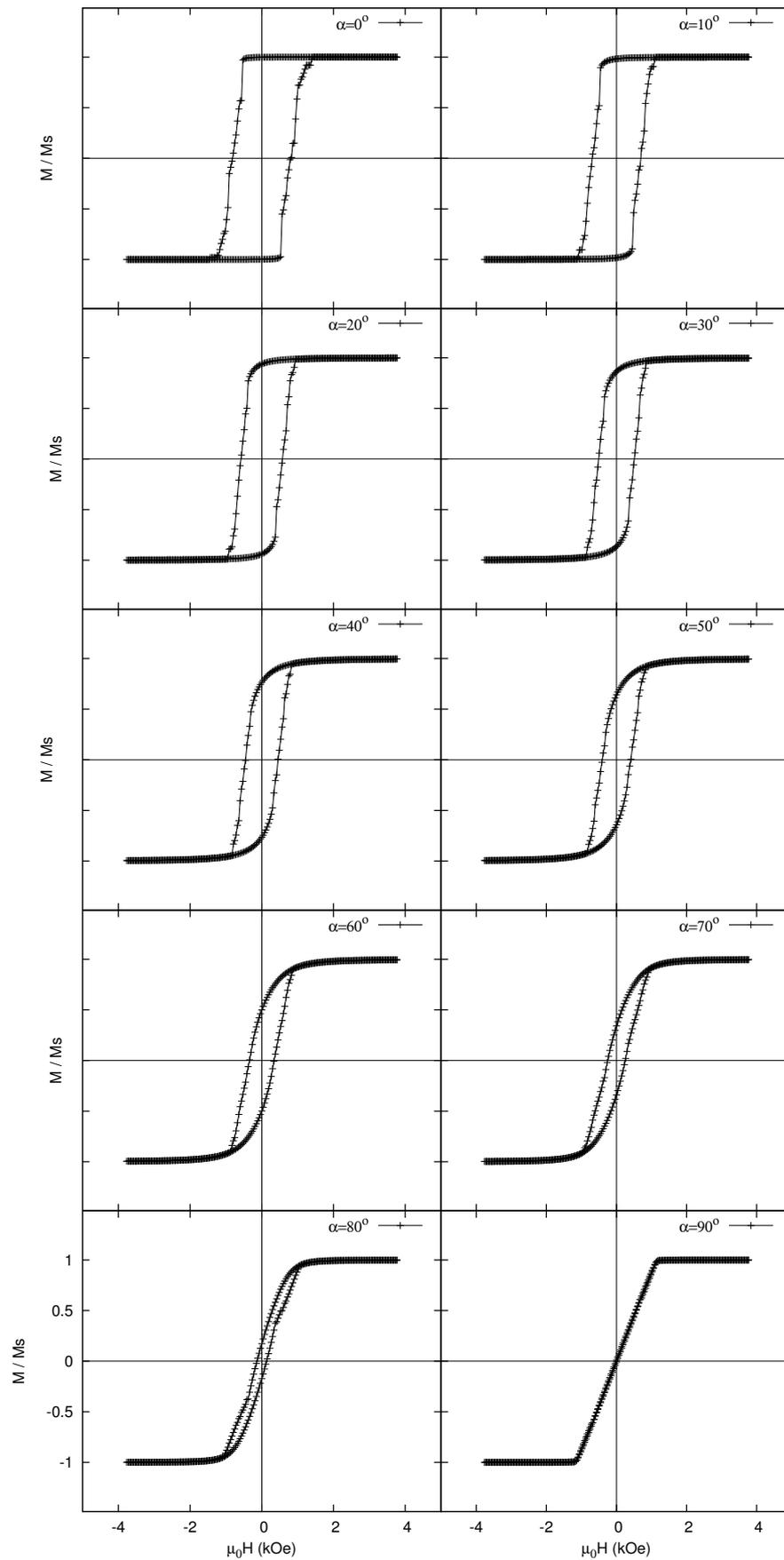


Figura 4.53: Curvas de histerese magnética para os ângulos desde 0° até 90° , da simulação do arranjo de 10×10 dos nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsoides) com uma separação de 60 nm entre os nanofios. Com malha irregular para o programa Nmag.

Examinado o comportamento da coercitividade e da remanência em função do ângulo podemos observar que para $D = 65$ nm a remanência tem o mesmo comportamento que apresentava nas amostras com um único elipsoide no fio. A curva de H_C em função do ângulo na Figura 4.54 mostra também o mesmo formato em 120 nm que em 60 nm de comprimento do fio. Por outra parte $H_C = 0.8$ kOe em 0° .

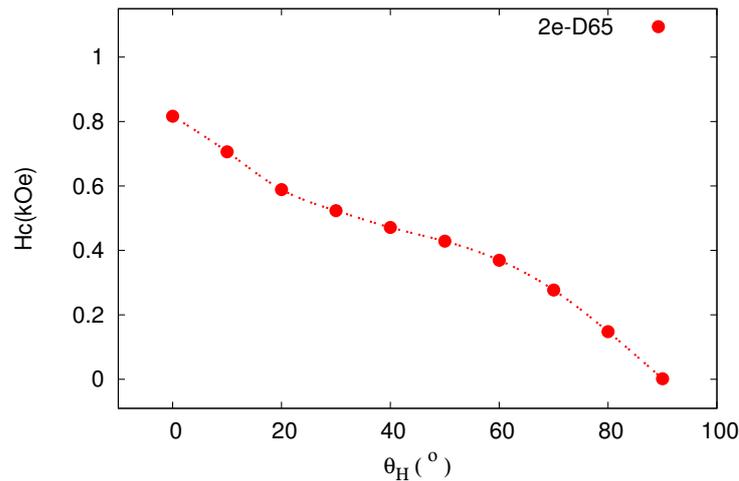


Figura 4.54: Curva de coercitividade H_C em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsóides) com uma separação de 65 nm entre os nanofios. A coercitividade H_C é obtida através das curvas de histerese (do programa Nmag).

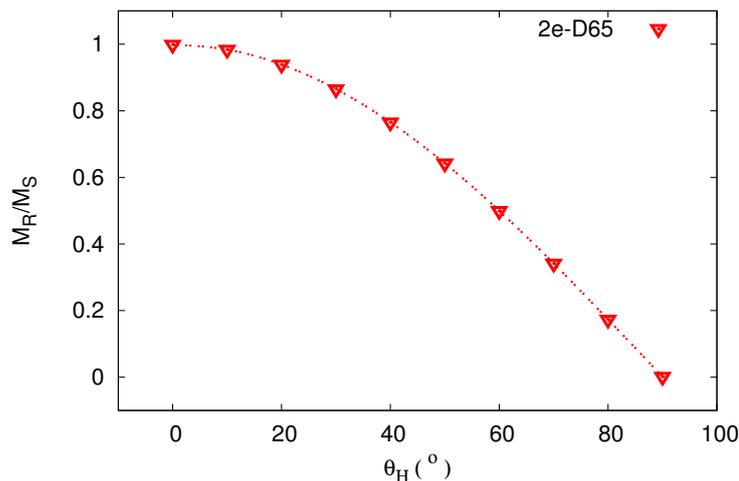


Figura 4.55: Curva da razão M_R/M_S em função ângulo do campo aplicado θ_H , para nanofios com comprimento de 120 nm (2 elipsóides) com uma separação de 65 nm entre os nanofios. A razão M_R/M_S é obtida através das curvas de histerese (do programa Nmag).

Este é um resultado que quando comparado a fios curtos pode ser tomado como positivo. Isso porque aparentemente o aumento de elipsóides contribui com a diminuição de H_C em 0° ,

resultado é aparentemente contraditório se pensamos no fio como um cilindro. Por outro lado o efeito dipolar entre elipsoides é determinante.

Para melhor comparar todos os resultados apresentamos nas Figuras 4.56 e 4.57 a curva que compara a dependência angular de H_C e M_R/M_S para todos as mostras com distâncias de 35 nm e 65 nm entre fios. A mudança no regime no comportamento de H_C com ângulo ocorrem em 50 nm de distância, semelhante à amostra com um único elipsoide que foi em 60 nm. É importante destacar que dependendo da distância entre fios, o máximo na curva é deslocado.

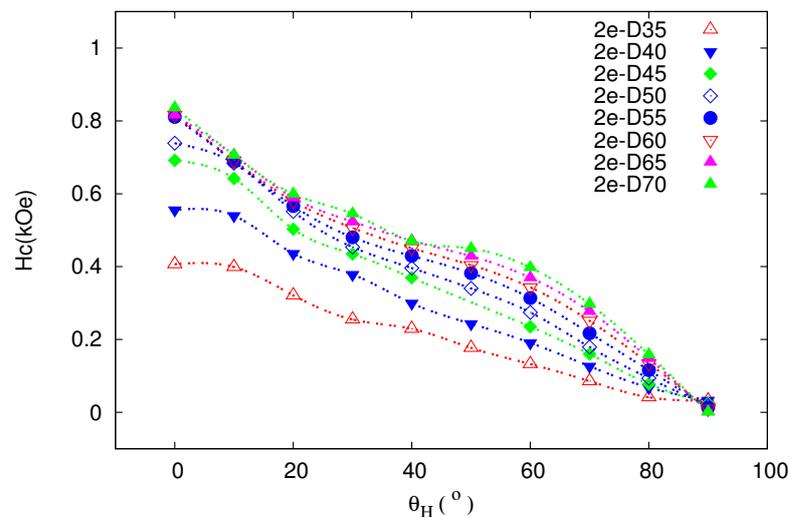


Figura 4.56: Comparação das curvas de coercitividade H_C em função do ângulo θ_H do arranjo de 10×10 nanofios de comprimento $L = 120$ nm (2 elipsoides) onde se variam as separação dos nanofios desde $D = 70$ nm até $D = 35$ nm.

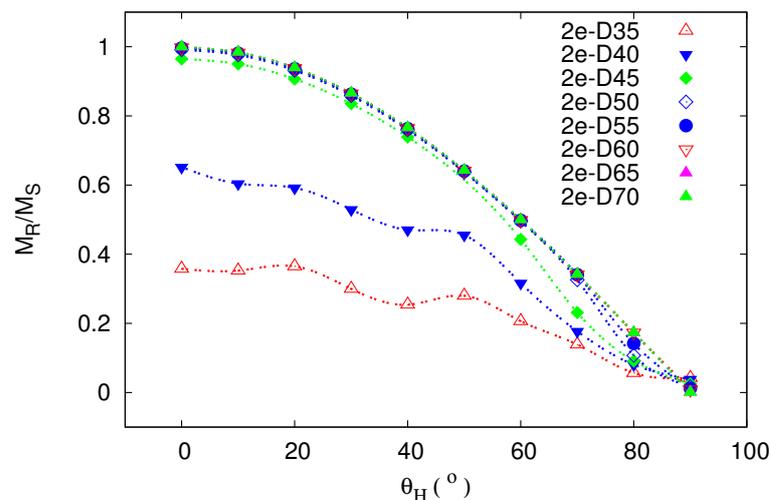


Figura 4.57: Comparação das curvas da razão M_R/M_S em função do ângulo θ_H do arranjo de 10×10 nanofios de comprimento $L = 120$ nm (2 elipsoides) onde se variam as separação dos nanofios desde $D = 70$ nm até $D = 35$ nm.

Outro resultado positivo encontrado em nossos cálculos é que H_C em 90° começa ter valores acima de zero, como reportado nos gráficos de medidas experimentais. As curvas de remanência reduzida apresentam comportamento semelhante ao apresentado em amostra de 60 nm de comprimento. Também neste cálculo se revela remanência diferente de zero para 90° quando a distância diminui.

Conclusões e Perspectivas

O nosso trabalho aqui apresentado permite observar com detalhe alguns efeitos das interações dipolares em arranjos de nanofios de níquel. Especificamente concluimos que:

EF foi mais eficiente, uma vez que tem uma malha irregular, que permite gerar o elipsoide melhor que DF. Vimos a variação acentuada da derivada das curvas estudadas. O motivo principal é a variação da energia dipolar à medida que o número de elipsoides aumenta na cadeia. Com o esquema proposto na simulação foi produzir vários resultados experimentais para arranjos hexagonais de níquel, tal como a diminuição da coercividade e remanência quando sobre a interação entre os nanofios aumenta. A remanência também apresenta mudanças drásticas em função de D que explicam o porque das tantas divergências reportadas na literatura. Com a mudança de D podemos gerar valores de H_C diferentes de zero para 90° , como nos resultados experimentais.

Sempre é importante fazer análises que deixem os resultados mais consistentes. Por isso sugerimos em trabalhos futuros estudar efeitos de comprimento para $D = 40$ nm, já que apenas tomamos $D = 70$ nm. Utilizar GPU para refinar cálculos e utilizar comprimento maior que 240 nm e malha com célula menor. Mapear as energias durante os cálculos para melhor entender a causa de cada comportamento e aprimorar as Conclusões. Fazer uma simulação dinâmica que ofereça mais elementos para discutir os efeitos aqui relatados.

Referências

- [1] H. Zeng, M. Zheng, R. Skomski, D. J. Sellmyer, Y. Liu, L. Menon, and S. Bandyopadhyay, “Magnetic properties of self-assembled Co nanowires of varying length and diameter,” *Journal of Applied Physics*, vol. 87, no. 9, pp. 4718–4720, 2000.
- [2] D. J. Sellmyer, M. Zheng, and R. Skomski, “Magnetism of Fe, Co and Ni nanowires in self-assembled arrays,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 13, no. 25, p. R433, 2001.
- [3] H. Zeng, R. Skomski, L. Menon, Y. Liu, S. Bandyopadhyay, and D. J. Sellmyer, “Structure and magnetic properties of ferromagnetic nanowires in self-assembled arrays,” *Phys. Rev. B*, vol. 65, p. 134426, 2002.
- [4] L. G. Vivas, Y. P. Ivanov, D. G. Trabada, M. P. Proenca, O. Chubykalo-Fesenko, and M. Vázquez, “Magnetic properties of Co nanopillar arrays prepared from alumina templates,” *Nanotechnology*, vol. 24, no. 10, p. 105703, 2013.
- [5] F. Zighem, T. Maurer, F. Ott, and G. Chaboussant, “Dipolar interactions in arrays of ferromagnetic nanowires: A micromagnetic study,” *Journal of Applied Physics*, vol. 109, no. 1, pp. –, 2011.
- [6] R. Lavin, J. C. Denardin, A. P. Espejo, A. Cortés, and H. Gómez, “Magnetic properties of arrays of nanowires: Anisotropy, interactions, and reversal modes,” *Journal of Applied Physics*, vol. 107, no. 9, 2010.
- [7] A. Rotaru, J.-H. Lim, D. Lenormand, A. Diaconu, J. B. Wiley, P. Postolache, A. Stancu, and L. Spinu, “Interactions and reversal-field memory in complex magnetic nanowire arrays,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 134431, Oct 2011.
- [8] I. Dumitri, F. Li, J. Wiley, D. Cimpoesu, A. Stancu, and L. Spinu, “Study of magnetic interaction in metallic nanowires networks,” in *Magnetics Conference, 2005. INTERMAG Asia 2005. Digests of the IEEE International*, pp. 375–376, April 2005.
- [9] R. Skomski, H. Zeng, and D. Sellmyer, “Incoherent magnetization reversal in nanowires,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 249, no. 1, pp. 175–180, 2002.

-
- [10] R. Skomski, H. Zeng, M. Zheng, and D. J. Sellmyer, “Magnetic localization in transition-metal nanowires,” *Phys. Rev.*, vol. 62, p. 3900, 2000.
- [11] G. C. Han, B. Y. Zong, P. Luo, and Y. H. Wu, “Angular dependence of the coercivity and remanence of ferromagnetic nanowire arrays,” *Journal of Applied Physics*, vol. 93, no. 11, 2003.
- [12] S. E. A. Prieto, *Propiedades magnéticas de los nanohilos de Níquel*. PhD thesis, Universidad de Santiago de Chile, 2008.
- [13] K. Nielsch, R. B. Wehrspohn, S. F. Fischer, H. Kronmüller, J. Barthel, J. Kirschner, T. Schweinböck, D. Weiss, and U. Gösele, “High Density Hexagonal Nickel Nanowire Arrays with 65 and 100 nm-PERIOD,” in *MRS Proceedings*, vol. 705, pp. Y9–3, Cambridge Univ Press, 2001.
- [14] P. Bender, F. Krämer, A. Tschöpe, and R. Birringer, “Influence of dipolar interactions on the angular-dependent coercivity of nickel nanocylinders,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 48, no. 14, p. 145003, 2015.
- [15] K. Nielsch, R. Wehrspohn, J. Barthel, J. Kirschner, S. Fischer, H. Kronmüller, T. Schweinböck, D. Weiss, and U. Gösele, “High density hexagonal nickel nanowire array,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 249, no. 1–2, pp. 234 – 240, 2002. International Workshop on Magnetic Wires.
- [16] K. Nielsch, R. B. Wehrspohn, J. Barthel, J. Kirschner, U. Gösele, S. F. Fischer, and H. Kronmüller, “Hexagonally ordered 100 nm period nickel nanowire arrays,” *Applied Physics Letters*, vol. 79, pp. 1360–1362, 2001.
- [17] O. C. Trusca, “Interaction Effects in Nickel Nanowires Arrays,” Master’s thesis, University of New Orleans, 2008.
- [18] L. G. Vivas, M. Vazquez, J. Escrig, S. Allende, D. Altbir, D. C. Leitao, and J. P. Araujo, “Magnetic anisotropy in CoNi nanowire arrays: Analytical calculations and experiments,” *Phys. Rev. B*, vol. 85, p. 035439, 2012.
- [19] M. S. Salem, P. Sergelius, R. Zierold, J. M. Montero Moreno, D. Gorlitz, and K. Nielsch, “Magnetic characterization of nickel-rich NiFe nanowires grown by pulsed electrodeposition,” *J. Mater. Chem.*, vol. 22, pp. 8549–8557, 2012.
-

-
- [20] R. Ferré, K. Ounadjela, J. M. George, L. Piraux, and S. Dubois, “Magnetization processes in nickel and cobalt electrodeposited nanowires,” *Phys. Rev. B*, vol. 56, pp. 14066–14075, 1997.
- [21] Y. P. Ivanov, M. Vázquez, and O. Chubykalo-Fesenko, “Magnetic reversal modes in cylindrical nanowires,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 46, no. 48, p. 485001, 2013.
- [22] H. Szambolics, *New numerical approaches for micromagnetism and Current-induced domain wall motion*. Theses, Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, Dec. 2008.
- [23] A. Günther, S. Monz, A. Tschöpe, R. Birringer, and A. Michels, “Angular dependence of coercivity and remanence of Ni nanowire arrays and its relevance to magnetoviscosity,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 320, no. 7, pp. 1340 – 1344, 2008.
- [24] J. Escrig, R. Lavín, J. L. Palma, J. C. Denardin, D. Altbir, A. Cortés, and H. Gómez, “Geometry dependence of coercivity in Ni nanowire arrays,” *Nanotechnology*, vol. 19, no. 7, p. 075713, 2008.
- [25] R. Hertel and J. Kirschner, “Magnetization reversal dynamics in nickel nanowires,” *Phys. B: Condens. Matter*, vol. 343, p. 206, 2004.
- [26] K. Nielsch, F. Müller, A.-P. Li, and U. Gösele, “Uniform nickel deposition into ordered alumina pores by pulsed electrodeposition,” *Advanced Materials*, vol. 12, no. 8, p. 582, 2000.
- [27] R. Lavín, J. C. Denardin, J. Escrig, D. Altbir, A. Cortés, and H. Gómez, “Angular dependence of magnetic properties in ni nanowire arrays,” *Journal of Applied Physics*, vol. 106, no. 10, pp. –, 2009.
- [28] A. Ghaddar, F. Gloaguen, J. Gieraltowski, and C. Tannous, “Magnetic crossover effect in nickel nanowire arrays,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 406, no. 10, pp. 2046 – 2053, 2011.
- [29] L. Carignan, M. Massicotte, C. Caloz, A. Yelon, and D. Menard, “Magnetization Reversal in Arrays of Ni Nanowires With Different Diameters,” *Magnetics, IEEE Transactions on*, vol. 45, no. 10, pp. 4070–4073, 2009.
-

-
- [30] M. Zheng, L. Menon, H. Zeng, Y. Liu, S. Bandyopadhyay, R. D. Kirby, and D. J. Sellmyer, “Magnetic properties of Ni nanowires in self-assembled arrays,” *Phys. Rev.*, vol. 62, p. 12282, 2000.
- [31] R. Hertel, “Micromagnetic simulations of magnetostatically coupled Nickel nanowires,” *Journal of Applied Physics*, vol. 90, no. 11, 2001.
- [32] R. Hertel, “Computational micromagnetism of magnetization processes in nickel nanowires,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 249, no. 1–2, pp. 251–256, 2002. International Workshop on Magnetic Wires.
- [33] H. Forster, T. Schrefl, W. Scholz, D. Suess, V. Tsiantos, and J. Fidler, “Micromagnetic simulation of domain wall motion in magnetic nano-wires,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 249, no. 1–2, pp. 181 – 186, 2002. International Workshop on Magnetic Wires.
- [34] E. P. Hernández, *Características microestruturas e propriedades magnéticas de arranjos de nanofios magnéticos*. PhD thesis, Universidade Federal de Pernambuco.CCEN. Física, 2009.
- [35] S. Lin, S. Chang, R. Liu, S. Hu, and N. Jan, “Fabrication and magnetic properties of nickel nanowires,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 282, pp. 28 – 31, 2004. International Symposium on Advanced Magnetic Technologies.
- [36] A. Aharoni and S. Shtrikman, “Magnetization Curve of the Infinite Cylinder,” *Phys. Rev.*, vol. 109, pp. 1522–1528, 1958.
- [37] E. H. Frei, S. Shtrikman, and D. Treves, “Critical Size and Nucleation Field of Ideal Ferromagnetic Particles,” *Phys. Rev.*, vol. 106, pp. 446–455, 1957.
- [38] R. Skomski, H. Zeng, M. Zheng, and D. J. Sellmyer, “Magnetic localization in transition-metal nanowires,” *Phys. Rev. B*, vol. 62, pp. 3900–3904, 2000.
- [39] R. Skomski, M. Chipara, and D. J. Sellmyer, “Spin-wave modes in magnetic nanowires,” *Journal of Applied Physics*, vol. 93, no. 10, pp. 7604–7606, 2003.
- [40] M. Chipara, R. Skomski, and D. Sellmyer, “Magnetic modes in Ni nanowires,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 249, no. 1–2, pp. 246–250, 2002. International Workshop on Magnetic Wires.
-

-
- [41] G. C. Han, B. Y. Zong, P. Luo, and Y. H. Wu, “Angular dependence of the coercivity and remanence of ferromagnetic nanowire arrays,” *Journal of Applied Physics*, vol. 93, no. 11, pp. 9202–9207, 2003.
- [42] U. Netzelmann, “Ferromagnetic resonance of particulate magnetic recording tapes,” *Journal of Applied Physics*, vol. 68, no. 4, pp. 1800–1807, 1990.
- [43] A. Encinas-Oropesa, M. Demand, L. Piraux, I. Huynen, and U. Ebels, “Dipolar interactions in arrays of nickel nanowires studied by ferromagnetic resonance,” *Phys. Rev. B*, vol. 63, p. 104415, 2001.
- [44] I. S. Jacobs and C. P. Bean, “An Approach to Elongated Fine-Particle Magnets,” *Phys. Rev.*, vol. 100, pp. 1060–1067, 1955.
- [45] W. Chen, S. Tang, M. Lu, and Y. Du, “The magnetic properties and reversal of Fe–Co nanowire arrays,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 15, no. 26, p. 4623, 2003.
- [46] F. Tian, J. Chen, J. Zhu, and D. Wei, “Magnetism of thin polycrystalline nickel nanowires,” *Journal of Applied Physics*, vol. 103, no. 1, pp. –, 2008.
- [47] J. H. da Silva Junior, “O modo coerente na reversão da magnetização de arranjos de nanofios metálicos,” Master’s thesis, Universidade Federal de Pernambuco.CCEN. Física, 2014.
- [48] R. Skomski, “Nanomagnetics,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 15, no. 20, p. R841, 2003.
- [49] D. J. Thouless, *Quantum Mechanics of Many-Body Systems*. New York, 1961.
- [50] R. S. Alex Hubert, *Magnetic Domains, The Analysis of Magnetic Microstructures*. Springer, 3rd ed., 2009.
- [51] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*. 2nd Edition, New York, 1975.
- [52] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*. International series of monographs on physics, Clarendon Press, 1981.
- [53] L. Landau and E. Lifshits, “On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies,” *Reprinted from Phys. Zeitsch. der Sow.* 8, pp. 153–169 (1935), vol. 8, no. 6, p. 153–169, 1935.
-

-
- [54] T. Gilbert, “A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials,” *Magnetics, IEEE Transactions on*, vol. 40, no. 6, pp. 3443–3449, 2004.
- [55] T. L. Gilbert, *Formulation, Foundations and Applications of the Phenomenological Theory of Ferromagnetism*. PhD thesis, Illinois Institute of Technology., 1956.
- [56] L. D. Landau, *Mechanics*. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1996.
- [57] J.-E. Wegrowe and M.-C. Ciornei, “Magnetization dynamics, gyromagnetic relation, and inertial effects,” *American Journal of Physics*, vol. 80, no. 7, 2012.
- [58] A. Thiaville, J. M. García, R. Dittrich, J. Miltat, and T. Schrefl, “Micromagnetic study of Bloch-point-mediated vortex core reversal,” *Phys. Rev. B*, vol. 67, p. 094410, 2003.
- [59] Kittel, *Introducción a la Física del Estado Sólido*. Reverte, 1993.
- [60] A. Lyberatos, D. V. Berkov, and R. W. Chantrell, “A method for the numerical simulation of the thermal magnetization fluctuations in micromagnetics,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 5, no. 47, p. 8911, 1993.
- [61] D. A. Garanin, “Fokker-Planck and Landau-Lifshitz-Bloch equations for classical ferromagnets,” *Phys. Rev. B*, vol. 55, pp. 3050–3057, 1997.
- [62] S. S. P. Parkin and D. Mauri, “Spin engineering: Direct determination of the Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida far-field range function in ruthenium,” *Phys. Rev. B*, vol. 44, pp. 7131–7134, 1991.
- [63] I. A. Sergienko and E. Dagotto, “Role of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction in multi-ferroic perovskites,” *Phys. Rev. B*, vol. 73, p. 094434, 2006.
- [64] M. Heide, G. Bihlmayer, and S. Blügel, “Dzyaloshinskii-Moriya interaction accounting for the orientation of magnetic domains in ultrathin films: Fe/W(110),” *Phys. Rev. B*, vol. 78, p. 140403, 2008.
- [65] L. Lopez-Diaz, D. Aurelio, L. Torres, E. Martinez, M. A. Hernandez-Lopez, J. Gomez, O. Alejos, M. Carpentieri, G. Finocchio, and G. Consolo, “Micromagnetic simulations using Graphics Processing Units,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 45, no. 32, p. 323001, 2012.
-

-
- [66] M. J. Donahue and D. G. Porter, “OOMMF User’s Guide, National Institute of Standards and Technology,” tech. rep., NIST, 1999.
- [67] H. Kronmüller and S. Parkin, eds., *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*, vol. 2. John Wiley & Sons, Ltd., 2007.
- [68] W. Scholz, “magpar - Parallel Finite Element Micromagnetics Package,” tech. rep., NIST, 2009.
- [69] T. Fischbacher, M. Franchin, G. Bordignon, and H. Fangohr, “A Systematic Approach to Multiphysics Extensions of Finite-Element-Based Micromagnetic Simulations: Nmag,” *Magnetics, IEEE Transactions on*, vol. 43, no. 6, pp. 2896–2898, 2007.
- [70] M. Curcic, B. Van Waeyenberge, A. Vansteenkiste, M. Weigand, V. Sackmann, H. Stoll, M. Fähnle, T. Tylliszczak, G. Woltersdorf, C. H. Back, and G. Schütz, “Polarization Selective Magnetic Vortex Dynamics and Core Reversal in Rotating Magnetic Fields,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 197204, 2008.
- [71] A. Vansteenkiste, M. Weigand, M. Curcic, H. Stoll, G. Schütz, and B. V. Waeyenberge, “Chiral symmetry breaking of magnetic vortices by sample roughness,” *New Journal of Physics*, vol. 11, no. 6, p. 063006, 2009.
- [72] J. E. Miltat and M. J. Donahue, ch. Numerical Micromagnetics: Finite Difference Methods. John Wiley & Sons, Ltd, 2007.
- [73] M. Donahue and R. McMichael, “Exchange energy representations in computational micromagnetics,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 233, no. 4, pp. 272 – 278, 1997. Hysteresis Modeling and Micromagnetism.
- [74] A. J. Newell, W. Williams, and D. J. Dunlop, “A generalization of the demagnetizing tensor for nonuniform magnetization,” *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, vol. 98, no. B6, pp. 9551–9555, 1993.
- [75] W. T. V. B. P. F. William H. Press, Saul A. Teukolsky, *Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing*. New York, NY, 2002.
- [76] M.-A. B. W. Bolte, M. Najafi, G. Meier, and D. P. F. Möller, “Simulating Magnetic Storage Elements: Implementation of the Micromagnetic Model into MATLAB - Case Study
-

- for Standardizing Simulation Environments,” in *Proceedings of the 2007 Summer Computer Simulation Conference, SCSC '07*, (San Diego, CA, USA), pp. 525–532, Society for Computer Simulation International, 2007.
- [77] J. Bey, “Tetrahedral grid refinement,” *Computing*, vol. 55, no. 4, pp. 355–378.
- [78] Q. Chen and A. Konrad, “A review of finite element open boundary techniques for static and quasi-static electromagnetic field problems,” *Magnetics, IEEE Transactions on*, vol. 33, no. 1, pp. 663–676, 1997.
- [79] D. Fredkin and T. Koehler, “Hybrid method for computing demagnetizing fields,” *Magnetics, IEEE Transactions on*, vol. 26, no. 2, pp. 415–417, 1990.
- [80] M. Dahlen and A. Tveito, *Numerical methods and software tools in industrial mathematics*. 1997.
- [81] S. Cohen, Alan, and C. Hindmarsh, “Cvode, A Stiff/nonstiff Ode Solver In C,” in *in C. Computers in Physics*, pp. 138–143, 1996.
- [82] W. Rave, K. Ramstöck, and A. Hubert, “Corners and nucleation in micromagnetics1 ,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 183, no. 3, pp. 329 – 333, 1998.
- [83] K. J. Kirk, J. N. Chapman, and C. D. W. Wilkinson, “Switching fields and magnetostatic interactions of thin film magnetic nanoelements,” *Applied Physics Letters*, vol. 71, no. 4, 1997.
- [84] R. Hertel and H. Kronmuller, “Adaptive finite element mesh refinement techniques in three-dimensional micromagnetic modeling,” *Magnetics, IEEE Transactions on*, vol. 34, no. 6, pp. 3922–3930, 1998.
- [85] C. Geuzaine and J.-F. Remacle, “Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 79, no. 11, pp. 1309–1331, 2009.
-

Apéndices

Apêndice A

Codigo OOMMF (FD)

O simulador micromagnético *Object Oriented Micromagnetic Framework*, (OOMMF do inglês), é desenvolvido pelo NIST. Está desenhado para ser portátil, flexível e extensível, com uma interface gráfica fácil de usar. O código está escrito em C++ e TCL/TK. Pode ser utilizado em uma ampla gama de plataformas: Unix, Windows NT e Windows 9X. Não está estruturado em um só programa.

A.1 script

```
# MIF 2.1
# MIF Example File: nanohilos de Ni
# Description: Tcl script used to algorithmically defined Oxs_MultiAtlas
#              with a large number of regions. This example is
#              otherwise identical to manyregions-scriptatlas.mif.
set pi [expr 4*atan(1.0)]
set mu0 [expr 4*$pi*1e-7]
set radian [expr $pi/180]
RandomSeed 1

Parameter cellsizez 4e-9
Parameter angulo 0
Parameter radio 15e-9
Parameter distancia 40e-9
Parameter region_count 10
Parameter region_county 5
Parameter region_countz 2
Parameter H 500

set Hx [expr {$H*sin($angulo*$radian)}]
set Hz [expr {$H*cos($angulo*$radian)}]

set diametro [expr {2*$radio}]
set region_period [expr {$diametro+$distancia}]
set region_periody [expr {sin($pi/3)*$region_period}]
set xmax [expr {($region_count-1)*$region_period + $diametro
                +0.5*$region_period}]
set ymax [expr {$region_periody+2*($region_county-1)*$region_periody
                +$diametro}]
set zmax2 [expr {2*$diametro}]

set cellsize [expr {$xmax/floor($xmax/$cellsizez)}]
set zmax [expr {$zmax2*$region_countz}]
Parameter divisiones [expr {$xmax/$cellsize}]
set cellsizey [expr {$ymax/$divisiones}]

proc Ellipsoid { x y z } {
    set xrad [expr 2.*$x - 1. ]
    set yrad [expr 2.*$y - 1. ]
    set zrad [expr 2.*$z - 1. ]
    set test [expr $xrad*$xrad+$yrad*$yrad+$zrad*$zrad]
    if {$test>1.0} {return 0}
    return 1
}
```

```

}
# Use a Tcl for-loop to construct a string representing list of regions.
# This string is imported into the Oxs_MultiAtlas Specify block to
# define the regions.
for {set i 0} {$i<$region_count} {incr i} {
for {set j 0} {$j<$region_county} {incr j} {
for {set k 0} {$k<$region_countz} {incr k} {

    set atlas_string [subst {Oxs_ScriptAtlas:atlas {

        xrange {[expr {$i*$region_period}]
                [expr {$i*$region_period+$diametro}]}
        yrange {[expr {$j*2*$region_periody}]
                [expr {$j*2*$region_periody+$diametro}]}
        zrange {[expr {$k*$zmax2}]
                [expr {($k+1)*$zmax2}] }
        regions {region_$i$j$k}
        script {Ellipsoid}

    }}}
    lappend regions_list "atlas" $atlas_string
}
}
}

for {set i 0} {$i<$region_count} {incr i} {
for {set j 0} {$j<$region_county} {incr j} {
for {set k 0} {$k<$region_countz} {incr k} {
    set atlas_string [subst {Oxs_ScriptAtlas:atlas {

        xrange {[expr {0.5*$region_period+$i*$region_period}]
                [expr {0.5*$region_period+$i*$region_period+$diametro}]}
        yrange {[expr {$region_periody+2*$j*$region_periody}]
                [expr {$region_periody+2*$j*$region_periody+$diametro}]}
        zrange {[expr {$k*$zmax2}]
                [expr {($k+1)*$zmax2}] }
        regions {region_$i$j$k}
        script {Ellipsoid}

    }}}
    lappend regions_list1 "atlas" $atlas_string
}
}
}

Specify Oxs_MultiAtlas:atlas [subst {
    $regions_list $regions_list1
    xrange {0 $xmax}
    yrange {0 $ymax}
    zrange {0 $zmax}
}]
# Exchange is automatically 0 at locations where Ms=0.
# Oxs_UniformExchange does not allow more general variation of A. If
# more control is needed, use Oxs_Exchange6Ngbr.
Specify Oxs_RectangularMesh:mesh [subst {
    cellsize {$cellsize $cellsizey $cellsizez}
    atlas :atlas
}]

Specify Oxs_UniformExchange {
    A 1.05e-11 comment {A here is a single scalar, not a scalar field}
}

```

```

Specify Oxs_UZeeman [subst {
  multiplier [expr {0.001/$mu0}]
  Hrange {
    { $Hx 0 $Hz -$Hx 0 -$Hz 300 }
    { -$Hx 0 -$Hz $Hx 0 $Hz 300}
  }
}]

Specify Oxs_Demag {}

Specify Oxs_CGEvolve:evolve {
  energy_precision 2e-10
}

# Define an Oxs_AtlasVectorField object to define initial magnetization.
for {set i 0} {$i<$region_count} {incr i} {
  for {set j 0} {$j<$region_county} {incr j} {
    for {set k 0} {$k<$region_countz} {incr k} {

      set value_string [list 0 0 0]
      lappend m0_value_list "region_${i}${j}${k}" $value_string
    }
  }
}

Specify Oxs_AtlasVectorField:m0 [subst {
  atlas :atlas
  norm 1.0
  default_value {0 0 0}
  values { $m0_value_list }
}]

Specify Oxs_MinDriver [subst {
  evolver :evolve
  stopping_mxHxm 0.1
  mesh :mesh
  Ms { Oxs_AtlasScalarField {
    atlas :atlas
    default_value 413.8e3
    values {
      universe 0.0
    }
  }
  }}
  m0 :m0
}]

Destination archive mmArchive

Schedule DataTable archive Stage 1

```

Apêndice B

Código Nmag (FE)

Nmag é um software micromagnético escrito em Python e OCaml. Ele é baseado no método dos elementos finitos para o modelo micromagnético. Isto é conseguido por meio de:

- Proporciona uma linguagem de scripting (Python) de interface que permite o processamento em lote, bem como o uso interativo, e usando uma linguagem compilada rápida.
- Implementação do código de elementos finitos subjacentes que utiliza descrições simbólicas de elementos e funções de forma.
- Permite uma construção em geração de malha (dimensão arbitrária).
- Uma mini-linguagem abstrata para a especificação dos operadores diferenciais que também suporta a convenção de Einstein.
- Fundado o pacote em bibliotecas lineares baseados em MPI e ODE solver (PETSc e Sundials).

B.1 script

```
import nmag
from nmag import SI, at
import math as m
#create simulation object

for j in xrange(0,100,10):
    name1='simlc2p5NiAng'+str(j)
    sim = nmag.Simulation(name1)

# define magnetic material
    Ni = nmag.MagMaterial(name="Ni",
                          Ms=SI(413.8e3, "A/m"),
                          exchange_coupling=SI(1.05e-11, "J/m"))

#####
#numero de objetos por simular
    num=100
    matriz = []
    for i in xrange(num):
        t = ('elipsoid'+str(i), Ni)
        matriz.append(t)
#####

# load mesh: the mesh dimensions are scaled by 0.5 nm
    sim.load_mesh("elipsodes100D55.nmesh.h5",
                 matriz,
                 unit_length=SI(1e-9, "m"))

# set initial magnetisation
    sim.set_m([0.01,0.,0.])

    Hs = nmag.vector_set(direction=[0.,1.0*m.sin(j*m.pi/180.),
```

```

                                1.0*m.cos(j*m.pi/180.)),
norm_list=[3.0, 2.97, [], -3.0,
           -2.97, -2.94, [], 3.0],
units=1e5*SI('A/m'))

# loop over the applied fields Hs
sim.hysteresis(Hs, save=[('averages', at('convergence'))])

```

B.2 Geração da amostra para a malha

```

lc=2.5;
D=55;
a=30;
b=30;
c=60;
ii=0;
ij=1;
For j In {0:0:1}
kk=0;
For k In {0:4:1}

For i In {0:9:1}

n=ii*14;
Point(n+1) = {i*D, kk*D*(3.0/4)^0.5, j*c, lc};
Point(n+2) = {i*D+a/2, kk*D*(3.0/4)^0.5, j*c, lc};
Point(n+3) = {i*D, kk*D*(3.0/4)^0.5+b/2, j*c, lc};
Point(n+4) = {i*D-a/2, kk*D*(3.0/4)^0.5, j*c, lc};
Point(n+5) = {i*D, kk*D*(3.0/4)^0.5-b/2, j*c, lc};
Point(n+6) = {i*D, kk*D*(3.0/4)^0.5, c/2+j*c, lc};
Point(n+7) = {i*D, kk*D*(3.0/4)^0.5, -c/2+j*c, lc};

Point(n+8) = {i*D+D/2, (kk+1)*D*(3.0/4)^0.5, j*c, lc};
Point(n+9) = {i*D+D/2+a/2, (kk+1)*D*(3.0/4)^0.5, j*c, lc};
Point(n+10) = {i*D+D/2, (kk+1)*D*(3.0/4)^0.5+b/2, j*c, lc};
Point(n+11) = {i*D+D/2-a/2, (kk+1)*D*(3.0/4)^0.5, j*c, lc};
Point(n+12) = {i*D+D/2, (kk+1)*D*(3.0/4)^0.5-b/2, j*c, lc};
Point(n+13) = {i*D+D/2, (kk+1)*D*(3.0/4)^0.5, j*c+c/2, lc};
Point(n+14) = {i*D+D/2, (kk+1)*D*(3.0/4)^0.5, j*c-c/2, lc};

m=ii*60;
Ellipse(m+1) = {n+3, n+1, n+4, n+2};
Ellipse(m+2) = {n+2, n+1, n+4, n+5};
Ellipse(m+3) = {n+5, n+1, n+2, n+4};
Ellipse(m+4) = {n+4, n+1, n+2, n+3};
Ellipse(m+5) = {n+3, n+1, n+7, n+6};
Ellipse(m+6) = {n+6, n+1, n+7, n+5};
Ellipse(m+7) = {n+5, n+1, n+3, n+7};
Ellipse(m+8) = {n+7, n+1, n+5, n+3};
Ellipse(m+9) = {n+2, n+1, n+6, n+7};
Ellipse(m+10) = {n+7, n+1, n+6, n+4};
Ellipse(m+11) = {n+4, n+1, n+2, n+6};
Ellipse(m+12) = {n+6, n+1, n+7, n+2};

Ellipse(m+13) = {n+14, n+8, n+13, n+10};
Ellipse(m+14) = {n+10, n+8, n+12, n+13};
Ellipse(m+15) = {n+13, n+8, n+14, n+12};
Ellipse(m+16) = {n+12, n+8, n+14, n+11};
Ellipse(m+17) = {n+14, n+8, n+13, n+12};
Ellipse(m+18) = {n+11, n+8, n+9, n+10};
Ellipse(m+19) = {n+10, n+8, n+12, n+9};
Ellipse(m+20) = {n+9, n+8, n+11, n+12};
Ellipse(m+21) = {n+14, n+8, n+13, n+9};
Ellipse(m+22) = {n+9, n+8, n+11, n+13};

```

```

Ellipse(m+23) = {n+13, n+8, n+14, n+11};
Ellipse(m+24) = {n+11, n+8, n+13, n+14};

Line Loop(m+25) = {m+1, -(m+12), -(m+5)};
Ruled Surface(m+26) = {m+25};
Line Loop(m+27) = {m+12, m+2, -(m+6)};
Ruled Surface(m+28) = {m+27};
Line Loop(m+29) = {m+6, m+3, m+11};
Ruled Surface(m+30) = {m+29};
Line Loop(m+31) = {m+11, -(m+5), -(m+4)};
Ruled Surface(m+32) = {m+31};
Line Loop(m+33) = {m+2, m+7, -(m+9)};
Ruled Surface(m+34) = {m+33};
Line Loop(m+35) = {m+9, m+8, m+1};
Ruled Surface(m+36) = {m+35};
Line Loop(m+37) = {m+8, -(m+4), -(m+10)};
Ruled Surface(m+38) = {m+37};
Line Loop(m+39) = {m+10, -(m+3), m+7};
Ruled Surface(m+40) = {m+39};
Line Loop(m+41) = {m+22, -(m+14), m+19};
Ruled Surface(m+42) = {m+41};
Line Loop(m+43) = {m+23, m+18, m+14};
Ruled Surface(m+44) = {m+43};
Line Loop(m+45) = {m+23, -(m+16), -(m+15)};
Ruled Surface(m+46) = {m+45};
Line Loop(m+47) = {m+15, -(m+20), m+22};
Ruled Surface(m+48) = {m+47};
Line Loop(m+49) = {m+20, -(m+17), m+21};
Ruled Surface(m+50) = {m+49};
Line Loop(m+51) = {m+21, -(m+19), -(m+13)};
Ruled Surface(m+52) = {m+51};
Line Loop(m+53) = {m+18, -(m+13), -(m+24)};
Ruled Surface(m+54) = {m+53};
Line Loop(m+55) = {m+17, m+16, m+24};
Ruled Surface(m+56) = {m+55};
Surface Loop(m+57) = {m+28, m+26, m+36, m+34, m+40, m+38, m+32, m+30};
Volume(m+58) = {m+57};
Physical Volume(ij) = m+58;
Surface Loop(m+59) = {m+56, m+50, m+48, m+46, m+44, m+54, m+52, m+42};
Volume(m+60) = {m+59};
Physical Volume(ij+1) = m+60;
ii=ii+1;
ij=ij+2;
EndFor
kk=kk+2;
EndFor
EndFor
Mesh.CharacteristicLengthFactor = 5;

```

A qualidade de uma malha pode ser definido de várias maneiras. Em micromagnetismo, nós queremos geralmente tetraedros que têm bordas de comprimento quase idêntico (ou seja, não queremos que os tetraedros para ser plana).

nmeshpp usa a relação entre o raio da em-esfera (a esfera que pode simplesmente encaixar-se um tetraedro de modo que toque os lados) para raio de circum-esfera (a esfera que passa através dos quatro cantos), multiplicado pelo número de dimensões. Esse número é de 1.0 para um tetraedro perfeito com comprimentos das arestas idênticas, e 0 para um (efetivamente 2-dimensional) tetraedro completamente plana. A Informação da malha que se usa em FE se

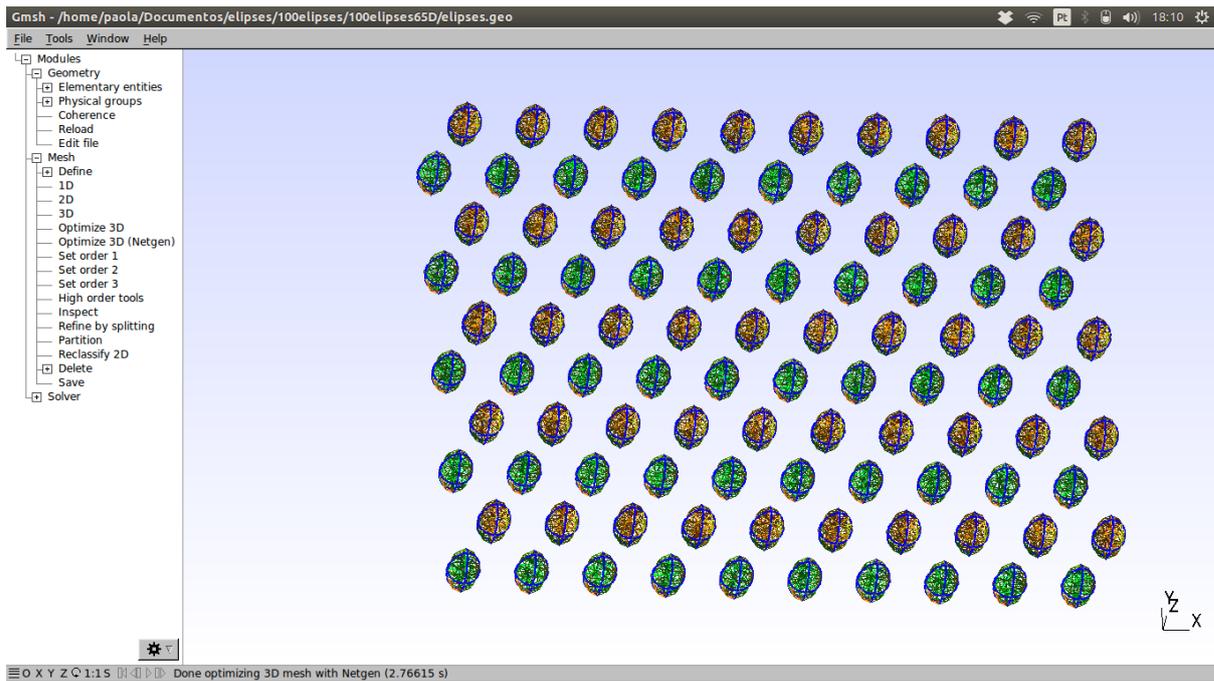


Figura B.1: Vista do programa GMSH que gera a malha da amostra a simular em Nmag.

observa nas tabelas B.1, B.2 mostra um histograma da distribuição do comprimento da aresta da malha e um histograma da distribuição desse parâmetro de qualidade para a malha.

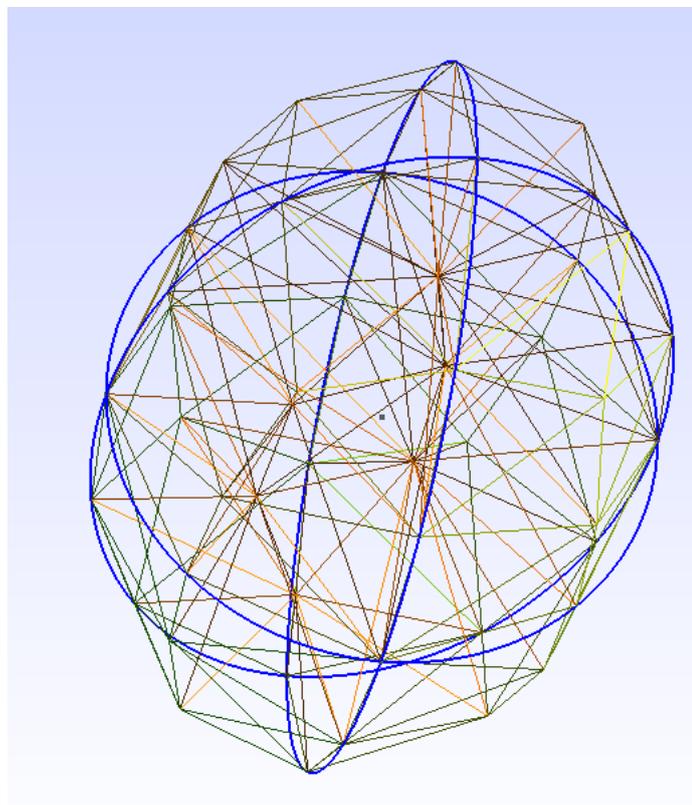


Figura B.2: Mostra da malha de um elipsoide feita com o programa GMSH.

Tabela B.1: Informação da malha do arranjo de 10×10 de 1 elipsoide

```

[a0 interval] counts = probability
[ 4.911- 7.420]    617 = 1.63% **
[ 7.420- 9.929]   6920 =18.24% *****
[ 9.929-12.438]  17279 =45.55% *****
[ 12.438-14.947] 10314 =27.19% *****
[ 14.947-17.456]  2388 = 6.30% *****
[ 17.456-19.964]   377 = 0.99% *
[ 19.964-22.473]   19 = 0.05% *
[ 22.473-24.982]    2 = 0.01% *
[ 24.982-27.491]    3 = 0.01% *
[ 27.491-30.000]   12 = 0.03% *

average  a0: <a0> = 11.755658
stand dev a0: <a0^2> = 2.223724^2
min and max :      =(4.911137,30.000000)

[qual interval] counts = probability
[ 0.000- 0.100]    0 = 0.00%
[ 0.100- 0.200]   12 = 0.08% *
[ 0.200- 0.300]    6 = 0.04% *
[ 0.300- 0.400]   24 = 0.16% *
[ 0.400- 0.500]  101 = 0.68% *
[ 0.500- 0.600]  332 = 2.24% ***
[ 0.600- 0.700] 1308 = 8.81% *****
[ 0.700- 0.800] 3894 =26.23% *****
[ 0.800- 0.900] 6088 =41.00% *****
[ 0.900- 1.000] 3083 =20.76% *****
    
```

Tabela B.2: Informação de malha em Nmag de 2 elipsoides

```

[a0 interval] counts = probability
[ 4.122- 6.825]    806 = 1.04% *
[ 6.825- 9.528]  12598 =16.27% *****
[ 9.528-12.232] 35627 =46.00% *****
[ 12.232-14.935] 21553 =27.83% *****
[ 14.935-17.639]  5400 = 6.97% *****
[ 17.639-20.342]  1011 = 1.31% **
[ 20.342-23.046]    86 = 0.11% *
[ 23.046-25.749]   61 = 0.08% *
[ 25.749-28.452]  211 = 0.27% *
[ 28.452-31.156]   92 = 0.12% *

average  a0: <a0> = 11.829017
stand dev a0: <a0^2> = 2.557340^2
min and max :      =(4.121528,31.155795)

[qual interval] counts = probability
[ 0.000- 0.100]    6 = 0.02% *
[ 0.100- 0.200]   108 = 0.36% *
[ 0.200- 0.300]   165 = 0.55% *
[ 0.300- 0.400]   280 = 0.93% **
[ 0.400- 0.500]   550 = 1.84% ***
[ 0.500- 0.600]  1279 = 4.27% *****
[ 0.600- 0.700]  3577 =11.94% *****
[ 0.700- 0.800]  8177 =27.30% *****
[ 0.800- 0.900] 10789 =36.02% *****
[ 0.900- 1.000]  5021 =16.76% *****
    
```