



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

HENRY HODELIN SHOMBERT

**SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA PARA O ESTUDO
DOS EFEITOS DE RUGOSIDADE EM NANOFIOS DE
NÍQUEL.**

Recife

2015

HENRY HODELIN SHOMBERT

**SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA PARA O ESTUDO
DOS EFEITOS DE RUGOSIDADE EM NANOFIOS DE
NÍQUEL.**

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

Orientador:

Prof. Dr. Eduardo Padrón Hernández

Universidade Federal de Pernambuco

Recife

2015

Catálogo na fonte
Bibliotecário Jefferson Luiz Alves Nazareno CRB4-1758

S559s Shombert, Henry Holdelin.
Simulação micromagnética para o estudo dos efeitos de rugosidade em nanofios de níquel. / Henry Holdelin Shombert. – Recife: O Autor, 2015.
95 f.: fig., tab.

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

1. Física da matéria condensada. 2. Materiais magnéticos. 3. Ferromagnetismo. 4. Nanofios de níquel. I. Padrón Hernández, Eduardo. (Orientador). II. Título.

538

CDD (22. ed.)

UFPE-FQ 2015-37

HENRY HODELIN SHOMBERT

SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA PARA O ESTUDO DOS EFEITOS DE RUGOSIDADE EM NANOFIOS DE NÍQUEL.

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

Aprovado em: 29/07/2015.

BANCA EXAMINADORA

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

Prof. Dr. Antonio Azevedo da Costa
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Adolfo Franco Júnior
Examinador Externo
Universidade Federal de Goiás

*Este trabajo es dedicado a mi familia
y en especial a mi madre.*

Agradecimentos

Dedico esta dissertação à minha família, como é grande demais posso cometer a injustiça de esquecer o nome de qualquer membro, mas com certeza eu não posso deixar de mencionar minha mãe, meu pai, meu irmão Marcos, meus avós Ana e Fela, minhas tias Idania, Tita e tio Frank. Porque sem o apoio deles, teria sido impossível enfrentar os desafios do mestrado em física.

Especialmente agradeço ao prof. Dr. Eduardo Padrón Hernández por sua contribuição à minha formação mediante críticas e sugestões, também por ser um magnífico amigo. É com grande prazer que também agradeço de forma especial ao prof. Dr. Pedro A. Mariño Castellanos pelas valiosas orientações na elaboração deste documento.

Quero agradecer a todos os amigos cubanos aqui no Brasil pelo apoio: Varona, Jesus, Amnis, Pedro, Yuset, Ariel, Ernesto, William e especialmente a Raudel, porque de uma maneira ou de outra ajudaram-me a não sentir-me tão longe da terra onde nasci. Agradeço especialmente, aos amigos brasileiros, pessoas maravilhosas, pelo acolhimento: Antonio, Gaby, Bismark, Lua, Eder, Mati, João Cassiano, David, a colega Cecília por seus valiosos comentários sobre os resultados da minha pesquisa, e Albinha por aquele maravilhoso doce de chocolate com côco. Aos colegas do Laboratório de Magnetismo: Diego, Von, Fred, Rebeca, Cláudio, Paola, Fábio, Bruno, Jurandi, Jandrews e todos os outros. Agradeço também aos colegas do curso de mestrado em física pela valiosa companhia.

Meu reconhecimento aos funcionários do Departamento de Física, pela contribuição no funcionamento dos laboratórios e da instituição como um todo, em especial a Alexandra Soares e Hilda Gomez. À instituição de fomento à pesquisa, CNPq e também às agências (FINEP, CAPES e FACEPE), pelo apoio financeiro e reconhecimento ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFPE. Também é importante reconhecer o papel fundamental do OOMMF para o desenvolvimento deste estudo.

Resumo

Neste trabalho é realizado um estudo sobre os efeitos das rugosidades nas propriedades magnéticas de nanofios de níquel para os modos de reversão curling e transversal. Para o estudo adotamos a simulação micromagnética como ferramenta fundamental e para ser implementada utilizamos OOMMF. Para mudar a rugosidade utilizamos uma cadeia de elipsóides e uma forma de variar este parâmetro foi fixando o comprimento dos fios em $1 \mu m$ e mudando o número de elipsóides na cadeia. Dessa forma a relação de aspecto dos elipsóides foi modificada para ser entendida como câmbios na rugosidade. Nas análises realizamos estudos dinâmicos e estáticos da reversão dos momentos. A simulação se baseia fundamentalmente na resolução da equação LLG. Nos estudos dinâmicos monitoramos a dependência temporal dos mapas de momentos e das componentes transversais da magnetização depois de ser invertido o campo aplicado. Foram simulados os ciclos de histerese através da minimização da energia livre de Gibbs. Nos estudos estáticos monitoramos a dependência angular do campo coercitivo, campo de comutação e a magnetização remanente. Observamos em modo geral que há grandes efeitos das rugosidades sobre as propriedades magnéticas e que nossos resultados reproduzem os reportados na literatura assim como as curvas experimentais.

Palavras-chave: Nanofio de níquel. Propriedades magnéticas. Micromagnetismo. Modo curling. Modo transversal. Efeitos de rugosidade.

Abstract

This work is a study on the effects of roughness on the magnetic properties of nickel nanowires for their reversal modes (curling and transversal). For the study we adopted the micromagnetic simulation as a fundamental tool and we used OOMMF to implemented. To change the roughness use ellipsoids chain and a way to vary this parameter was securing the length of the wires in $1 \mu m$ and changing the number of ellipsoids in the sequence. Thus the ellipsoids of the aspect ratio has been modified to be understood as the exchange roughness. In the analyzes we perform static and dynamic studies of the reversal of moments. The simulation is based largely on the resolution of the LLG equation. In dynamic studies we monitor the time dependence of the maps of magnetic moments and the transverse components of the magnetization after being reversed the field applied. The hysteresis cycles were simulated by minimization of Gibbs free energy. In static studies we monitor the angular dependence of the coercive field, the switching field and remanent magnetization. We observe in general that there are major effects of roughness on the magnetic properties and that our results reproduce the reported in the literature as well as the experimental curves.

Keywords: Nanowire nickel. Magnetic properties. Micromagnetism. Curling mode. Transverse mode. Roughness effects.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Exemplo de ciclo de histerese magnética.	21
Figura 2 – Magnetização reduzida M/M_s em função do campo magnético reduzido $h = M_s H/K$, K é a primeira constante de anisotropia magnetocristalina. Diferença entre o campo coercitivo e o campo de comutação (também chamado campo de transição ou switching field), no ciclo de histerese magnética (1).	22
Figura 3 – Representação das coordenadas espaciais e angulares de dois spins vizinhos (2).	25
Figura 4 – Representação do campo desmagnetizante em uma amostra retangular (3).	26
Figura 5 – Dinâmica da magnetização na presença de um campo magnético efetivo (4).	33
Figura 6 – Representação da discretização da amostra magnética numa rede de células individuais de volume $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ (4).	36
Figura 7 – Visualização de como o aumento do número de células facilita a modelagem numérica (5).	37
Figura 8 – Esquema do método de obtenção das membranas <i>track-etch</i> (6).	39
Figura 9 – Esquema da obtenção de moldes de alumina (7).	40
Figura 10 – Imagem de microscopia eletrônica mostrando uma membrana de óxido de alumínio altamente ordenada (8).	40
Figura 11 – Esquema de instalação para a obtenção de nanofios em moldes (9).	41
Figura 12 – Esquema de nanofios obtidos em membranas (7).	42
Figura 13 – Modos de reversão da magnetização, possíveis num cilindro infinito. De esquerda a direita, a) modo coerente, b) modo curling e c) buckling (10)	43
Figura 14 – Campo de nucleação reduzido como função do raio reduzido do cilindro, para diferentes modos de reversão da magnetização (11).	44
Figura 15 – Dependência angular do campo de comutação para o nanofio de Ni com 95 nm de diâmetro (12).	45
Figura 16 – Dependência angular do campo de comutação para o nanofio de Ni com 55 nm de diâmetro (12).	46
Figura 17 – Dependência angular do campo de comutação para o nanofio de Ni obtida para diferentes razões de aspecto (13).	47
Figura 18 – Modo de reversão transversal, encontrado por Hertel através de simulações computacionais (10)	47
Figura 19 – Configuração inicial do nanofio com forma cilíndrica	51

Figura 20 – Campo desmagnetizante na configuração inicial da magnetização do nanofio com forma cilíndrica.	52
Figura 21 – Início do processo de inversão da magnetização do nanofio com forma cilíndrica $t=25$ ps	53
Figura 22 – Processo de reversão da magnetização na sua primeira fase $t=25$ ps	54
Figura 23 – Reversão da magnetização, $t=85$ ps	55
Figura 24 – Processo de reversão da magnetização	56
Figura 25 – Evolução da magnetização nos eixos x e y durante o processo de reversão.	57
Figura 26 – Evolução da magnetização no eixo do nanofio durante o processo de reversão.	57
Figura 27 – Início do processo de reversão da magnetização no nanofio elipsoidal	58
Figura 28 – Início do processo de reversão da magnetização no nanofio elipsoidal	58
Figura 29 – Expansão das paredes de domínio para as extremidades e centro do nanofio elipsoidal, $t = 65ps$	59
Figura 30 – Fase final do processo de reversão da magnetização do nanofio, elipsoidal.	60
Figura 31 – Evolução no tempo dos valores médios das componentes da magnetização no nanofio com forma de elipsóide nas primeiras fases do processo de reversão	60
Figura 32 – Evolução no tempo dos valores médios das componentes da magnetização no nanofio com forma de elipsóide nas fases finais do processo de reversão	61
Figura 33 – Configurações de magnetização nas fases iniciais da reversão do nanofio simulado como uma sequência de dois elipsóides	61
Figura 34 – Configurações de magnetização nas fases finais da reversão do nanofio simulado como uma sequência de dois elipsóides	62
Figura 35 – Evolução temporal do valor médio das componentes da magnetização no nanofio simulado como uma cadeia de dois elipsóides. Da esquerda para direita: valor meio da componente da magnetização no eixo do nanofio, valores médios das componentes nos eixos x e y	63
Figura 36 – Evolução temporal da magnetização no nanofio composto por 8 elipsóides.	63
Figura 37 – Início do processo de reversão no nanofio composto por 20 elipsóides, $t = 20$ ps	64
Figura 38 – Configuração da magnetização no nanofio composto por 20 elipsóides, $t = 40$ ps	65
Figura 39 – Mudança do campo desmagnetizante na propagação do processo de reversão entre os elipóides	65
Figura 40 – Início e propagação da reversão da magnetização nos elipsóides do nanofio	66
Figura 41 – Detalhes da propagação da reversão da magnetização entre os elipsóides do nanofio	66

Figura 42 – Fase final da reversão da magnetização no nanofio de 20 elipsóides	67
Figura 43 – Propagação do início da reversão da magnetização entre os elipsóides do nanofio	68
Figura 44 – Propagação do início da reversão da magnetização entre os elipsóides do nanofio	68
Figura 45 – Propagação do início da reversão da magnetização entre os elipsóides do nanofio	69
Figura 46 – Propagação do início da reversão da magnetização entre os elipsóides do nanofio	70
Figura 47 – Evolução temporal da energia nos nanofios em modo de reversão curling	70
Figura 48 – Evolução temporal do valor médio da componente da magnetização no eixo do nanofio das configurações em modo curling	71
Figura 49 – Ciclos de histerese representativos das configurações simuladas com o campo aplicado no eixo do nanofio ($\theta = 0$), n é o número de elipsóides da configuração	73
Figura 50 – Ciclos de histerese do nanofio formado por 4 elipsóides para vários ângulos	74
Figura 51 – Ciclos de histerese do nanofio composto por 4 elipsóides nos ângulos onde não é possível definir o campo de comutação.	74
Figura 52 – Dependência angular da magnetização remanente no modo de reversão curling (a notação número-E indica o número de elipsóides da configuração).	75
Figura 53 – Dependência angular do campo coercitivo das configurações simuladas no modo de reversão curling (a notação número-E indica o número de elipsóides da configuração).	75
Figura 54 – Dependência angular do campo de comutação das configurações simuladas no modo de reversão curling (a notação número-E indica o número de elipsóides da configuração)	76
Figura 55 – A configuração inicial da magnetização não sofre modificações até $t = 15$ ns após aplicado o campo	78
Figura 56 – Campo desmagnetizante e configuração da magnetização do nanofio cilíndrico no instante $t = 15$ ns	79
Figura 57 – Início do processo de reversão no cilindro com 16 nm de diâmetro, $t = 17$ ns	79
Figura 58 – Propagação da reversão da magnetização no cilindro com 16 nm de diâmetro em sua primeira fase	80
Figura 59 – Oscilação dos valores médios das componentes da magnetização durante a reversão em modo transversal	81
Figura 60 – Segunda fase de reversão, formação de mais paredes de domínio.	81
Figura 61 – Evolução temporal do valor médio da magnetização no eixo do nanofio	81

Figura 62 – Reversão da magnetização no nanofio como uma sequência de 2 elipsóides	82
Figura 63 – Reversão da magnetização no nanofio como uma sequência de 20 elipsóides	82
Figura 64 – Evolução temporal da energia nos nanofios em modo de reversão transversal	83
Figura 65 – Evolução temporal do valor meio da magnetização de todas as configurações simuladas para a reversão com modo transversal	83
Figura 66 – Ciclos de histerese representativos das configurações simuladas com o campo aplicado no eixo do nanofio ($\theta = 0$), n é o número de elipsóides da configuração	84
Figura 67 – Ciclos de histerese do nanafio formado por 4 elipsóides para vários ângulos	85
Figura 68 – Ciclos de histerese do nanofio composto por 4 elipsóides nos ângulos onde não é possível definir o campo de comutação.	86
Figura 69 – Dependências angulares da magnetização remanente das configurações (a notação número-E indica o número de elipsóides da configuração) .	87
Figura 70 – Dependências angulares do campo coercitivo das configurações (a notação número-E indica o número de elipsóides da configuração).	87
Figura 71 – Dependências angulares do campo de comutação das configurações (a notação número-E indica o número de elipsóides da configuração). . .	88

Lista de tabelas

Tabela 1 – Características dos simuladores micromagnéticos mais utilizados. . . .	34
Tabela 2 – Dimensões das células utilizadas nas simulações para o modo de reversão curling	50
Tabela 3 – Dimensões das células utilizadas nas simulações para o modo de reversão transversal	77

Lista de símbolos

\vec{M}	Magnetização
M_s	Magnetização de saturação
M_r	Magnetização remanente
H_c	Coercitividade ou campo coercitivo
H_s	Campo de saturação
\vec{J}_s	Polarização espontânea
\vec{M}_s	Magnetização espontânea
T	Temperatura
\vec{H}	Campo aplicado
σ	Tensor de tensão
ε	Tensor de deformações
μ_0	permeabilidade do vácuo
γ_i	Cossenos diretores
\vec{r}	Vetor posição
ϕ_t	Energia livre de Gibbs
ϕ'_t	Densidade de energia livre de Gibbs
U	Densidade de energia interna
S	Entropia por unidade de volume
dV	Diferencial de volume
J_{ij}	Integral de troca
\vec{S}_i, \vec{S}_j	Spins nas posições \vec{r}_i, \vec{r}_j
J_o	Integral de troca entre vizinhos próximos
$\frac{\partial}{\partial \alpha}$	Derivada parcial respecta a α

∇	Operador diferencial $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$
Δ	Operador diferencial $\nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$
\int_V	Integral no volume V
H_{ex}	Hamiltoniano da interação de troca
A	Constante de troca
σ_b	Densidade superficial de carga
$\vec{H}_s(\vec{r})$	Campo dipolar no ponto \vec{r}
$\rho(\vec{r})$	Densidade volumétrica de carga
ϕ_s	Energia dipolar
ϕ'_s	Densidade volumétrica de energia dipolar
ϕ_k	Energia magnetocristalina
ϕ_{el}	Energia magnetolástica
c	Tensor elasticidade
ϵ^T	Tensor de deformações
ϵ^{ext}	Tensor de deformações devido a tensões aplicadas
ϵ^{def}	Tensor de deformações devido aos defeitos
ϵ^Q	Tensor de deformações espontâneas devidas ao ordenamento dos spins
ϵ^{el}	Tensor de deformações devidas à tensões magnetostrictivas não homogêneas
\vec{H}_{eff}	Campo efetivo
$\vec{H}_{k,i}$	Componente do campo efetivo da energia magnetocristalina na direção i
$\vec{H}_{\sigma,i}$	Componente do campo efetivo da energia magnetostática na direção i
$\vec{H}_{s,i}$	Componente do campo efetivo da energia de troca na direção i
$\vec{H}_{ext,i}$	Componente do campo efetivo da energia Zeeman na direção i
\vec{L}	Torque
\vec{P}	Momento angular

$U^{(\alpha)}$	Potencial magnético na região α
φ	Ângulo azimutal
θ	Ângulo polar
γ	Razão giromagnética
g	Fator de Landé
e	Carga do elétron
m	Massa do elétron
v_c	Velocidade da luz
λ	Taxa de relaxação
G	Termo de amortecimento de Gilbert
N_i	Número de células no eixo i
L_n	Comprimento da amostra no eixo i
l_{ext}	Comprimento de troca
l_D	Comprimento de desmagnetização
R_c	Raio crítico de transição entre os modos curling e coerente
q_1	1,8412
π	3,14159
S_r	Raio reduzido
S_c	Raio reduzido crítico de transição entre os modos curling e coerente
g_β^α	Coefficiente de ordem β , da expansão em série de Taylor da função α
$K = k_0$	Primeira constante magnetocristalina

Sumário

	Introdução	17
1	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	21
1.1	Conceitos básicos sobre magnetismo	21
1.2	Micromagnetismo	23
1.2.1	Energia livre de Gibbs.	23
1.2.2	Algumas formas de energias presentes em sistemas ferromagnéticos	24
1.2.3	Equações de Brown e dinâmica da magnetização	29
1.2.4	Simulações numéricas em micromagnetismo. Object Oriented MicroMagnetic Framework (OOMMF).	33
1.3	Revisão bibliográfica de nanofios ferromagnéticos de níquel.	38
2	EFEITO DA RUGOSIDADE NA REVERSÃO DA MAGNETIZAÇÃO EM MODO CURLING	49
2.1	Dinâmica da reversão da magnetização	50
2.1.1	Cilindro	51
2.1.2	Nanofio simulado como um conjunto de poucos elipsóides	57
2.1.3	Nanofio simulado como um número médio de elipsóides	64
2.1.4	Nanofio simulado como um conjunto de muitos elipsóides	68
2.2	Estática	72
3	EFEITO DA RUGOSIDADE NA REVERSÃO DA MAGNETIZAÇÃO EM MODO TRANSVERSAL	77
3.1	Dinâmica do processo de reversão da magnetização	78
3.1.1	Cilindro	78
3.1.2	Nanofio simulado como um conjunto de elipsóides	81
3.2	Estática	84
4	CONCLUSÃO	89
5	PERSPECTIVAS PARA TRABALHOS FUTUROS	91
	REFERÊNCIAS	93

Introdução

A nanotecnologia engloba produção e aplicação de sistemas físicos, químicos e biológicos. Em escalas de tamanho, que vão desde átomos ou moléculas individuais, até dimensões submicrométricas e na integração das nanoestruturas resultantes em sistemas maiores. Este tipo de tecnologia promete ter, um impacto econômico e social profundo neste século. Provavelmente comparável com o impacto que teve a tecnologia de semicondutores, a tecnologia da informação e os avanços em biologia celular e molecular no século XX. Tipicamente são estudadas partículas, cascas, nanofios e outros objetos.

O estudo de nanofios ferromagnéticos é muito importante devido às suas potenciais aplicações em dispositivos de gravação magnética de alta densidade, spintrônica (14), química (15), semicondutores (16), biossensores (15) e aplicações em microondas (17). Além disso, como os nanofios ferromagnéticos são obtidos usualmente por eletrodeposição em moldes de membranas de óxido de alumínio (AAO), o diâmetro dos nanofios pode ser controlado e sua disposição no espaço pode ser considerada uma rede regular de nanofios paralelos. Portanto, são considerados como um sistema reprodutível, versátil e de baixo custo para investigar processos de magnetização e fenômenos de transporte (18). Por isso são sistemas modelo para investigar interações em estruturas magnéticas unidimensionais (19).

Outros moldes utilizados para a obtenção de nanofios são as membranas de polícarbonato mas, as membranas de AAO são mais atraentes devido às suas excelentes propriedades físicas. As membranas AAO são regulares, altamente ordenadas e produzidas por processos químicos de auto-ordenamento. O diâmetro dos poros está num intervalo entre 5 e 250 nm. A profundidade destes poros é desde várias centenas de nanômetros a micrómetros. Nas membranas de AAO estes dois parâmetros são controláveis o que permite uma flexibilidade significativa no crescimento de nanofios com vários diâmetros e relação de aspecto. Além disso, como nas membranas AAO é obtida uma densidade de poros elevada ($10^8 - 10^{11}$ poros/ cm^2), se alguém quisesse produzir em massa um nanomaterial pelo método de molde, as membranas com alta densidade de poros permitiria produzir um grande número de nanoestruturas por unidade de área de molde. As membranas AAO também são termicamente estáveis a temperaturas de $900 - 1000^\circ C$, permitindo que sejam aplicados tratamentos térmicos nas matrizes de nanofios magnéticos. Além de serem resistentes à corrosão e ambientalmente seguras, por isso, são usadas na produção de nanofios com uma vasta gama de materiais, incluindo metais, semicondutores, polímeros e cerâmicas (8).

As propriedades magnéticas de nanofios ferromagnéticos têm sido investigadas

com especial ênfase nos temas seguintes: (i) fatores determinantes no eixo efetivo de fácil magnetização dos nanofios; (ii) processos de reversão da magnetização; (iii) interações magnéticas entre nanofios (8). Para se estudar qualquer um destes problemas é essencial especificar cuidadosamente a história magnética da amostra. Porque pode-se obter estruturas de magnetização completamente diferente nos mesmos cristais, com o mesmo valor de campo magnético, mudando apenas a história do campo aplicado. A especificação da história magnética do material em estudo é feita assumindo que a amostra é inicialmente saturada em um campo magnético suficientemente forte. Reduzindo lentamente até zero, e em seguida aumentando lentamente, em sentido oposto. Este procedimento conduz à obtenção da curva de histerese. Uma vez que a história do campo foi especificada se tenta encontrar o valor do campo, para o qual o estado saturado já não é estável e em que a reversão começa (20). Os modelos analíticos utilizam este valor do campo citado acima, chamado campo de nucleação, para determinar qual dos possíveis modos de reversão da magnetização apresentará a amostra. Os possíveis modos de reversão da magnetização são obtidos como auto-estados de um conjunto de equações diferenciais, desenvolvido por Brown na descrição dos processos de magnetização em materiais. Conhecendo o modo de reversão da magnetização da amostra pode-se obter a curva de histerese, conseguindo desta forma os parâmetros característicos da reversão da magnetização (21). A teoria não têm continuado, desenvolvendo-se significativamente com o procedimento descrito. Isso porque a diferença entre teoria e experimentos levaram à conclusão de que os processos de magnetização em cristais reais são sensíveis a defeitos superficiais, rugosidade e outros defeitos nos cristais que são desprezados na teoria simplificada (20). Sendo então necessário dessa forma, incluir esses defeitos para melhorar a teoria.

No caso de nanofios de metais de transição, um dos defeitos é a forma irregular que estes apresentam na superfície (22). A partir de imagens do TEM, tem-se comprovado que cada nanofio se assemelha a uma cadeia de esferóides (23, 12) ou cadeia de elipsóides (13) de modo que o modelo de cadeia de elipsóides tem sido usado para a interpretação do processo de inversão de magnetização dos nanofios. Nestes modelos, a rugosidade é a irregularidade da superfície, devido à forma elipsoidal dos grãos cristalinos. Usando essa abordagem, vários estudos foram realizados: Jacobs e Bean (24) propuseram um modelo de esferas, para investigar o mecanismo de inversão da magnetização das partículas alongadas finas. Richter e Hempel propuseram um modelo que consiste em uma cadeia de dois elipsóides considerando a anisotropia magnetocristalina, a fim de estudar a reversão da magnetização em partículas de Ba-ferrita (25, 26).

Ainda assim somente foi possível explicar a dependência angular do campo de comutação de um nanofio de níquel, a partir da inclusão da rugosidade (definida como a irregularidade da superfície devida aos grãos cristalinos que formam o nanofio) (13, 12). Uma outra variação significativa da dependência angular do campo coercitivo foi encontrada experimentalmente em nanofios de níquel submetidos a tratamento térmico (27). Tal

variação poderia ser explicada como um efeito da alteração na rugosidade (aumento do tamanho dos elipsóides), devido ao tratamento térmico.

Além disso, existem várias contradições na literatura, quando os nanofios são geralmente considerados como cilindros. Por exemplo, G. C. Han, utilizou a dependência angular do campo coercitivo para determinar dois modos de reversão da magnetização: modo curling, quando o diâmetro d dos nanofios é maior do que 50 nm e modo coerente quando o diâmetro é inferior a 30 nm (28). De acordo com a hipótese de que os nanofios têm forma de cilindros devem aparecer apenas os dois modos de reversão mencionados por G. C. Han e no diâmetro crítico $d_c = 40$ nm deve ocorrer a transição de modo de reversão de curling para coerente (12). Enquanto Wernsdorfer descobriu que, para $d = 50$ nm aparece um pico no gráfico da dependência angular do campo de comutação para o ângulo $\theta = 0^\circ$, que não pode ser explicado por nenhum dos modos de reversão mencionados acima. Xiancong (13) conseguiu reproduzir o pico na dependência angular do campo coercitivo. Utilizando um modelo de cadeia de elipsoides assumindo o modo de reversão coerente para um diâmetro $d = 60$ nm $> d_c$. Finalmente as simulações computacionais de Hertel resultaram em dois modos de reversão possíveis nos nanofios cilíndricos: curling e transversal (29). Contudo, sendo conhecido que há influência da rugosidade na dependência angular do campo coercitivo e que o campo coercitivo é usado para identificar os modos de reversão da magnetização na análise de nanofios ferromagnéticos (28), não é muito estudado, o efeito de rugosidade sobre o processo de reversão da magnetização.

O tratamento de um problema como este em materiais nanoestruturados, que trata sobre a correlação entre a microestrutura e propriedades magnéticas muitas vezes requer técnicas numéricas e computacionais. Estas técnicas são, em muitos aspectos, complementares às técnicas experimentais, especialmente quando se estudam mecanismos de reversão da magnetização. Estudos experimentais, têm sérias dificuldades em estudar as propriedades magnéticas em escalas temporais de nanossegundos e espaciais de nanômetros. Ao mesmo tempo, a modelagem da propagação dos modos de reversão nessas escalas temporais e espaciais é possível. A utilização de técnicas computacionais com base no micromagnetismo fornecem uma maneira de obter relações realistas entre microestrutura e as propriedades magnéticas (30). Para este propósito têm sido especialmente útil o simulador Object Oriented MicroMagnetic Framework (OOMMF) criado pelo National Institute of Standard and Technology (NIST). Portanto, o objetivo deste trabalho é estudar a influência dos efeitos da rugosidade no processo de reversão da magnetização de nanofios mediante simulações micromagnéticas utilizando o simulador OOMMF.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma: no primeiro capítulo fazemos uma revisão da teoria. Onde se expõem os principais conceitos do magnetismo relevantes para nossa investigação, a metodologia do micromagnetismo para o estudo de materiais nanoestruturados e se descrevem claramente os estudos na literatura que motivaram esta

pesquisa. No segundo capítulo apresentamos os resultados das simulações do nanofio com diâmetro de 40 nm, em que de acordo com a literatura é esperado o modo de reversão curling (29) (um dos dois possíveis modos de reversão). No terceiro capítulo apresentamos os resultados das simulações do nanofio com diâmetro de 16 nm, em que de acordo com a literatura é esperado o modo de possível de reversão (31). Para depois apresentar as conclusões e perspectivas de nosso trabalho.

1 Fundamentação teórica

1.1 Conceitos básicos sobre magnetismo

As categorias básicas de comportamento magnético de materiais são: diamagnetismo, paramagnetismo e magnetismo coletivo (ferromagnetismo, antiferromagnetismo, ferrimagnetismo). No caso específico do magnetismo coletivo foi encontrada uma dependência não linear da magnetização com o campo. Para explicar esse comportamento, Weiss postulou que ferromagnetos são formados por domínios magnéticos. Cada domínio tem magnetização igual ao valor M_s (valor máximo da magnetização do material, conhecido como magnetização de saturação) e os momentos magnéticos apontam no mesmo sentido. Como a direção da magnetização varia de um domínio para outro, o valor medido da magnetização, em uma amostra em uma direção, consiste na magnetização média nessa direção. A região de transição entre domínios é chamada parede de domínio. O conceito de domínio magnético em materiais ferromagnéticos permite explicar como, uma amostra pode estar num estado de magnetização total igual a zero, mesmo com a magnetização espontânea local ser diferente de zero. Isso é possível pois se em geral as orientações através dos domínios de um grande volume de material são aleatórias.

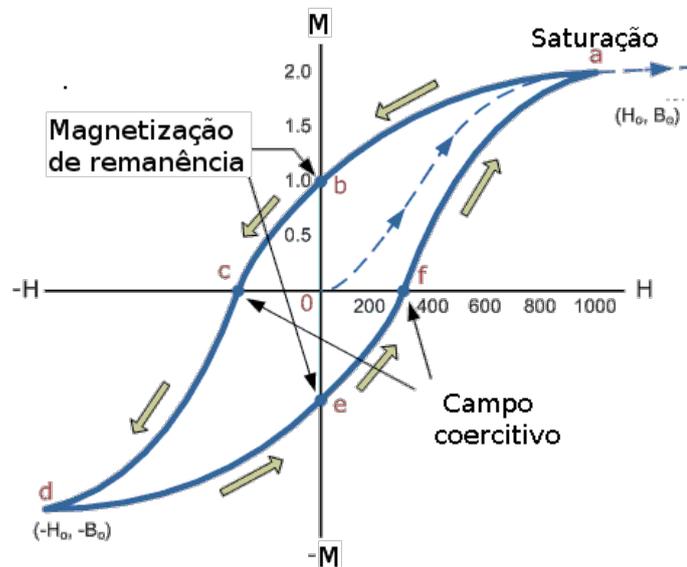


Figura 1 – Exemplo de ciclo de histerese magnética.

A característica distintiva do magnetismo coletivo é a dependência da magnetização com o campo aplicado, que pode ser vista claramente no ciclo de histerese magnética. Para obter um desses ciclos se aplica na amostra um campo magnético que aumenta lentamente até à saturação (Figura 1) a partir da origem do gráfico até ao ponto "a"). Registrando as

alterações correspondentes da magnetização \vec{M} na direção do campo aplicado. Depois o campo magnético é diminuído até inverter a sua direção e aumentando seu valor nessa nova direção até saturar a amostra (Figura 1 deixando o ponto "a", passa pelo ponto "c" chegando ao ponto "d"). Daí é diminuído o valor do campo até inverter novamente sua direção e saturar a amostra no sentido inicial de aplicação do campo (Figura 1 deixando o ponto "d", passa pelo ponto "f" chegando ao ponto "a"). A forma específica da curva de histerese, depende das características particulares do material, como a geometria (tamanho e forma) da amostra, a microestrutura (a estrutura interna), a orientação do campo externo, \vec{H} , em relação a um eixo determinado, a história magnética, e as interações entre as regiões da amostra (32, 33).

Os parâmetros que caracterizam a curva de histerese (veja a Figura 1) são a magnetização de saturação, M_s que é uma propriedade do material e não depende da forma da amostra. A magnetização remanente, M_r que é a magnetização quando o campo aplicado volta a ser zero, $M_r = M(H = 0)$ ou seja, a magnetização com que o material permanece quando o campo externo é removido (depois de ter sido levado para o estado saturado). A coercividade H_c do sistema é o campo externo necessário para levar a magnetização isotermicamente para zero partindo de M_r . O campo de saturação, H_s que é o campo externo necessário para alcançar o estado saturado, isto é, para alcançar a magnetização saturação M_s (33).

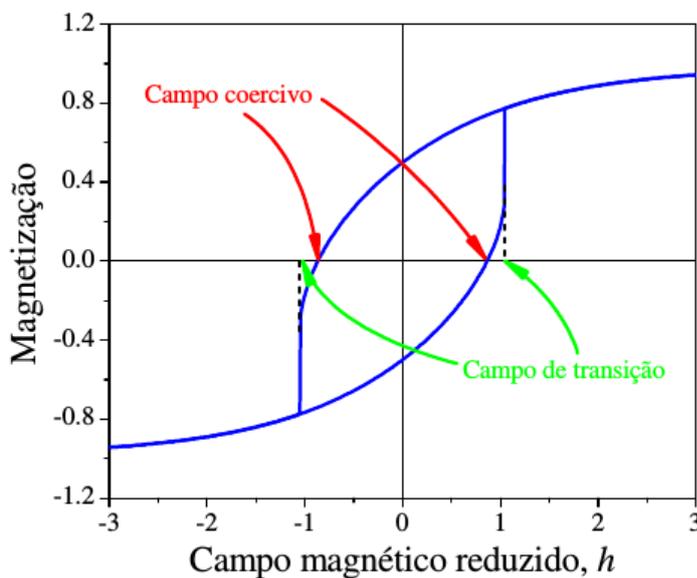


Figura 2 – Magnetização reduzida M/M_s em função do campo magnético reduzido $h = M_s H / K$, K é a primeira constante de anisotropia magnetocristalina. Diferença entre o campo coercitivo e o campo de comutação (também chamado campo de transição ou switching field), no ciclo de histerese magnética (1).

Há também outros parâmetros importantes no ciclo de histerese; o campo de comutação (também chamado campo de transição); no qual em que ocorre a mudança

abrupta da posição de equilíbrio estável da magnetização e provoca um *salto* na curva de histerese, como indicado na Figura 2. O outro parâmetro é o campo de nucleação que é o valor do campo onde o estado de saturação da amostra não é mais estável (ponto em que a magnetização da amostra começa se desviar do valor de magnetização de saturação).

A resposta magnética dos materiais ferromagnéticos é determinada por um conjunto de interações que ocorrem no interior do material. O comportamento de sistemas físicos tão complexos é descrito pelas variações na energia livre. O mínimo local ou absoluto de energia define o estado do sistema. Mudando o valor do campo estes mínimos se deslocam e levam a magnetização do sistema a mudanças que geram o comportamento complexo antes mencionado. Na próxima seção há uma descrição de metodologias muito utilizadas no estudo de nanomateriais magnéticos .

1.2 Micromagnetismo

Existem dois modelos fundamentais para a descrição dos processos de magnetização: a teoria de domínios e o micromagnetismo, desenvolvidos nessa ordem. Ambos modelos são muito úteis para a descrição dos processos de magnetização em materiais ferromagnéticos. No entanto, os limites de aplicabilidade dos dois modelos são diferentes.

O parâmetro característico, que determina a utilidade de qualquer um dos modelos, é o tamanho da parede do domínio δ de cada material. A teoria de domínios assume uma escala de dimensão dos parâmetros microestruturais grande em comparação com a largura da parede do domínio, enquanto micromagnetismo estuda processos numa escala comparável a esta magnitude.

1.2.1 Energia livre de Gibbs.

A teoria do micromagnetismo foi desenvolvida nas décadas de 1930 e 1940. Com esta teoria há uma tentativa para preencher o vazio entre a teoria fenomenológica de Maxwell de campos eletromagnéticos e a Mecânica Quântica. Na teoria de Maxwell é assumida uma escala de dimensões macroscópicas, com um limite inferior macroscopicamente pequeno, que permite aplicar conceitos tais como carga pontual. Mas esse limite inferior é escolhido tal que seja microscopicamente grande de modo que não se precise considerar efeitos quânticos. A Mecânica Quântica permite a descrição das propriedades magnéticas em nível atômico, mas para o estudo de sistemas que envolvem muitos átomos é ineficiente. Por isso, nenhuma das duas teorias são adequadas para a descrição de fenômenos cooperativos e interativos, como processos macroscópicos de magnetização ou laços de histerese de estruturas ordenadas de spin.

No âmbito do micromagnetismo, o estado magnético, é totalmente descrito, quando esta bem definida a magnetização espontânea \vec{M} , para uma temperatura T , campo aplicado

\vec{H} e distribuição de tensão elástica σ . A magnetização espontânea pode ser descrita pelos cossenos diretores $\gamma_i(\vec{r})$:

$$\vec{M} = |\vec{M}(\vec{r})| \sum_{i=1}^3 \vec{i}_i \gamma_i(\vec{r}). \quad (1.1)$$

A fim de obter a distribuição de polarização ou magnetização espontânea é utilizada a densidade de energia livre de Gibbs:

$$\phi'_t = U - TS - \sigma \cdot \cdot \varepsilon - \mu_0 \vec{M} \cdot \vec{H}. \quad (1.2)$$

Aqui U , S , ε , σ , μ_0 , T e \vec{H} são a densidade de energia interna, a entropia por unidade de volume, o tensor de tensão, tensor estresse, permeabilidade do vácuo, temperatura e o campo aplicado respectivamente. O micromagnetismo geralmente trata, a determinação do vector de magnetização \vec{M} expressando a energia livre $U - TS$, como um conjunto de termos que correspondem às interações internas da amostra. No equilíbrio termodinâmico a energia de Gibbs tem um mínimo:

$$\delta\phi_t = \int_V \delta\phi'_t dV = 0. \quad (1.3)$$

Para descrever melhor como funciona o micromagnetismo é útil conhecer as expressões analíticas das diferentes interações, que podem ser incluídas na energia livre. Na seguinte subseção é apresentada a origem de cada termo e suas expressões matemáticas.

1.2.2 Algumas formas de energias presentes em sistemas ferromagnéticos

As interações fundamentais nos sistemas ferromagnéticos incluem a de troca (com base numa descrição quântica), a que corresponde à energia magnetocristalina (originada da combinação da simetria do cristal com a interação spin-órbita), a magnetostática (devido ao campo externo e à forma do material), e a de magnetostricção (deformação da rede cristalina do material).

Començando pela interação de troca, sabemos que ela surge como resultado da superposição de funções de onda dos elétrons, dos átomos do material surge o ordenamento espontâneo dos spins. Dependendo do material, a interação de troca pode ser estabelecida diretamente entre spins, mas também pode ser mediada pelos elétrons de condução (interação RKKY) ou íons não magnéticos (interação de supertroca) (34). Para o caso mais geral, o Hamiltoniano da interação de troca é escrito como:

$$H_{ex} = -2 \sum_{i \neq j} J_{ij}(\vec{r}_{ij}) \vec{S}_i(\vec{r}_i) \cdot \vec{S}_j(\vec{r}_j), \quad (1.4)$$

onde J_{ij} é um coeficiente conhecido como integral de troca e \vec{S}_i, \vec{S}_j são os spins nas posições \vec{r}_i e \vec{r}_j respectivamente (Figura 3).

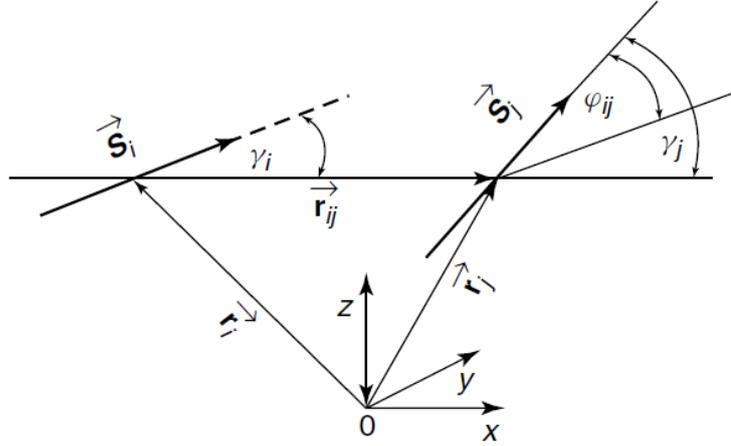


Figura 3 – Representação das coordenadas espaciais e angulares de dois spins vizinhos (2).

A equação 1.4 é conhecida como Hamiltoniano de Heisenberg. Em elétrons localizados com pequenas diferenças entre as orientações dos spins vizinhos e considerando apenas as interações entre íons mais próximos a densidade de energia de troca pode ser escrita como:

$$\phi'_{ex} = -2S^2 J_0 \frac{1}{\Omega} \sum_{j \neq i}^{nn} \cos \phi_{ij}, \quad (1.5)$$

onde J_0 é a integral de troca entre vizinhos mais próximos, ϕ_{ij} é o ângulo entre spins vizinhos (Figura 3). Escrever $\cos \phi_{ij}$ como uma função dos cossenos directores $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ leva a $\cos \phi_{ij} = \sum_{n=1}^3 \gamma_{n,i}(r_i) \gamma_{n,j}(r_j)$ e desenvolvendo $\gamma_{n,i,j}$ em série de Taylor é obtido:

$$\phi'_{ex} = A \{ (\nabla \gamma_1)^2 + (\nabla \gamma_2)^2 + (\nabla \gamma_3)^2 \}, \quad (1.6)$$

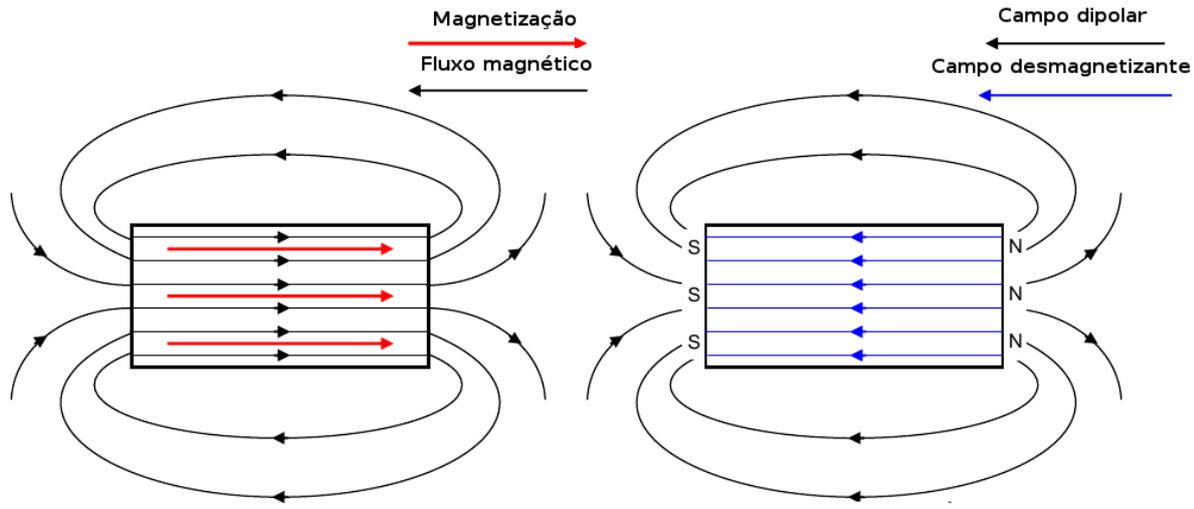
que é a equação mais utilizada em modelos analíticos e simulações computacionais, onde A é a constante de troca.

Quando é aplicado um campo magnético na região da mostra surge uma nova interação, conhecida como magnetostática, que tem duas fontes: O campo externo \vec{H} e os chamados campos dipolares \vec{H}_s resultantes da magnetização do próprio material. A energia magnetostática devida à interação com o campo externo, também chamada energia Zeeman pode expressar-se como a soma da interação dos momentos com o campo externo:

$$\phi'_h = g \mu_B \mu_0 \sum_i \vec{S}_i(\vec{r}_i) \cdot \vec{H}, \quad (1.7)$$

onde $g \approx 2$ é o fator de Lande, μ_B é o magneton de Bohr, $\vec{S}_i(\vec{r}_i)$ é o spin do íon i na posição \vec{r}_i .

A energia magnetostática dipolar é também chamada de energia do campo de dispersão (stray field). Após a aplicação do campo externo, os momentos magnéticos alinham-se com o campo. Isto vai induzir um conjunto de "cargas magnéticas" de superfície, as "cargas magnéticas" geram um campo magnético oposto ao externo aplicado (Figura 4). Esta contribuição também é chamada de campo desmagnetizante.



a) Os momentos magnéticos alinham-se com o campo b) As "cargas magnéticas" geram um campo magnético oposto ao externo aplicado

Figura 4 – Representação do campo desmagnetizante em uma amostra retangular (3).

Na descrição atômica dos momentos magnéticos o campo dipolar no ponto \vec{r} é determinado pela soma dos campos de dipolo magnético dos momentos $\mu_i(\vec{r}_i)$

$$\vec{H}_d(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_i \left[\frac{\vec{\mu}_i(\vec{r}_i)}{R^3} - \frac{3(\vec{\mu}_i(\vec{r}_i) \cdot \vec{R}) \vec{R}}{R^5} \right], \quad (1.8)$$

onde $\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}_i$. Utilizando $\nabla \cdot \vec{B} = 0$, $\vec{H}_d(\vec{r}) = 0$ e sabendo que

$$\vec{B}(\vec{r}) = \mu_0 \vec{H}_d(\vec{r}) + \mu_0 \vec{M}(\vec{r}), \quad (1.9)$$

teremos $\vec{H}_d(\vec{r})$ devido aos dipolos magnéticos com, $\nabla \times \vec{H}_d = 0$ é válida e \vec{H}_d é derivado de um potencial escalar $U(\vec{r})$:

$$\vec{H}_d(\vec{r}) = -\nabla U(\vec{r}). \quad (1.10)$$

Da condição $\nabla \cdot \vec{B} = 0$, é obtida a equação de Poisson:

$$\nabla^2 U = \nabla \cdot \vec{M}(\vec{r}) = -\rho(\vec{r}). \quad (1.11)$$

Aqui $\rho(\vec{r})$ é a densidade volumétrica de "cargas magnéticas". A solução geral de equação de Poisson pode ser escrita como a soma de dois contribuições

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{V_0} \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 \vec{r}' + \frac{1}{4\pi} \int_S \frac{\sigma(\vec{r}') df'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (1.12)$$

onde o primeiro termo corresponde as cargas volumétricas e o segundo termo corresponde as cargas sobre a superfície da amostra.

O campo magnetostático dipolar está relacionado com a energia dipolar magnetostática por meio da relação:

$$\phi'_s(r) = \frac{\mu_0}{2} \vec{H}_d^2(\vec{r}). \quad (1.13)$$

No caso de momentos magnéticos discretos $\vec{\mu}_i(\vec{r}_i)$, a energia de interação com outros dipolos magnéticos é dada por

$$\phi_s^{(i)}(r_i) = -\mu_0 \vec{\mu}_i(\vec{r}_i) \cdot \sum_{j \neq i} \vec{H}_d^{(j)}(\vec{r}_i), \quad (1.14)$$

$$\phi_s^{(i)}(r_i) = \frac{1}{2} \sum_i \phi_s^{(i)} = -\frac{1}{2} \mu_0 \sum_{j \neq i} \vec{\mu}_i(\vec{r}_i) \cdot \vec{H}_d^{(j)}(\vec{r}_i), \quad (1.15)$$

onde o fator 1/2 é introduzido para evitar dupla contagem da energia entre cada par de dipolos. Ao substituir o momento magnético pela variável contínua \vec{M} , através de $\vec{\mu}(\vec{r}) = \vec{M}(\vec{r}) dV$ é obtido

$$\phi_s = -\frac{1}{2} \mu_0 \int_{V_0} \vec{H}_d(\vec{r}) \cdot \vec{M}(\vec{r}) d^3 \vec{r} = \frac{1}{2} \mu_0 \int_V \vec{H}_d^2(\vec{r}) d^3 \vec{r}, \quad (1.16)$$

onde a primeira integral se estende apenas sobre o volume do material e o segundo sobre todo o espaço. Utilizando os teoremas de Green, a última equação se transforma em

$$\phi_s = \frac{1}{2} \mu_0 \int_S U(\vec{r}) \vec{M}(\vec{r}) \cdot d\vec{f} - \frac{1}{2} \mu_0 \int_{V_0} U(\vec{r}) \nabla \cdot \vec{M}(\vec{r}) d^3 \vec{r}, \quad (1.17)$$

$$\phi_s = \frac{1}{2} \mu_0 \int_S \sigma(\vec{r}) U(\vec{r}) df + \frac{1}{2} \mu_0 \int_{V_0} U(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d^3 \vec{r}, \quad (1.18)$$

Este termo energético depende fortemente da forma da amostra pelo que usualmente é o termo mais difícil de calcular analiticamente, se o sistema em estudo não é altamente simétrico.

Nos átomos, os elétrons de valência estão na presença de um potencial electrostático, portanto experimentam um campo elétrico. Toda carga se movimentando em um campo elétrico experimenta um campo magnético efetivo. Como os elétrons tem um momento magnético, ele irão interagir com o campo magnético, o que se conhece como a interação spin-órbita. A interação spin - órbita dos elétrons depende dos orbitais eletrônicos que estão ligados à estrutura cristalina do material. Resultando em que os spins preferem se alinhar ao longo de eixos cristalográficos bem definidos. Devido a isso, os cristais apresentam direções mais fáceis de magnetizar que outras (eixos de fácil magnetização). A interação spin - órbita pode ser avaliada a partir de primeiros princípios. É muito mais fácil usar expressões fenomenológicas mediante a expansão em serie de potências, considerando a simetria de cada cristal e as constantes da série são determinadas experimentalmente (Equação 1.19).

$$\phi'_k(\vec{r}) = k_0(\vec{r}) + \sum_{i \neq j} k_{ij} \gamma_i(\vec{r}) \gamma_j(r) + \sum_{i,j,k,l} k_{ijkl}(\vec{r}) \gamma_i(\vec{r}) \gamma_j(\vec{r}) \gamma_h(\vec{r}) \gamma_l(\vec{r}) + \dots, \quad (1.19)$$

Aplicando as propriedades de simetria dos cristais são obtidas as expressões da energia magnetocristalina para as simetrias cubica, hexagonal, tetragonal e ortorombica.

O mesmo mecanismo responsável pela anisotropia cristalina pode conduzir a alterações da energia quando as posições relativas dos momentos magnéticos da rede são modificadas, ou seja, quando a rede é deformada. O fenômeno da deformação do sistema magnético quando é submetido a um campo magnético, é chamado magnetostricção. Matematicamente a energia magnetoelástica é escrita como:

$$\phi_{el} = \frac{1}{2} \int (\epsilon^T \cdot \cdot c \cdot \cdot \epsilon^T - \sigma \cdot \cdot \epsilon^T) d^3r, \quad (1.20)$$

onde ϵ^T é o tensor de deformações, c é o tensor de elasticidade e σ é o tensor de tensões e o produto entre os tensores ϵ^T e c é representado como $\epsilon^T \cdot \cdot c$, para outros tensores o produto representa-se de forma similar. Aqui ϵ^T leva em conta as deformações devido a tensões aplicadas (ϵ^{ext}), deformações internas devido a defeitos (ϵ^{def}). Também inclui as deformações espontâneas devidas ao ordenamento dos spins (ϵ^Q), e as deformações devidas às tensões magnetostrictivas não homogêneas (ϵ^{el}). Ou seja

$$\epsilon^T = \epsilon^{ext} + \epsilon^{def} + \epsilon^Q + \epsilon^{el}. \quad (1.21)$$

Assumindo que é válida a lei de Hooke $\sigma = c \cdot \cdot \epsilon^T$ obtemos

$$\phi_{el} = -\frac{1}{2} \int (\epsilon^T \cdot \cdot c \cdot \cdot \epsilon^T) d^3r. \quad (1.22)$$

Este é um termo que usualmente não é incluído nos cálculos, devido à complexidade envolvida e porque em muitos materiais é desprezível.

Embora a Mecânica Quântica descreva as propriedades magnéticas em nível atômico e a teoria fenomenológica de Maxwell forneça uma descrição das propriedades magnéticas dos materiais para dimensões macroscópicas, nenhuma das duas teorias é adequada para descrever fenômenos, tais como os processos de magnetização e os ciclos de histerese de estruturas ordenadas de spin. As formas de energia explicadas aqui e suas expressões matemáticas, formam o núcleo da teoria do micromagnetismo, desenvolvida para preencher o vazio entre a Mecânica Quântica e o eletromagnetismo de Maxwell.

1.2.3 Equações de Brown e dinâmica da magnetização

O próximo passo importante é encontrar maneiras de expressar os estados de equilíbrio. As condições micromagnéticas de equilíbrio são obtidas, geralmente em relação à orientação do vector polarização ou o vector magnetização espontânea em cada ponto. De acordo com isto, a energia livre de Gibbs é minimizada em relação aos cossenos diretores γ de \vec{M} , onde o módulo M é constante, de modo que seja válida a condição:

$$\sum_{i=1}^3 \gamma_i^2 = 1. \quad (1.23)$$

Apresentando os resultados das considerações anteriores, as equações de equilíbrio estático são escritas como um torque,

$$\vec{\tau} = [\mu_0 \vec{M} \times \vec{H}_{eff}] = 0, \quad (1.24)$$

onde \vec{H}_{eff} é chamado campo efetivo. Nele temos as contribuições associadas aos campos de energia de troca, energia magnetostática e energia magnetocristalina. Quando se minimiza a energia em relação aos cossenos diretores, é obtido o sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$[\mu_0 \vec{M} \times \vec{H}_{eff}] = 0, \quad (1.25)$$

$$H_{eff,i} = -\frac{1}{\mu_0 M} \frac{\partial \phi'_i}{\partial \gamma_i} = \frac{2A}{J} \Delta \gamma_i + H_{k,i} + H_{\sigma,i} + H_{s,i} + H_{ext,i}. \quad (1.26)$$

Aqui foram introduzidos os campos efetivos da energia magnetocristalina e da energia magnetostática,

$$H_{k,i} = -\frac{1}{\mu_0 M} \frac{\partial \phi'_k}{\partial \gamma_i}, \quad (1.27)$$

$$H_{\sigma,i} = -\frac{1}{\mu_0 M} \frac{\partial \phi'_{el}}{\partial \gamma_i}, \quad (1.28)$$

dentro do sistema de equações diferenciais ordinárias. Inclui-se também a equação de Poisson no volume (i) e a equação de Laplace fora do volume (0)

$$\Delta U^{(i)} = \nabla \cdot \vec{M}(\vec{r}) = -\rho(\vec{r}), \quad (1.29)$$

com

$$\vec{H}_d^{(i)} = -\nabla U^{(i)}, \quad (1.30)$$

$$\Delta U^{(0)} = 0, \quad (1.31)$$

$$\vec{H}_d^{(0)} = -\nabla U^{(0)}, \quad (1.32)$$

onde deve se cumprir a condição de contorno:

$$U^{(i)} = U^{(0)}. \quad (1.33)$$

Além disso, a componente de \vec{B} normal à superfície da amostra, deve ser contínua, ou seja:

$$H_{d,0}^{(i)} + M_{d,n} = H_{s,0}^{(0)}, \quad (1.34)$$

$$-\nabla_n U_0^{(i)} + M_{d,n} = -\nabla_n U_0^{(0)}. \quad (1.35)$$

No caso mais geral também deve ser tida em consideração a condição de equilíbrio elástico no volume e na superfície para forças de superfície \vec{F} , ou seja,

$$\nabla \cdot (c \cdot \cdot \varepsilon^{el}) = -\nabla \cdot (c \cdot \cdot \varepsilon^Q), \quad (1.36)$$

$$\vec{n} \cdot \vec{\sigma} = \vec{F}. \quad (1.37)$$

Mudando para coordenadas esféricas onde φ é o ângulo azimutal e θ é o ângulo polar

$$\gamma_1 = \text{sen}\theta \cos\varphi, \quad \gamma_2 = \text{sen}\theta \text{sen}\varphi, \quad \gamma_3 = \cos\theta, \quad (1.38)$$

e as condições de equilíbrio se transformam em,

$$2A\Delta\theta - A\text{sen}2\theta(\nabla\varphi)^2 - \frac{\partial}{\partial\theta}(\phi'_k + \phi'_{el} + \phi'_s - \vec{J}_s \cdot \vec{H}) = 0, \quad (1.39)$$

$$2A\text{sen}^2\theta\Delta\varphi + \text{sen}2\theta(\nabla\varphi) \cdot (\nabla\theta) - \frac{\partial}{\partial\varphi}(\phi'_k + \phi'_{el} + \phi'_s - \vec{J}_s \cdot \vec{H}) = 0. \quad (1.40)$$

O conjunto de equações 1.25 até 1.40, é chamado de equações de equilíbrio micromagnético.

Nos casos em que a magnetização espontânea se desvia pouco da direção preferencial, as equações micromagnéticas podem ser linearizadas em γ_i . Produzindo um sistema de equações diferenciais lineares de segunda ordem com coeficientes constantes. Tomando a direção do eixo y e a componente do campo H_2 nesse eixo como direção preferencial, o sistema de coordenadas que resulta da linealização é chamado sistema de coordenadas de Brown. Os cossenos diretores satisfazem as condições:

$$\gamma_{1,3} \ll 1; \gamma_2 \sim 1, \quad (1.41)$$

e

$$\gamma_2 = \sqrt{1 - \gamma_1^2 - \gamma_2^2} \sim 1 - \frac{1}{2}(\gamma_1^2 + \gamma_2^2). \quad (1.42)$$

Com a condição $\gamma_2 \simeq 1$ são obtidas as condições de equilíbrio

$$H_1 - \gamma_1\left(\frac{\partial\phi'_k}{\partial\gamma_2} + \frac{\partial\phi'_{el}}{\partial\gamma_2} + H_2\right) = 0, \quad (1.43)$$

e

$$H_3 - \gamma_3\left(\frac{\partial\phi'_k}{\partial\gamma_2} + \frac{\partial\phi'_{el}}{\partial\gamma_2} + H_2\right) = 0. \quad (1.44)$$

Para obter uma expressão mais explícita se desenvolvem ϕ'_k e ϕ'_o em série de Taylor com relação às coordenadas de Brown até os termos de segunda ordem em γ_i . O seja,

$$\phi'_k(\gamma_i) = g_0^k + g_i^k\gamma_i + \frac{1}{2}g_{ij}^k\gamma_i\gamma_j, \quad (1.45)$$

com $i, j \neq 2$ e

$$\phi'_{el}(\gamma_i) = g_0^{el} + g_i^{el}\gamma_i + \frac{1}{2}g_{ij}^{el}\gamma_i\gamma_j, \quad (1.46)$$

sendo assim obtidas as equações micromagnéticas linearizadas 1.47, mais conhecidas como equações de Brown.

$$2A\Delta\gamma_i - J_s(H + H_2)\gamma_i - (g_{ii}^k + g_{ii}^{el})\gamma_i - (g_{ij}^k + g_{ij}^{el})\gamma_j + J_s H_{s,i} = g_i^k + g_i^{el}; \quad i, j = 1, 3, \quad (1.47)$$

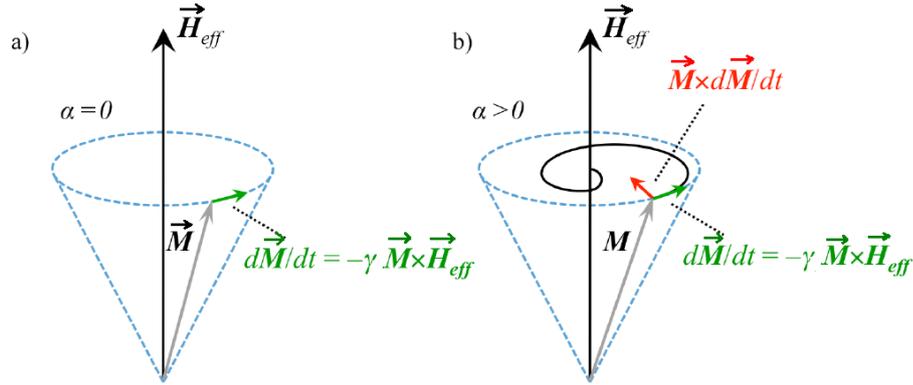
Mas com estas equações não é possível tratar problemas como o cálculo de frequências de ressonância ferromagnética e os espectros de onda de spin, problemas que motivaram a descrição dinâmica da reversão da magnetização. Essa descrição é obtida a partir da equação para o movimento de rotação de um corpo rígido, $d\vec{P}/dt = \vec{\tau}$. Onde \vec{P} é o momento angular e $\vec{\tau}$ é o torque que atua sobre o corpo. A equação de movimento da polarização magnética é obtida usando a analogia $\mu_0\vec{M} = \gamma\vec{P}$ e inserindo o torque magnético $\vec{\tau} = [\mu_0\vec{M} \times \vec{H}]$, que leva à equação do movimento de rotação, sem amortecimento

$$d\vec{M}/dt = \gamma[\vec{M} \times \vec{H}]. \quad (1.48)$$

Aquí, $\gamma = ge/2mv_c$ é a razão giromagnética, e a carga do elétron, g o factor de Lande, m a massa do electron e v_c a velocidade da luz. Mas a equação 1.48, não explica a linha de absorção em experiências de ressonância, e o fato que eventualmente o momento magnético alinha-se com direção do campo. Durante o estudo da teoria de espalhamento de magnetização em ferromagnetos, Landau e Lifshitz propuseram a equação de rotação de partículas ferromagnéticas em sequência. Esta equação descreve classicamente a taxa de variação da magnetização sob a aplicação de um campo local efetivo incluindo um termo de amortecimento (35).

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma[\vec{M} \times \mu_0\vec{H}_{eff}] - \frac{\lambda}{M_s^2}[\vec{M} \times (\vec{M} \times \mu_0\vec{H}_{eff})], \quad (1.49)$$

Aquí $-\lambda$ é a variável que determina a magnitude do amortecimento, e na literatura é chamada de taxa de relaxação. Esta é uma equação da magnetização, chamada equação de Landau-Lifshitz (LL). O primeiro termo da equação (LL) descreve o torque sobre o vetor de magnetização devido ao campo efetivo. O segundo termo descreve o amortecimento que desvia o vetor magnetização na direção do campo efetivo. A equação LL descreve tanto a evolução de campo de spins e a precessão da magnetização num campo efetivo. Posteriormente, Gilbert sugeriu a adição de um termo de amortecimento diferente à equação de movimento (Figura 1.48) (36).



a) $\alpha = 0$ sem dissipação, a magnetização precessa ao redor da direção do campo efetivo

b) $\alpha > 0$ após um tempo a magnetização vai precessar até que se alinha com o campo, devido à dissipação

Figura 5 – Dinâmica da magnetização na presença de um campo magnético efetivo (4).

As equações de Gilbert e de Landau-Lifshitz são equivalentes. A versão de Gilbert é preferida porque prevê um movimento mais lento com o aumento do amortecimento. A equação de Gilbert, convertida na forma da equação Landau-Lifshitz, é conhecida como equação Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) e tem a forma:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -|\gamma|\vec{M} \times \vec{H} + \frac{G}{\gamma M_s^2} (\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt}) \quad (1.50)$$

onde $\alpha = G/\gamma M_s$ e G é o termo de amortecimento de Gilbert. O primeiro termo do lado direito da equação LLG é o torque de precessão e o segundo representa o torque de amortecimento de Gilbert. Desde a sua introdução, a equação LLG foi aplicada em muitos campos de investigação, incluindo a interpretação e previsão de diversas experiências como a estrutura da parede de domínio e dos processos de reversão da magnetização.

1.2.4 Simulações numéricas em micromagnetismo. Object Oriented Micro-Magnetic Framework (OOMMF).

As equações de Brown 1.47 e a equação 1.50 LLG permitiram o tratamento de vários problemas importantes como o estudo das paredes de Bloch, as paredes de Néel e a determinação de campos de nucleação em configurações monodomínio (2). Há problemas em que não podem ser aplicadas ou não simplificam o suficiente para ser tratados analiticamente. Dada esta situação, há uma série de abordagens experimentais, com base na classificação empírica das propriedades dos materiais e a utilização de modelos fenomenológicos simplificados (37, 28, 38).

As técnicas numéricas e computacionais são complementares em muitos aspectos às técnicas experimentais, mas podem superar sérias dificuldades destas últimas. Nos métodos

experimentais é difícil controlar as propriedades magnéticas em escalas de nanômetros e nanossegundos. Além disso, a obtenção por modelagem analítica de modos alternativos de reversão da magnetização, e a análise da propagação de um destes modos é muito difícil. Ao utilizar estas técnicas, as propriedades magnéticas de um material nanoestruturado, relevantes para a sua aplicação, podem ser analisadas qualitativamente em relação à sua estrutura. A rápida variação de muitos parâmetros extrínsecos e intrínsecos é acessível usando técnicas numéricas. Isto facilita a compreensão do comportamento do material. Um exemplo onde as simulações micromagnéticas se mostraram extremamente úteis foi no estudo do desempenho dos meios magnéticos usados para gravação. Por isso as técnicas computacionais micromagnéticas se tornaram populares.

O uso dessas técnicas, significava obrigatoriamente ter que escrever e testar os programas computacionais, mas atualmente existe uma variedade de simuladores micromagnéticos que podem ser divididos em grupos de acordo com o método de discretização e licença (39, 40, 41). Há simuladores comerciais, simuladores baseados em código aberto, no método das diferenças finitas como o Object Oriented Micromagnetic Framework (OOMMF) ou o método de elementos finitos (Magpar e NMAG). Além do método de discretização e a licença de usuário, muitos outros requisitos são importantes na escolha de um simulador. A Tabela 1 dá uma visão geral do código-fonte aberto existente e ferramentas de código público concentrando-se nas propriedades: licença de usuário, suporte a scripts, método de discretização utilizado, suporte para a execução em paralelo, linguagem de programação e bibliotecas de interface. Esta tabela mostra a OOMMF como uma excelente escolha entre os simuladores para a finalidade de nossa pesquisa.

Nome	Licença	scripting	Discretização
AlaMag	GPL	-	FD
OOMMF	open source	sim	FD
RKMAG	open source	não	FD
MagFED3D	GPL	-	FE
Magpar	GPL	Python	FE
Nmag	GPL	sim	FE

Nome	Linguagem	Paralelização	Biblioteca
AlaMag	C++	-	-
JaMM	Java/XML	-	-
OOMMF	C++,TCL/TK	SMP	VODE
RKMAG	FORTRAN	-	Intel MKL
MagFED3D	FORTRAN	não	-
Magpar	C++	MPI	TAO
Nmag	Python	MPI	PVODE

Tabela 1 – Características dos simuladores micromagnéticos mais utilizados.

O objetivo do projeto OOMMF do Information Technology Laboratory (ITL), no National Institute of Standards and Technology (NIST), foi desenvolver um programa micromagnético portátil, de domínio público e ferramentas associadas. Este código procura formar um pacote completamente funcional, bem documentado, com interface flexível para o programador, de modo que as pessoas em desenvolvimento de código novo, possam fazer modificações como seja desejado. As principais contribuições para o OOMMF são de Mike Donahue e Don Porter (42).

Com a finalidade de permitir que o OOMMF seja executado em uma ampla variedade de sistemas, o código foi escrito em Tcl/Tk (Tool Command Language/ Toolkit) (43, 44). Isso permite operar em uma ampla gama de plataformas Unix, Windows NT e Windows 9X. O código pode ser modificado em três níveis distintos. No nível superior, programas individuais interagem por meio de protocolos bem definidos nos sockets de rede. Podem-se ligar os módulos de várias maneiras, a partir da interface do usuário. O segundo nível de modificação é de script Tcl / Tk. Alguns módulos permitem que os scripts Tcl/Tk sejam importados e executados em tempo de execução, e os scripts de nível superior são relativamente fáceis de modificar ou substituir. No nível mais baixo, um fonte de C++ (45) é fornecido e também pode ser modificado.

Além da ferramenta Oxs que realiza a simulação, OOMMF oferece as ferramentas mmDisp, mmGraph, mmDataTable, mmArchive de controle e visualização que se comunicam via TCP/IP. A ferramenta Oxs é principalmente escrita em C++. As outras ferramentas e as GUI são escritas em TCL/TK. Para executar uma simulação, é necessário escrever um arquivo .MIF de configuração, usando TCL/TK que interage com o núcleo OOMMF baseado em C++. Quando é necessário, os arquivos adicionais podem ser incluídos no arquivo .MIF para incluir as propriedades do material, bem como a distribuição inicial da magnetização. Para executar uma simulação, a ferramenta Oxs é iniciada em modo console ou em uma interface gráfica do usuário. Ao carregar o arquivo .MIF a simulação é iniciada.

O método de cálculo que utiliza o OOMMF é o método de diferenças finitas (FD), que é um método numérico amplamente utilizado para encontrar soluções aproximadas de problemas que envolvam equações diferenciais em derivadas parciais. A ideia básica do método consiste em aproximação da derivada parcial da função $u(r, t)$ pelas diferenças finitas Δx , Δy , Δz e Δt :

$$u(x + \Delta x, y, z, t) = u(x, y, z, t) + \Delta x \frac{\partial u(x, y, z, t)}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 u(x, y, z, t)}{\partial x^2} + \dots \quad (1.51)$$

O processo de substituição das derivadas parciais por diferenças finitas é chamado de discretização, nele formam-se células onde vai ser realizado o cálculo. Presume-se que cada célula é uniformemente magnetizada (Figura 6), com magnetização $\vec{M}(i, j, k) = M_s \vec{m}(i, j, k)$,

onde $i = 1, \dots, N_x$; $j = 1, \dots, N_y$ e $k = 1, \dots, N_z$ com N_x , N_y e N_z representando o número total de células em cada eixo cartesiano.

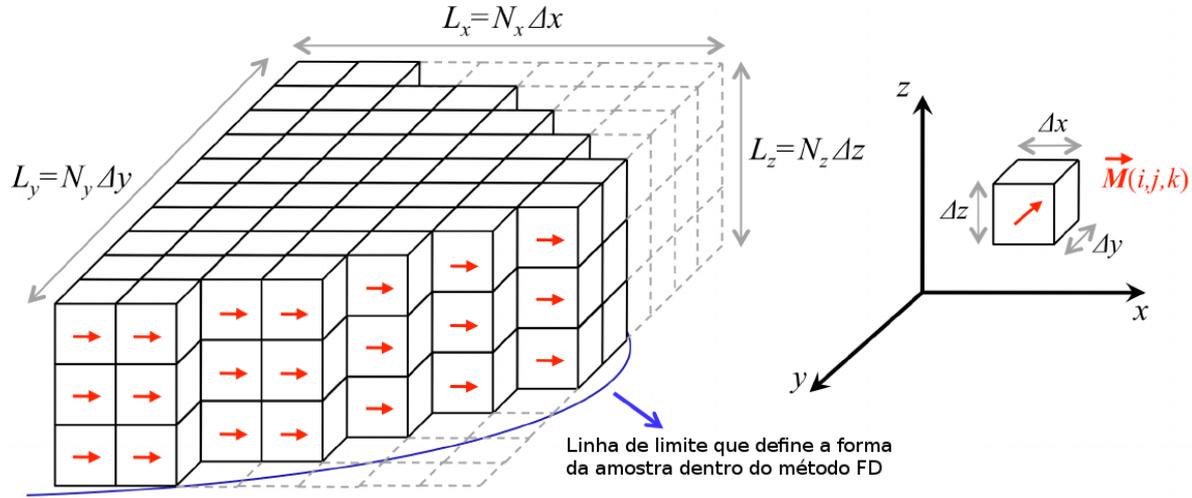


Figura 6 – Representação da discretização da amostra magnética numa rede de células individuais de volume $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ (4).

Note-se que o número total de células inclui as células não magnetizadas (cubos vazios). Estas células não magnetizadas são utilizadas para representar estruturas mais complexas como curvaturas ou ranhuras quando é utilizado o método de diferenças finitas. As dimensões das amostras são $L_n = N_n \Delta n$ (onde $n \equiv x, y, z$). O processo de substituição de derivadas parciais pelas diferenças é conhecido como processo de discretização e o error associado é o error de discretização. O conjunto de células de cálculo é chamado de malha. Substituindo as derivadas parciais na equação diferencial para suas aproximações de diferença finita, é obtido um sistema de equações algébricas. O sistema de equações algébricas pode ser resolvido numericamente por um processo iterativo para obter uma solução aproximada. O método de FD é hoje amplamente utilizado para resolver equações elípticas, hiperbólicas e parabólicas. Este método é rápido e requer menos memória do que as ferramentas com base no método de elementos finitos. É um método fácil de implementar, a malha é simples e regular; o que torna o método atraente para simulações micromagnéticas porque permite a computação rápida e eficiente das interações magnetostáticas de longo alcance. As grades regulares tem a desvantagem de que apenas as formas que coincidem com os limites de grade são bem modeladas (46), mas há programas como o OOMMF que incluem métodos de correção (47).

Como foi mencionado acima, existe uma variedade de ferramentas de simulação micromagnética, que utilizam diferentes algoritmos. Para garantir a precisão e comparar os diferentes simuladores o Micromagnetic Modeling Activity Group (μMag) coletou um conjunto de sistemas de teste com comportamento significativo (48). No momento quatro problemas de teste foram publicados pelo μMag . Esses problemas incluem as energias

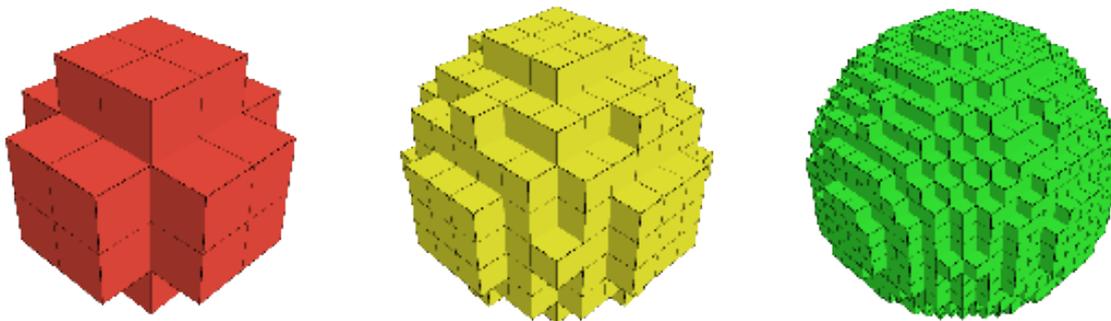


Figura 7 – Visualização de como o aumento do número de células facilita a modelagem numérica (5).

magnetocristalina, de desmagnetização, de troca e de Zeeman. Em todas elas o OOMMF foi provado satisfatoriamente (49).

Mesmo assim deve-se ter cuidado com a escolha do tamanho da célula utilizada nas simulações porque os resultados dos códigos micromagnéticos contêm dois tipos de erros. O primeiro é o erro de discretização; o segundo erro surge a partir das limitações da teoria subjacente. Os erros de discretização derivam da utilização do conjunto finito de pontos. Os dados fornecidos pelos resultados das simulações nestes pontos de discretização constituem uma aproximação do campo magnetização $\vec{M}(\vec{r}, t)$, que se assume que é contínua. A qualidade da aproximação, depende da densidade de pontos de discretização, e os erros de discretização tendem a zero no limite do tamanho das células infinitamente pequenas (Figura 7). O segundo erro é oriundo da própria teoria micromagnética. Uma das suas premissas fundamentais é que a magnetização muda lentamente na escala de comprimento do parâmetro de rede cristalina. Para minimizar esses erros ao máximo é melhor executar cálculos com o tamanho da célula menor possível. Mas, a diminuição do tamanho da célula, aumenta o tempo necessário para realizar os cálculos. Por isso, é importante usar um tamanho de célula que minimize os erros numéricos o necessário sim aumentar de mais o tempo de simulação.

Para minimizar esses erros ao máximo é melhor executar cálculos com o tamanho da célula menor possível. Mas, a diminuição do tamanho da célula, aumenta o tempo necessário para realizar os cálculos. Por isso, é importante usar um tamanho de célula que minimize os erros numéricos o necessário sim aumentar de mais o tempo de simulação.

Comprimentos característicos são normalmente utilizados como uma estimativa para o maior tamanho da célula admissível durante a simulação, para evitar erros de discretização apreciáveis. Essas quantidades são:

$$l_{ext} = \sqrt{\frac{A}{K}} \quad (1.52)$$

e

$$l_D = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}}. \quad (1.53)$$

Onde, l_{exch} é o comprimento de troca proporcional à largura da parede de domínio l_D é o comprimento de desmagnetização característica e K é a primeira constante magneto-cristalina. Estas quantidades determinam o tamanho máximo da célula elementar para cada tipo de material. Para determinar o tamanho ótimo de célula, recomenda-se tomar o menor valor de comprimento determinado pelas equações 1.52 e 1.53. Logo se realiza a simulação com tamanhos menores, analisando (tipicamente através de gráficos) algumas grandezas escalares (como o campo coercitivo e a magnetização remanente) como função do tamanho da célula. Idealmente, estas grandezas devem convergir para um valor quando é reduzido o tamanho da célula abaixo de um tamanho crítico. Este tamanho de célula é o tamanho máximo de célula que deve ser utilizado para realizar as simulações (50). Por todas as características descritas acima, concluiu-se que, com a escolha adequada do tamanho da célula, o OOMMF é uma opção, para realizar o nosso trabalho.

1.3 Revisão bibliográfica de nanofios ferromagnéticos de níquel.

O desenvolvimento de técnicas de fabricação e medição de nanoestruturas tornou possível o estudo de nanofios magnéticos. A obtenção de nanofios tem atraído o interesse porque são sistemas modelo para investigar processos de interação em estruturas magnéticas unidimensionais (19) e também pelas suas potenciais aplicações, incluindo a spintrônica (14), química (15), semicondutores (16), biossensores (15) e aplicações em microondas (17), entre outras (51), (52).

Os nanofios têm sido frequentemente preparados pela técnica de moldes, porque podem-se obter nanoestruturas com diâmetro extraordinariamente pequeno. Diâmetros tão pequenos, que com os métodos litográficos, por exemplo, seria difícil obter em arranjos extensos. Além disso, o método de molde têm a vantagem de que os nanofios sintetizados dentro dos poros podem ser retirados (53).

A maioria dos trabalhos na área, até a data, utilizam dois tipos de molde: membranas *track-etch* (trilhas gravadas) e membranas de alumina (AAO). Para obter as membranas *track-etch* se bombardeia uma folha não porosa de polímero com fragmentos de fissão nuclear, para criar trilhas de danos no material e, em seguida, se atacam quimicamente as trilhas para formar canais. Estas membranas contêm poros cilíndricos de diâmetro uniforme, dispostos aleatoriamente (Figura 8). O método de *track-etch* oferece a possibilidade de controlar todos os parâmetros importantes das nanoestruturas sintetizadas nas membranas de forma independente: (i) O fluxo da irradiação determina a densidade de nanocanais

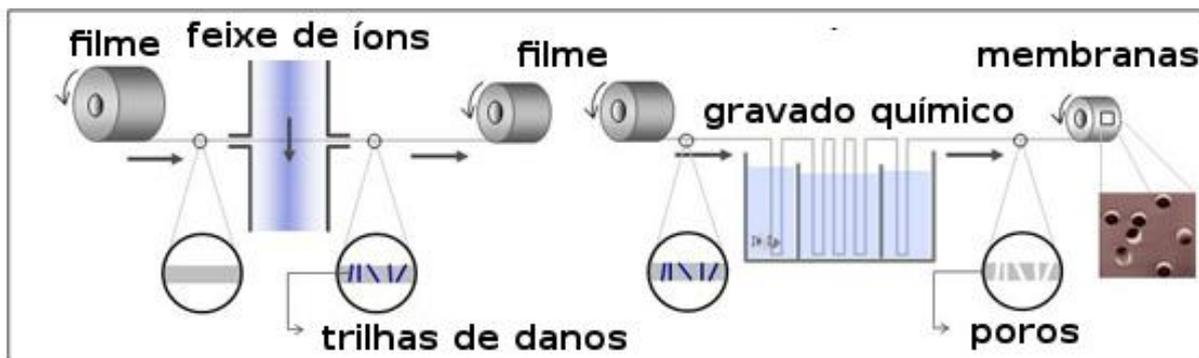


Figura 8 – Esquema do método de obtenção das membranas *track-etch* (6).

orientados paralelamente; (ii) inclinando-se o substrato em relação ao feixe de íons, podem ser produzidos canais inclinados dando origem a uma rede interligada de nanocanais; (iii) O polímero utilizado nas condições de gravação química, determina a geometria dos canais (que pode ser cilíndrico ou cônico); (iv) Controlando o tempo de gravação química, podem ser produzidos canais uniformes com diâmetros de 10 nm até alguns micrômetros (9).

Outro dos moldes mais utilizados é a membrana de alumina. O revestimento de óxido anódico de alumínio e ligas metálicas de alumínio usando vários eletrólitos ácidos, foi explorado desde o início dos anos 1900. Desde então tem sido utilizado em utensílios de mesa, lataria e em outras mercadorias. O uso freqüente da alumina porosa na nanotecnologia, iniciou quando foi estabelecida a capacidade de obter matrizes de nanofios com excelente regularidade (54). Masuda e Fukuda (55) publicaram que uma matriz de nanofios altamente ordenada poderia ser obtida através de duas etapas de anodização em alumínio de alta pureza.

O procedimento geral para fazer membranas AAO compreende o tratamento térmico no vácuo de uma folha de alumínio de alta pureza. Depois a folha de alumínio é eletropolida em uma mistura de ácido perclórico e etanol. O passo seguinte depois do eletropolimento é uma primeira anodização com uma certa voltagem constante, numa solução de ácido oxálico. Em seguida, é utilizada uma mistura de ácido crômico e ácido fosfórico para dissolver a camada de alumina formada na primeira anodização (Figura 9).

Depois de remover a camada de óxido de alumínio, é alcançada uma disposição hexagonal de poros. Em seguida se aplica uma segunda anodização com os mesmos parâmetros e condições que na primeira anodização. Depois de passar o tempo de anodização desejado, a mistura de ácido crômico e ácido fosfórico vai ser utilizada novamente para remover a alumina do interior dos poros. Assim, pode-se alcançar uma disposição hexagonal de poros mais ordenada. Estas membranas são regulares e altamente ordenadas (Figura 10). A camada de alumínio puro que permaneceu no fundo da amostra pode ser dissolvida por uma solução de cloreto de cobre (II). Neste método de obtenção, a tensão de anodização controla o diâmetro dos poros; o comprimento dos poros é determinado pelo tempo de

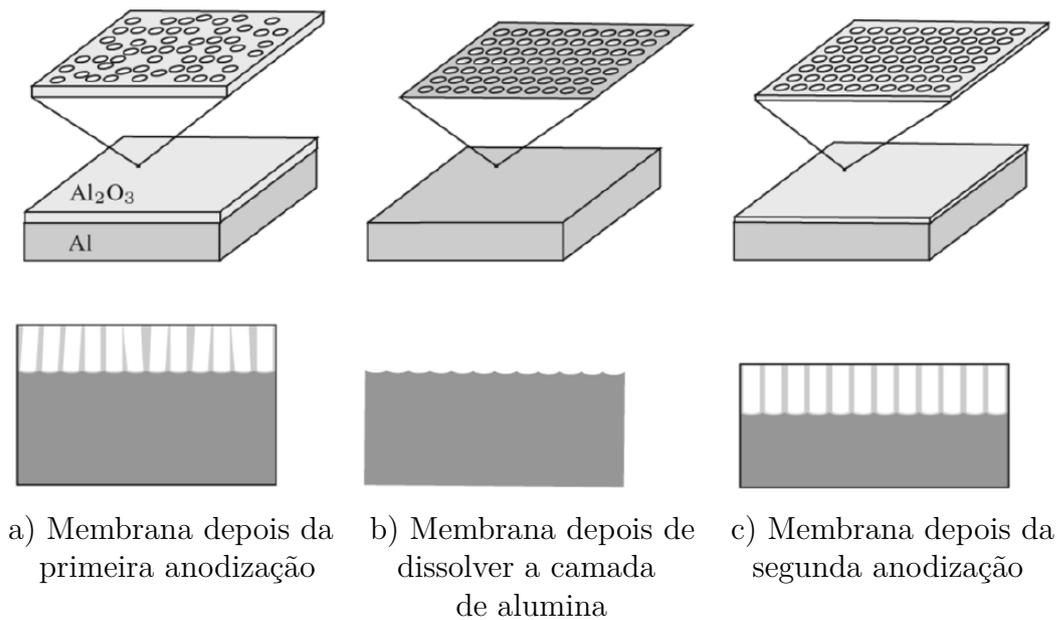


Figura 9 – Esquema da obtenção de moldes de alumina (7).

anodização; a porosidade da membrana depende da concentração de ácido oxálico (56).

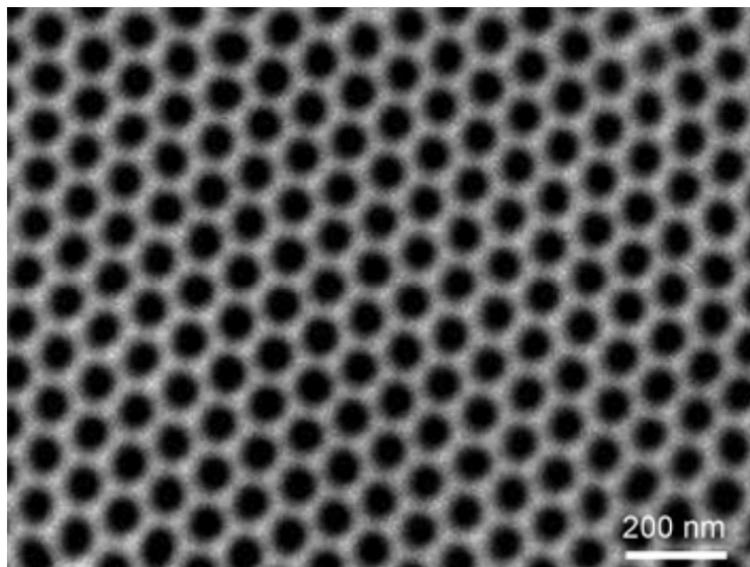


Figura 10 – Imagem de microscopia eletrônica mostrando uma membrana de óxido de alumínio altamente ordenada (8).

Os diâmetros dos poros normalmente são de 5 a 250 nm e profundidades são de alguns nanômetros a centenas de micrômetros). Também são conseguidas densidades superficiais elevadas ($10^8 - 10^{11}$ poros/cm²). Este molde proporciona significativa flexibilidade ao obter nanofios. Estas membranas são preferíveis para a produção em massa de nanomateriais pelo método de molde. Pois como têm uma alta densidade de poros, permitiriam produzir um maior número de nanoestruturas por unidade de área. Elas são

termicamente estáveis até 900 – 1000 °C, oferecendo a possibilidade de tratamento térmico das matrizes de nanofios magnéticos.

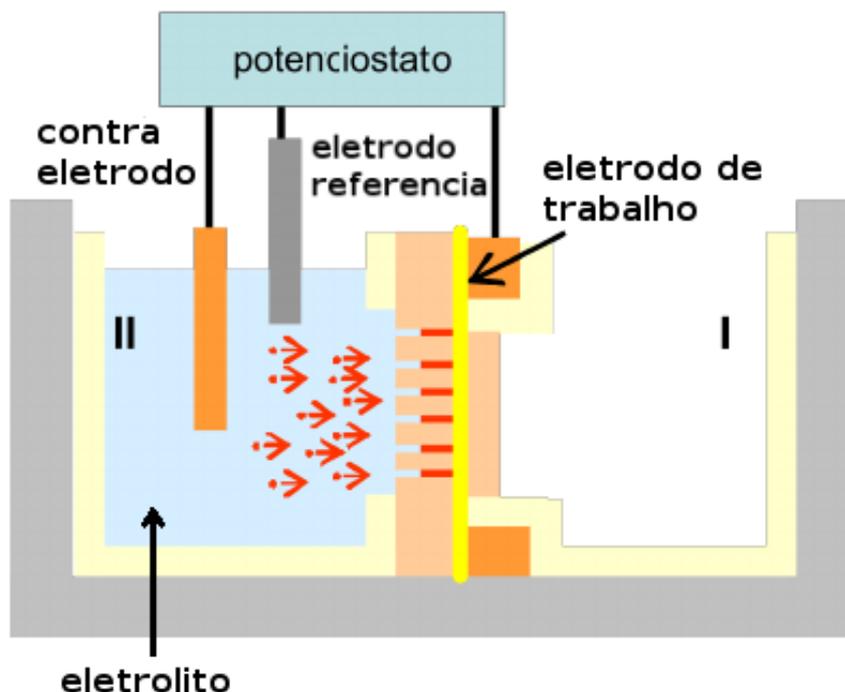


Figura 11 – Esquema de instalação para a obtenção de nanofios em moldes (9).

Os nanofios ferromagnéticos são obtidos por eletrodeposição utilizando as membranas como molde. O mecanismo envolve a aplicação de uma corrente elétrica através de uma certa concentração de eletrólito contendo os íons metálicos desejados. Se a eletrodeposição é feita em substratos não condutores, seriam aplicados alguns pré-tratamentos na superfície deles, tais como deposição química ou pulverização catódica, etc. O eletrólito pode ser uma solução aquosa de sais. A composição do eletrólito, o potencial aplicado, a corrente elétrica, o valor de pH do eletrólito e a temperatura são cinco parâmetros de processamento principais da técnica eletrodeposição.

Para o processo de eletrodeposição, é utilizada uma célula de três eletrodos, que inclui um eletrodo de trabalho, um contra-eletrodo e um eletrodo de referência. Normalmente, o substrato pode servir como eletrodo de trabalho. Como contra-eléctrodo e eléctrodo de referência vários metais inertes podem ser utilizados, tais como Pt. Muitas vezes é utilizado o padrão de *Ag/AgCl* e também o eletrodo de referência. À medida que a deposição ocorre, os nanofios são formados dentro dos canais da membrana. Assim, a forma dos nanofios e seu ordenamento dependerá principalmente da forma e ordenamento dos canais das membranas de onde são obtidos. Portanto, são estudadas as propriedades de nanofios individuais assim como de ordenamento hexagonal de nanofios, considerando que tem forma essencialmente cilíndrica (Figura 12).

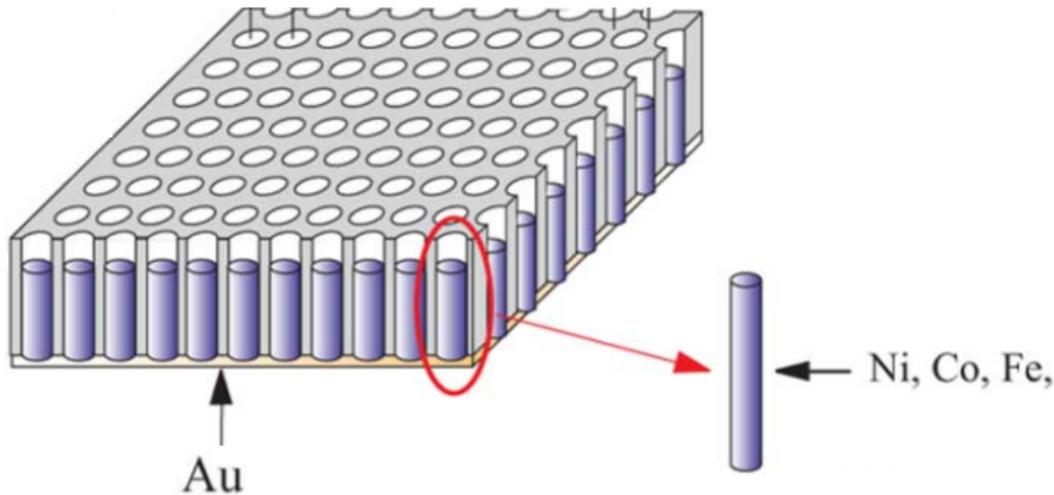


Figura 12 – Esquema de nanofios obtidos em membranas (7).

Para o estudo magnético dos nanofios têm sido combinadas técnicas experimentais, modelos analíticos e simulações computacionais. Entre os resultados mais proeminentes está uma metodologia desenvolvida a partir das equações de Brown que permitiu analisar o processo de reversão da magnetização em sistemas com geometrias simples. Para fazer isso é calculado o valor do campo crítico onde o estado de saturação da amostra não é mais estável (chamado campo de nucleação). Foi demonstrado que o campo de nucleação é o menor autovalor das equações de Brown e a autofunção associada é o modo de reversão da magnetização, além de que no processo de reversão o único modo de reversão presente é o de campo de nucleação mais positivo (20, 57).

Por exemplo, para um cilindro infinito, foram encontrados inicialmente os seguintes modos de reversão da magnetização (Figura 13): a) rotação homogênea ou coerente, b) o modo curling e c) o modo buckling.

Quando a rotação é homogênea os spins estão alinhados uns aos outros e, por essa razão, não há contribuição da interação de troca ou campos de desmagnetização gerados de dentro do corpo. Nestas condições, um só vector de magnetização é suficiente para descrever o estado magnético do sistema e o valor do campo de nucleação vai ser independente das dimensões do sistema. No modo curling as "cargas magnéticas" superficiais e volumétricas são anuladas fazendo os campos de desmagnetização serem cancelados e o valor do campo de nucleação dependerá das dimensões do sistema (58).

Estes dois modos de reversão correspondem a casos extremos; um com energia de troca nula e o outro com energia magnetostática dipolar nula. Se apenas, foram possíveis os modos de reversão explicados acima o raio crítico de transição entre eles seria:

$$R_c = \frac{q_1}{M_s} \sqrt{\frac{A}{2\pi}}, \quad (1.54)$$

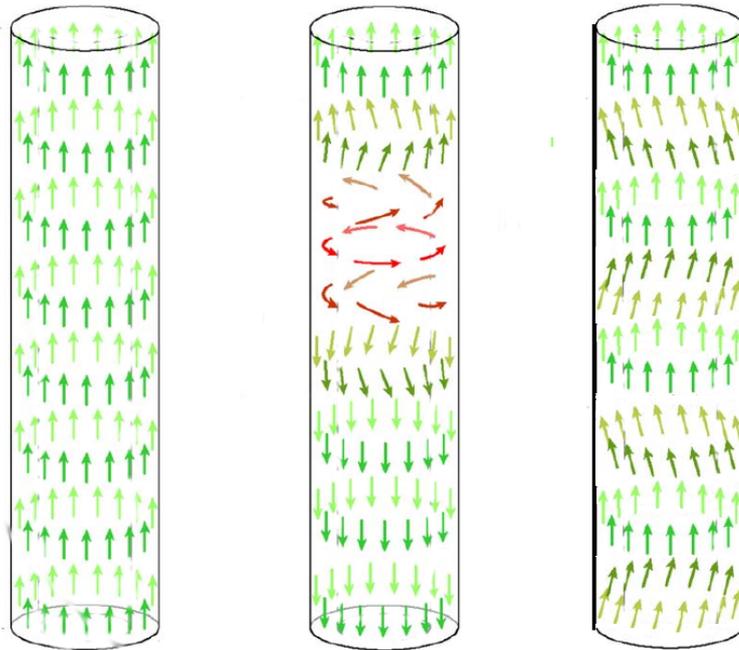


Figura 13 – Modos de reversão da magnetização, possíveis num cilindro infinito. De esquerda a direita, a) modo coerente, b) modo curling e c) buckling (10)

onde $q_1 = 1,8412$. Frei (59), introduziu o raio reduzido:

$$S_r = R/R_0, \quad R_0 = \sqrt{\frac{A}{2M_s^2}}, \quad (1.55)$$

que é uma notação usada em muitos artigos sobre micromagnetismo (20, 11). Nesta notação o raio crítico reduzido de transição entre os modos curling e coerente é

$$S_c = \frac{R_c}{R_0} = \frac{q_1}{\sqrt{\pi}} \approx 1,039. \quad (1.56)$$

Mas também é possível o modo buckling que é uma solução intermediária, que pode ser descrita como uma rotação em cada seção homogénea do cilindro com uma variação sinusoidal ao longo da partícula. O aumento da energia de troca é compensado pela redução da energia magnetostática devido às cargas magnéticas na superfície. O campo de nucleação deste modo de reversão também depende das dimensões do sistema.

Na figura 14 é apresentado o campo resultante do cálculo do campo de nucleação de um cilindro infinito monodominio como função do seu raio reduzido. Pode ser visto que, para valores de raio reduzido maiores que 1,1 o modo de reversão presente no cilindro é o curling. Enquanto que para valores de raio reduzido menores que 1,1 o modo de reversão buckling e para valores de raio reduzido muito menores que 1 os modos buckling são

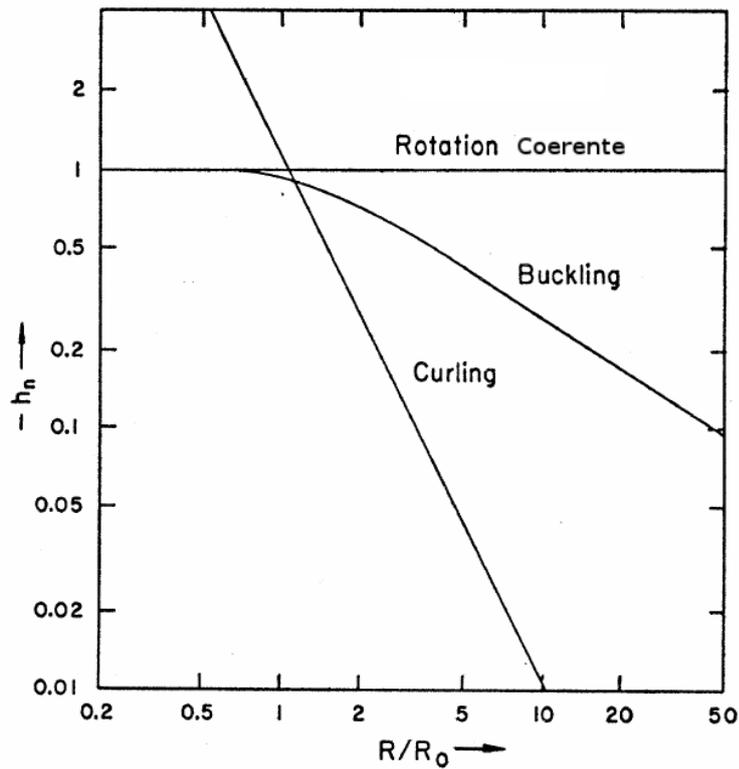


Figura 14 – Campo de nucleação reduzido como função do raio reduzido do cilindro, para diferentes modos de reversão da magnetização (11).

equivalentes. Assim foi demonstrado que num cilindro a reversão não pode acontecer pelo modo coerente (20).

Para geometria simples, uma vez determinado o modo de reversão da magnetização é possível escrever a expressão para a energia livre de Gibbs. Como cada modo de reversão implica um equilíbrio específico entre termos energéticos, geralmente são alcançadas simplificações nos cálculos. Assim torna-se possível obter o ciclo de histerese da amostra com os seus parâmetros críticos. Como a dependência angular de parâmetros críticos tais como o campo coercitivo, pode ser obtida também pelo método descrito acima. Tem sido usado para identificar experimentalmente os modos de reversão presentes na amostra (28). Por isso, a dependência angular do campo de comutação e o campo coercitivo são a chave no estudo do mecanismo de inversão da magnetização.

A teoria não têm continuado, desenvolvendo-se significativamente com o procedimento descrito. A diferença entre teoria e experimentos levaram à conclusão de que os processos de magnetização em cristais reais são sensíveis a defeitos superficiais, rugosidade e outros defeitos nos cristais que são desprezados na teoria simplificada (20). Sendo assim é necessário dessa forma, incluir esses defeitos para aprimorar a teoria.

No caso de nanofios de metais de transição, um dos defeitos é a forma irregular que estes apresentam na superfície (22). A partir de imagens do TEM, tem-se comprovado

que cada nanofio se assemelha a uma cadeia de esferóides (23, 12) ou cadeia de elipsóides (13) de modo que o modelo de cadeia de elipsóides tem sido usado para a interpretação do processo de inversão de magnetização dos nanofios. Usando essa abordagem, varios estudos foram realizados: Jacobs e Bean (24) propuseram um modelo de esferas, para investigar o mecanismo de inversão das partículas magnéticas alongadas finas. Richter e Hempel propuseram um modelo que consiste em uma cadeia de dois elipsóides considerando a anisotropia magnetocristalina, a fim de estudar o mecanismo de reversão da magnetização de partículas de Ba-ferrita (25, 26).

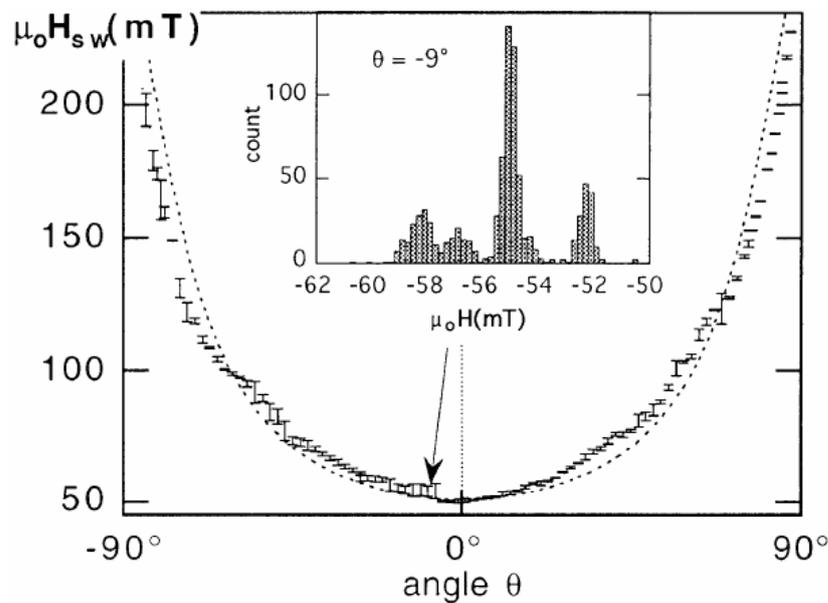


Figura 15 – Dependência angular do campo de comutação para o nanofio de Ni com 95 nm de diâmetro (12).

Um exemplo importante da influência dos defeitos superficiais sobre as propriedades magnéticas de nanofios ferromagnéticos foi encontrado por Holanda (27). Neste trabalho ele encontrou variações significativas dos valores de remanência e coercividade em nanofios ferromagnéticos de níquel, após a aplicação de tratamento térmico (27). Este é um comportamento que não pode ser explicado de acordo com a metodologia que utiliza as equações de Brown, quando se considera o nanofio como um cilindro. Holanda assumiu os nanofios, como uma sequência de grãos cristalinos. Assim que explicou esse comportamento através da redução do *contorno dos grãos cristalinos*, devido ao tratamento térmico. Com a aplicação do tratamento térmico, se alteram as dimensões dos cristais da sequência que formam o nanofio.

Outro desacordo na modelagem de nanofios como cilindros aparece no trabalho de Wernsdorfer (12). Neste trabalho a curva da dependência angular do campo de comutação do nanofio de Ni com 95 nm de diâmetro, é uma curva em forma de U (Figura 15) que pode ser explicado pelo modo curling. Mas as curvas no diâmetro de 55 nm têm máximo

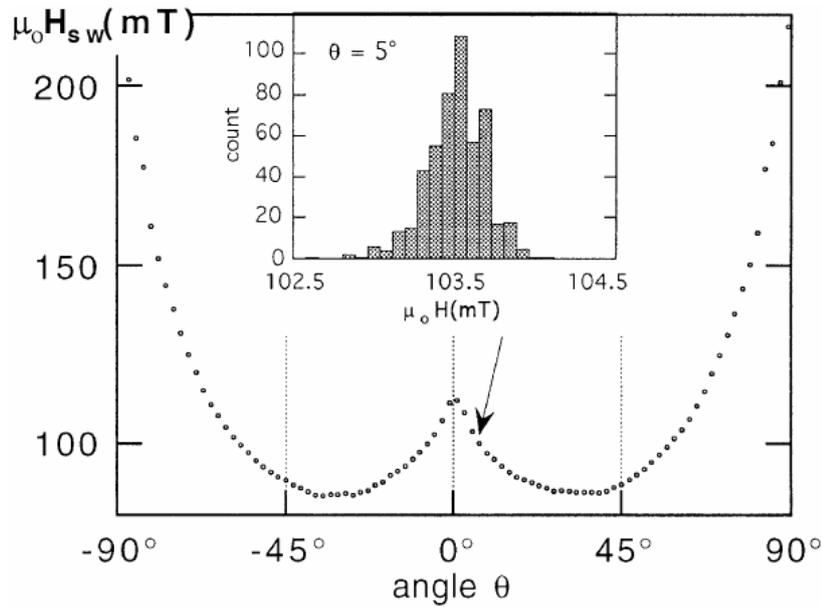


Figura 16 – Dependência angular do campo de comutação para o nanofio de Ni com 55 nm de diâmetro (12).

local nas região médias (Figura 16). Esse máximo local não pode ser explicado utilizando nenhum dos possíveis modos de reversão de um cilindro. Esta é uma grande discrepância, pois na metodologia de Brown a dependência angular do campo coercivo e de comutação é obtida diretamente dos modos de reversão.

Motivado pelo trabalho de Wernsdorfer (12), Xiancong (13) conseguiu explicar a dependência angular do campo coercitivo. Mas utilizou o modelo de sequência de cristais elipsoidais e realizou os cálculos sob as seguintes condições:

- Cada elipsóide é uma partícula monodomínio com anisotropia magnética uniaxial, e seu processo de reversão da magnetização é por rotação coerente.
- Dois elipsóides só têm um ponto de conexão, então a energia de troca entre eles pode ser negligenciada.
- O eixo fácil de anisotropia cristalina é coincidente com o eixo principal de simetria rotacional de cada elipsóide e do eixo da sequência.
- A interação magnética entre elipsóides é calculada com precisão de até quatro vizinhos, e a interação com outros elipsóides é tratada como uma interação dipolo-dipolo.

Com estas premissas conseguiu-se reproduzir o salto no gráfico da dependência angular (Figura 17). Mas também, neste modelo, quando varia a razão de aspecto dos elipsóides ($m = a/c$, onde a é o semieixo maior e c é o semieixo menor), a dependência angular varia significativamente (Figura 17). O que é consistente com os resultados de

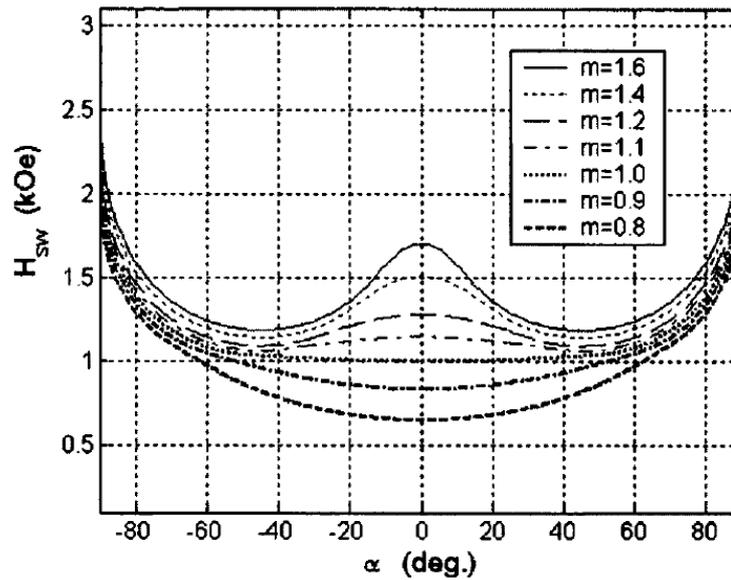


Figura 17 – Dependência angular do campo de comutação para o nanofio de Ni obtida para diferentes razões de aspecto (13).

Holanda. Com isto, pode-se concluir que a cadeia de cristais elipsoidais é uma melhor aproximação para analisar as propriedades magnéticas de nanofios que o cilindro. Isto porque inclui as irregularidades na superfície por causa da natureza policristalina dos nanofios.

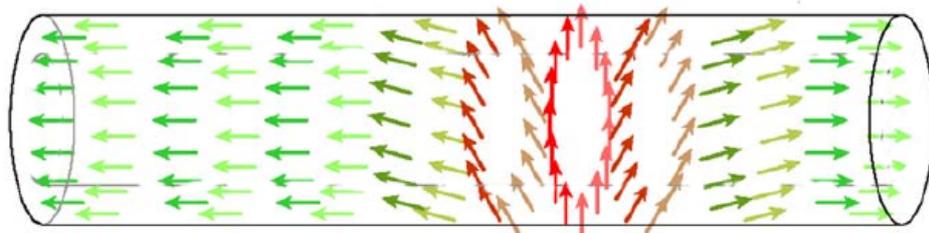


Figura 18 – Modo de reversão transversal, encontrado por Hertel através de simulações computacionais (10)

Em adiante, ao adotar o modelo de nanofio como sequência de grãos cristalinos elipsoidais, vamos chamar as irregularidades da superfície devida à forma elipsoidal dos grãos de rugosidade. Portanto, o parâmetro para caracterizar a rugosidade é o número de

elipsóides. Ao comparar dois nanofios de igual diâmetro e comprimento, consideramos que o composto por um número maior de elipsóides será o mais rugoso.

Mesmo assim, várias questões estão em aberto, por exemplo: Hertel, por meio de simulações computacionais, ao analisar a dinâmica de reversão da magnetização, encontrou que para diâmetros pequenos, em vez de aparecer o modo buckling apareceu um novo modo de reversão (Figura 18) (29). Este modo de reversão foi chamado transversal e se caracteriza pela rotação progressiva dos momentos magnéticos através da propagação de uma parede de domínio transversal.

Dessa forma, os possíveis modos de reversão da magnetização em nanofios de níquel seriam curling e transversal. Para estes modos de reversão não é fácil aplicar a metodologia com base nas equações de Brown. Assim, nos próximos capítulos é realizado o estudo computacional sobre a influência da rugosidade no processo de reversão da magnetização em nanofios de níquel modelados como sequências de cristais elipsoidais. Onde são apresentados e discutidos os resultados de simulações da resposta estática e dinâmica do nanofio, variando o número de elipsóides que compõem a sequência.

2 Efeito da rugosidade na reversão da magnetização em modo curling

As partículas ferromagnéticas alteram o seu estado de magnetização sob a influência de um campo magnético. A magnetização da partícula reverte completamente para a direção onde é aplicado o campo se ele é forte o suficiente para superar os efeitos de determinadas barreiras energéticas (60). O processo de reversão pode não ser particularmente interessante se os momentos magnéticos da amostra podem mudar de forma independente um do outro. Mas a interação de troca impõe uma ordem local nas estruturas magnéticas. Isto torna o processo de reversão de partículas ferromagnéticas em um processo coletivo complicado onde a topologia dos campos de magnetização desempenha um papel decisivo. A teoria do micromagnetismo foi desenvolvida por Brown Jr (20), ela fornece, o quadro teórico necessário para calcular a magnetização como função do espaço e do tempo.

Atualmente com o uso de computadores, é possível fazer uma análise da topologia do processo de reversão. Alguns anos atrás, foi publicado de forma independente por Forster (61) e Hertel (29) que os nanofios ferromagnéticos cilíndricos podem reverter de duas formas diferentes, dependendo de seus diâmetros. Um dos modos de reversão é o modo transversal, que ocorre em nanofios em mais finos. Neste modo de reversão a parede de domínio move-se lentamente, com os momentos magnéticos alinhados na direção da secção transversal que é perpendicular ao eixo dos nanofios. O outro modo de reversão da magnetização é denominado curling e ocorre para raios maiores. Seu nome vem da estrutura da parede de domínio com forma de vórtice.

Neste capítulo são apresentados os resultados de simulações micromagnéticas para a análise do efeito da rugosidade (definida como o número de elipsóides nos nanofios) sobre as propriedades magnéticas dos nanofios. Para isso foi selecionado o diâmetro de nanofios que corresponde ao modo de reversão curling, de acordo com as simulações feitas em cilindros. Cada nanofio é inicialmente simulado como um cilindro para "calibrar" os resultados com os resultados da literatura (29). Depois, o nanofio é simulado como uma sequência de elipsóides para configurações com quantidades diferentes de elipsóides.

As simulações do nanofio como uma sequência de elipsóides foram divididas em: a) um nanofio como um conjunto de poucos elipsóides (até 8 elipsóides), os elipsóides são prolatos, e as interações de troca e dipolares entre os elipsóides são desprezíveis; b) nanofio como um conjunto de um número médio de elipsóides (entre 20 e 40 elipsóides), aqui a interação dipolar entre os nanofios já não é desprezível; c) nanofio simulado como uma sequência de muitos elipsóides onde (100 elipsóides) têm um papel importante a interação de trocas e dipolar entre os elipsóides.

Para cada configuração foram simulados os ciclos de histerese através da minimização da energia e a dinâmica de reversão da magnetização através da integração das equações de Landau-Lifshitz-Gilbert. Para as simulações foi escolhido como comprimento $1 \mu m$ para cada um dos nanofios de níquel, é assumido o parâmetro de amortecimento $\alpha = 0,1$ para poder comparar os resultados com as simulações Hertel (29) em que esse mesmo valor é assumido. Em todas as configurações utilizadas nas simulações o estado de magnetização inicial escolhido foi o da magnetização paralela ao eixo do nanofio. Os parâmetros do níquel importantes para as simulações são a constante de troca $A = 1,05 \times 10^{-11} J/m$ e a polarização de saturação $J_s = 0,525 T$. Foi usada a relação gyromagnética $\gamma = 3,09 MHz/Oe$ a partir das medições de ressonância ferromagnéticos em membranas de alumina (62).

De acordo com a literatura a energia magnetocristalina é pequena em comparação com a energia de troca e seu efeito é geralmente desprezível (20). No caso dos nanofios ferromagnéticos de níquel o efeito da energia magnetostática é tão forte que supera a energia magnetocristalina na definição do sentido de fácil magnetização. Fazendo com que a direcção de fácil magnetização seja o eixo do nanofio, transformando-o num sistema biestável (29). Além disso os nanofios não são simulados sob tensões mecânicas. Pelo que foram negligenciadas a energia magnetocristalina e a magnetoelástica. As dimensões das células a partir das quais os resultados são independentes tamanho da célula são mostrados na Tabela 2:

Configuraciones	cellsizeX (nm)	cellsizeY (nm)	cellsizeZ (nm)
Cilindro	2,5	2,5	2,0
1 Elipsóide	2,5	2,5	2,5
2 Elipsóides	2,5	2,5	2,5
4 Elipsóides	2,5	2,5	2,5
8 Elipsóides	2,5	2,5	2,5
20 Elipsóides	2,5	2,5	2,5
25 Elipsóides	2,5	2,5	2,5
40 Elipsóides	2,5	2,5	2,0
100 Elipsóides	2,5	2,5	1,0

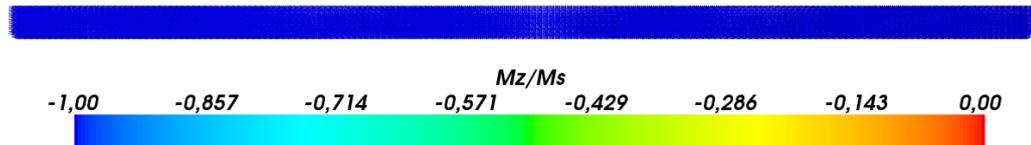
Tabela 2 – Dimensões das células utilizadas nas simulações para o modo de reversão curling

2.1 Dinâmica da reversão da magnetização

Para as nossas simulações da dinâmica de reversão foi aplicado um campo constante de $550 mT$, suficientemente intenso para causar a reversão na direcção oposta à da configuração inicial da magnetização em todas as amostras.

2.1.1 Cilindro

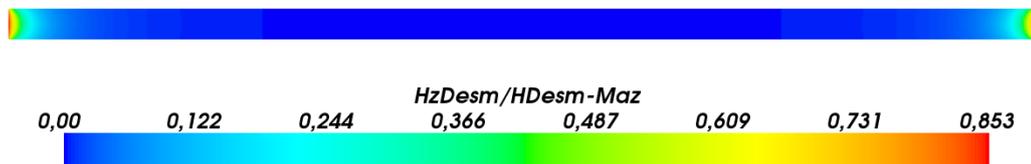
Nesta configuração a rede foi discretizada em um total de $16 \times 16 \times 500$ células, e o passo temporal foi de 1 fs. Na configuração inicial da simulação (figura 19), todos os momentos magnéticos são orientados na a direção negativa do eixo z (que coincide com o eixo do nanofio). Daqui em diante é usado o azul para representar a região com a configuração de magnetização inicial e o vermelho para a região onde a magnetização é invertida.



a) Mapa de cores 3D da magnetização



b) Diagrama da magnetização e do campo externo



c) Campo de desmagnetização que atua na configuração

Figura 19 – Configuração inicial do nanofio com forma cilíndrica

Quando um campo antiparalelo, à direção de magnetização inicial, de 550 mT foi aplicado na amostra, a reversão não começa imediatamente. A partir do instante $t = 1 \text{ ps}$, observou-se nas extremidades do cilindro que o campo de desmagnetização apresentou grandes inhomogeneidades sem chegar a perceber as alterações na configuração da magnetização (figuras 19 c) 20). De acordo com a teoria, a presença de tais inhomogeneidades implica na existência de uma variação espacial da magnetização do material, que no mapa vetorial da magnetização da Figura 20 não acontece.

A Figura 21 mostra a configuração da magnetização 20 ps depois de aplicar o campo. Nela são observadas as primeiras alterações da configuração da magnetização nas extremidades do nanofio. Na seção transversal, perpendicular ao eixo da nanofio o

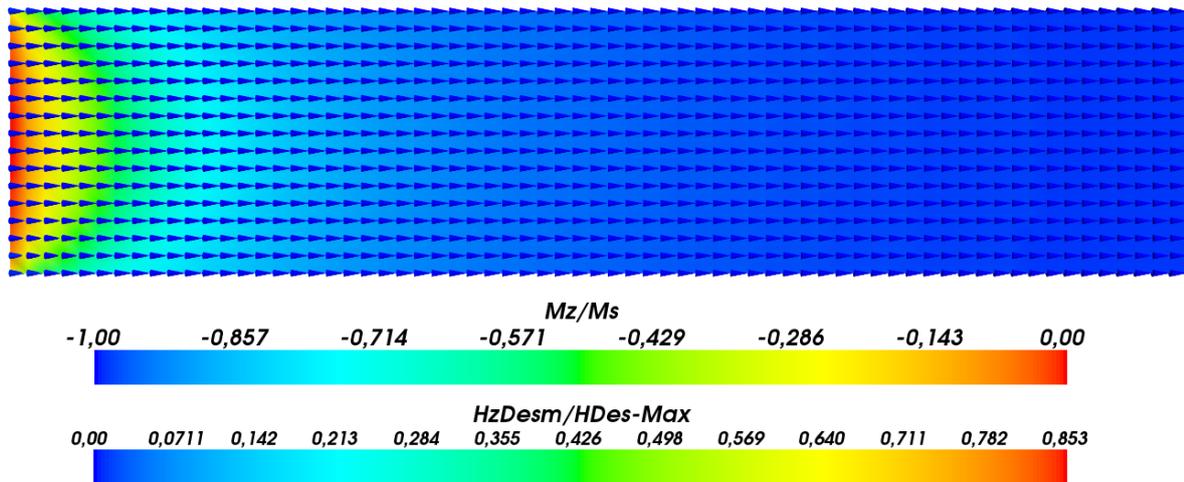


Figura 20 – Campo desmagnetizante na configuração inicial da magnetização do nanofio com forma cilíndrica.

fenômeno de vórtice começa a manifesta-se. Estes vórtices se consolidam reduzindo as cargas magnéticas superficiais até formar uma parede de domínio em movimento a partir das extremidades até o centro do nanofio. As paredes de domínio formadas, enquanto se deslocam em direção ao centro, apresentam forma de cone.

Como estas estruturas têm uma componente da magnetização perpendicular ao eixo do nanofio irá contribuir para o torque do campo efectivo. O torque, por sua vez produz uma componente maior de \vec{M} fora do eixo do nanofio, que fortalece o torque. Isto é, o mesmo mecanismo que consolida o início da reversão da magnetização e gera as estruturas de vórtice.

Enquanto a reversão começa nas extremidades o nanofio permanece magnetizado anti paralelamente ao campo externo. O sentido de rotação das paredes de domínio é horário à esquerda e anti-horário a direita (Figura 22). Em particular, o núcleo do vórtice permanece com a magnetização anti paralela porque não sente nenhum torque e porque não pode seguir seus vizinhos por motivos topológicos e de simetria.

A reversão da magnetização no nanofio, ocorre através do modo curling localizado. A forma de cone da parede de domínio significa que o processo de reversão ocorre mais rápido na superfície do nanofio do que na região interna e isto implica uma diferença de mobilidade dos momentos da amostra. A Figura 23 mostra a diferença da velocidade de avanço da reversão da superfície exterior e no centro do nanofio que produz uma estrutura magnética altamente inhomogêneo. No vértice da parede de domínio, com forma de cone, existe uma singularidade chamada ponto de Bloch. Devido a que a mobilidade da parede de domínio no núcleo do nanofio é menor na superfície, o ponto de Bloch fica por trás do frente da reversão, produzindo estruturas semelhantes às gotas comuns. Cada gota é

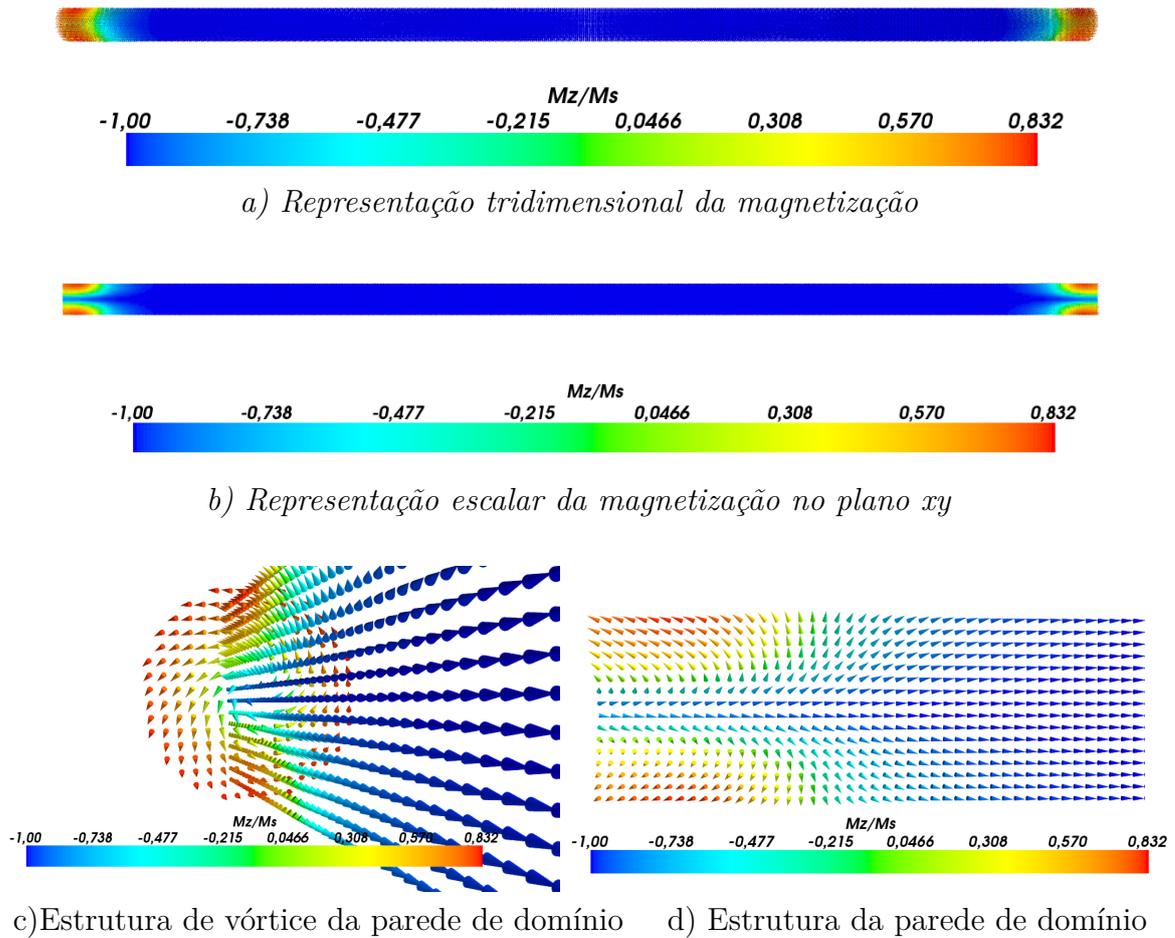
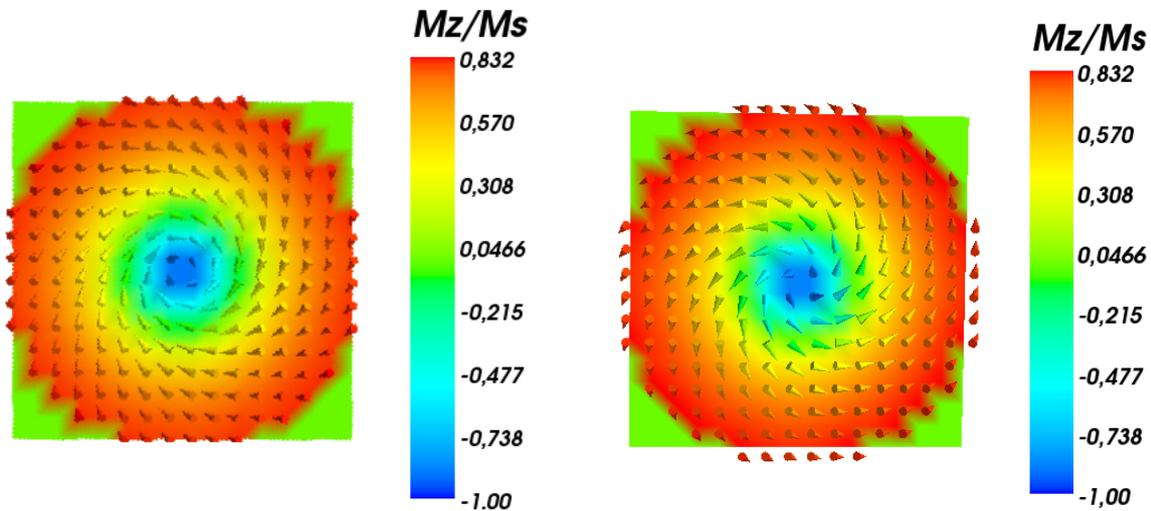


Figura 21 – Início do processo de inversão da magnetização do nanofio com forma cilíndrica $t=25$ ps

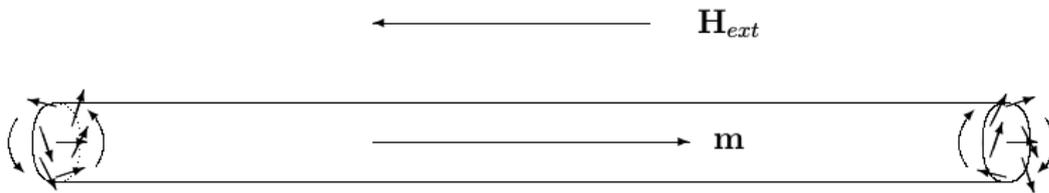
isolada e contém dois pontos de Bloch que são aniquilados depois de um tempo em que a reversão continua.

Quando as duas paredes em forma de cone chegam no centro do nanofio se aniquilam (Figura 24). Esta fase do processo de reversão demora mais que as outras porque as paredes de domínio em modo curling têm sentidos de rotação opostos. Por isso a aniquilação entre elas produz, a precessão do valor meio das componentes da magnetização nos eixos x e y . A amplitude dessa precessão diminui na medida que avança a aniquilação de paredes domínio (Figura 25), apresentando o perfil dos processos de amortecimento.

Ao analisar a evolução temporal do processo de reversão nos eixos x e y , são observados comportamentos diferentes em dois intervalos de tempo. Nos dois intervalos, a magnetização precessiona, mas no primeiro (até 2 nanossegundos após aplicado o campo), a amplitude da precessão é pequena e irregular. A partir destas características pode concluir-se que o primeiro intervalo corresponde ao processo de formação e movimento da parede de domínio para o centro do nanofio. Nessa fase do processo de reversão, as paredes de domínio com estrutura de vórtice se movimentam com um frente de reversão que tem



a) Seção transversal do extremo direito b) Seção transversal do extremo esquerdo



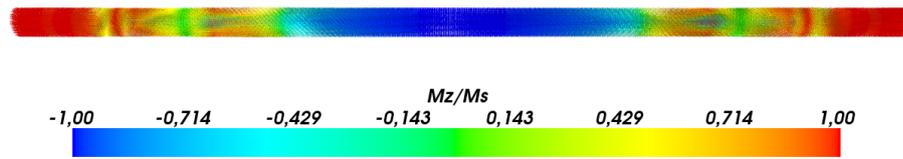
c) Diagrama do início da reversão da magnetização.

Figura 22 – Processo de reversão da magnetização na sua primeira fase $t=25$ ps

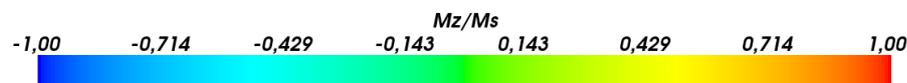
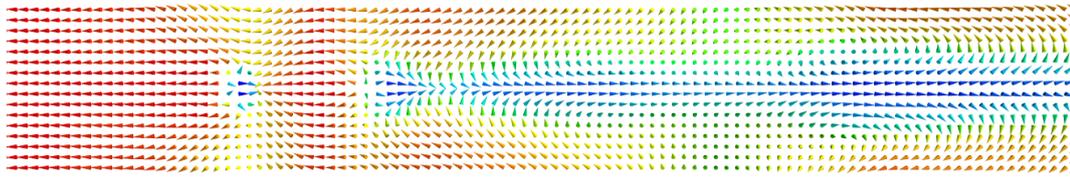
uma maior velocidade na superfície do que no centro do nanofio. Assim se produzem configurações em forma de cone altamente não-homogêneas, o que gera a precessão do valor médio da magnetização no eixos x e y. A precessão tem uma amplitude pequena, porque os dois vórtices giram em sentidos opostos, o que tende a cancelar o valor médio das componentes da magnetização nos eixos x e y.

A evolução temporal da componente da magnetização da amostra no eixo do nanofio, é consistente com a interpretação dos processos de precessão observados nos eixos x e y. Na Figura 26, foi observado um aumento da magnetização até 2 nanosegundos depois que foi aplicado o campo e após o aumento continua, mas com ritmo mais lento até alcançar a magnetização de saturação perto de 3,5 nanosegundos.

Depois de 2 ns o valor médio da magnetização começa a aumentar fazendo a transição para um novo processo de precessão de uma ordem de magnitude maior. De modo que os dois processos não podem ser percebidos em um mesmo gráfico. A nova precessão do valor medio da magnetização têm a forma de um processo de amortecimento. Pelo grau de variação do valor médio da magnetização no eixo z depois de 2 ns Pode-se dizer que as paredes de domínio alcançaram o centro do nanofio e que este estágio corresponde à eliminação das paredes domínio.



a) Movimento das paredes de domínio para o centro do nanofio



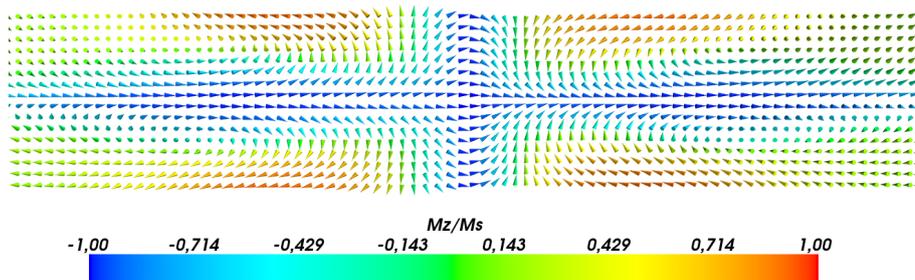
b) Ruptura do frente a reversão e criação de uma gota

c) Estruturas de vórtice na seção transversal

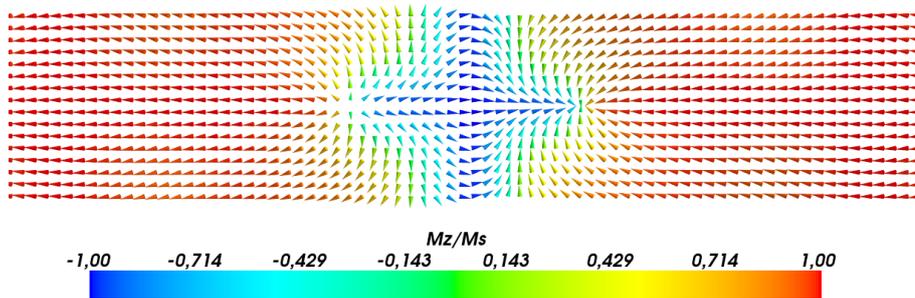
Figura 23 – Reversão da magnetização, $t=85$ ps

Até aqui todos os resultados obtidos são consistentes com os resultados apresentados na literatura (29). Com exceção do surgimento da inhomogeneidade do campo desmagnetizante antes de iniciar o processo de reversão da magnetização (Figura 20). Isto não tinha sido publicado até o momento. Uma possível explicação para esta situação é que quando o campo é aplicado, cada momento magnético tende a alinhar-se na direção do campo desviam-se infinitesimalmente de sua orientação original. O grau de desvio de cada momento magnético depende da *liberdade* que cada um deles tenha para mudar sua orientação. Essa *liberdade* não vai ser a mesma em toda a amostra. Além da interação Zeeman tende a alinhar os momentos magnéticos na direção e sentido do campo aplicado temos na amostra a interação de troca. Também está presente a interação dipolar que inicialmente tende a alinhar os momentos magnéticos com o eixo de nanofio. Assim, inicialmente também vai-se opor à reversão da magnetização.

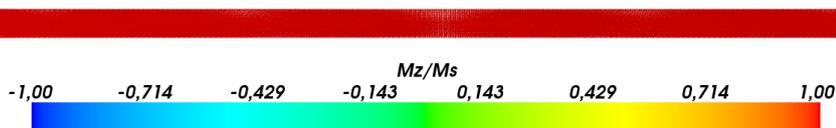
Os momentos magnéticos que estão na superfície do material possuem menos vizinhos que aqueles momentos que estão no centro do nanofio. Por isso sofrem uma oposição menor



a) Configuração de magnetização do cilindro altamente inhomogenea, $t=120$ ps



b) Cancelamento das paredes de domínio, $t=175$ ps

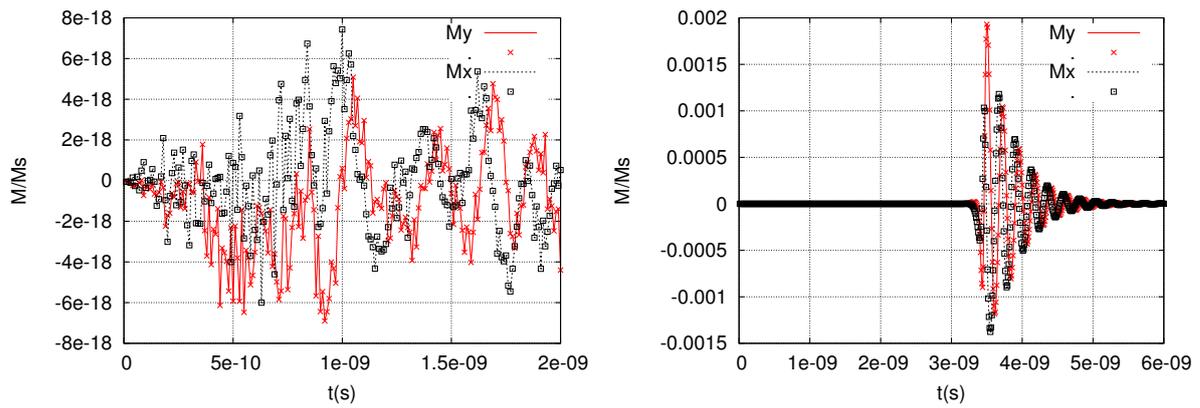


c) Estrutura de magnetização após o processo de reversão termina, $t=400$ ps.

Figura 24 – Processo de reversão da magnetização

ante às mudanças de direção por conta da interação de troca que os momentos magnéticos no centro do nanofio. Isto significa que os momentos magnéticos com menor número de vizinhos terão uma maior mobilidade e isto envolve uma diferença de mobilidade (e, por conseguinte uma variação espacial de cargas magnéticas infinitesimais) entre a superfície cilíndrica do nanofio e o núcleo dele. A variação espacial das mobilidades implica uma distribuição não homogênea dos desvios infinitesimais dos momentos magnéticos quando o campo é aplicado, produzindo uma inhomogeneidade espacial do campo desmagnetizante.

A falta de homogeneidade do campo desmagnetizante implica um gradiente de energia dipolar que irá contribuir para campo efetivo. Um campo efetivo mais intenso tem a capacidade de causar um maior desvio da direção dos momentos magnéticos em relação ao eixo do nanofio. Com um maior desvio da direção de magnetização é obtida por sua vez uma maior inhomogeneidade do campo desmagnetizante. Pelo que se estabelece um mecanismo de realimentação que estabiliza o a reversão da magnetização, através da promoção entre magnetização e o campo efetivo.



a) *precessão da magnetização devido à propagação do processo de reversão* b) *precessão da magnetização durante aniquilação de paredes de domínio*

Figura 25 – Evolução da magnetização nos eixos x e y durante o processo de reversão.

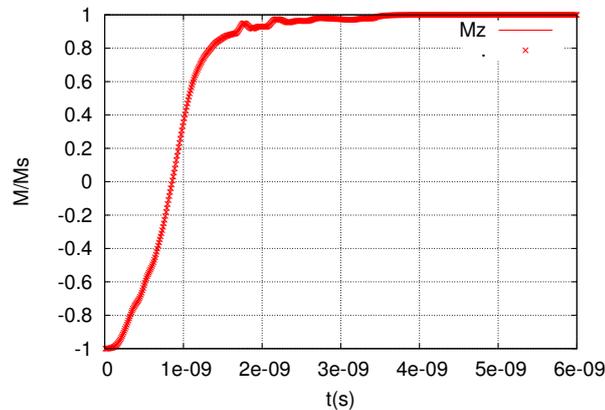


Figura 26 – Evolução da magnetização no eixo do nanofio durante o processo de reversão.

2.1.2 Nanofio simulado como um conjunto de poucos elipsóides

Nas simulações do nanofio como uma sequência de poucos elipsóides foram consideradas as configurações formadas por 1, 2, 4 e 8 elipsóides. Para cada um das configurações se usou uma rede de $16 \times 16 \times 400$ células. A configuração inicial da magnetização foi semelhante à da simulação do nanofio cilíndrico.

No caso do fio formado por 1 elipsoide, quando foi aplicado o campo, a reversão da magnetização não inicia imediatamente (Figura 27). A Figura 27 mostra como o campo desmagnetizante de configuração inicial mostra inhomogeneidades em menor grau, comparado ao que apresentou o nanofio cilíndrico ao aplicar o campo magnético. Isto pode ser explicado da seguinte maneira, como nesta configuração a forma do nanofio é diferente, muda a distribuição de mobilidade dos momentos e portanto o grau e a localização das inhomogeneidades do campo desmagnetizante.

Depois de 50 ps se formaram duas regiões em que a configuração da magnetização e o campo desmagnetizante são altamente não homogêneos (Figura 28). As regiões estão

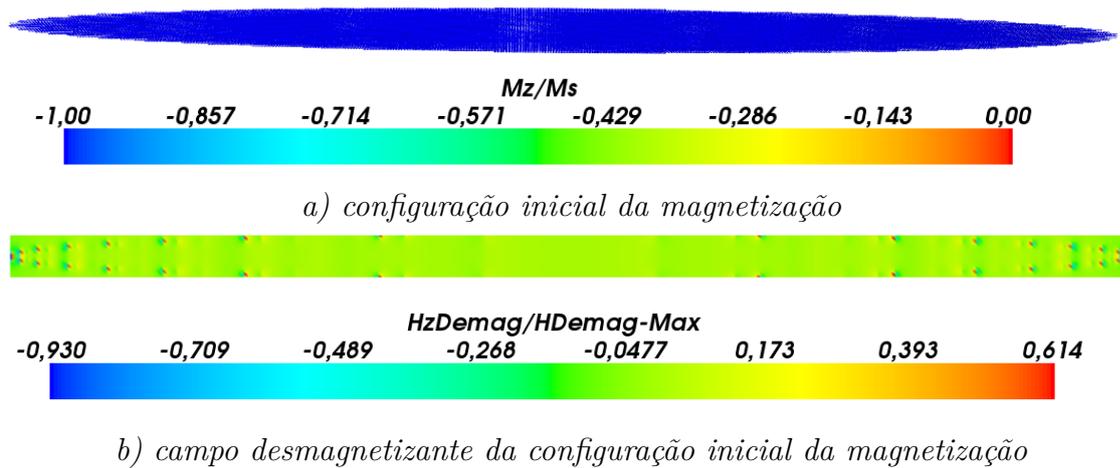


Figura 27 – Início do processo de reversão da magnetização no nanofio elipsoidal

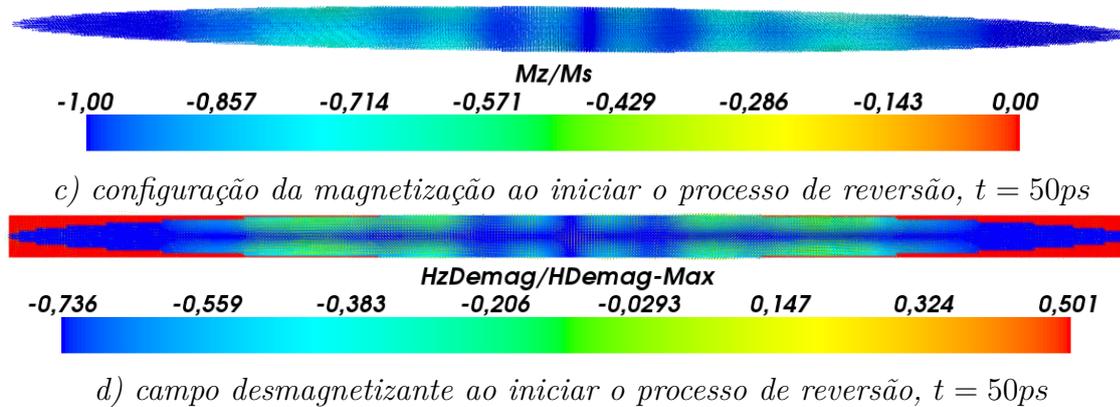


Figura 28 – Início do processo de reversão da magnetização no nanofio elipsoidal

localizadas entre o centro e as extremidades do nanofio. A mudança da região, onde inicia o processo de reversão, altera dramaticamente a dinâmica do processo de formação e propagação de parede de domínio. Isto ocorre através da sobreposição de dois processos simultâneos. O primeiro é a criação de estruturas de vórtice a partir da superfície até o núcleo do nanofio. O segundo processo é a expansão da reversão da região desde o centro até os extremos do nanofio. Isso produz uma estrutura magnética altamente não homogênea (Figura 29).

Na medida que o processo de reversão se expande para os extremos, o progresso nessa direção é cada vez mais lento devido à elevada homogeneidade do campo desmagnetizante. Isto permite que as estruturas de vórtice cheguem ao núcleo do nanofio antes que a reversão a seus extremos. Assim se completa a reversão da magnetização na parte intermédia do nanofio e se formam dois pares de paredes de domínio com estrutura de vórtice. Um par se expande para o centro do nanofio e o outro par se expande para os extremos do nanofio. Os processos de formação de vórtice, o cancelamento das paredes de domínio no centro e o avanço da parede de domínio para os extremos do nanofio vão acompanhados da precessão da magnetização da mesma forma que ocorre no cilindro (Figura 30).

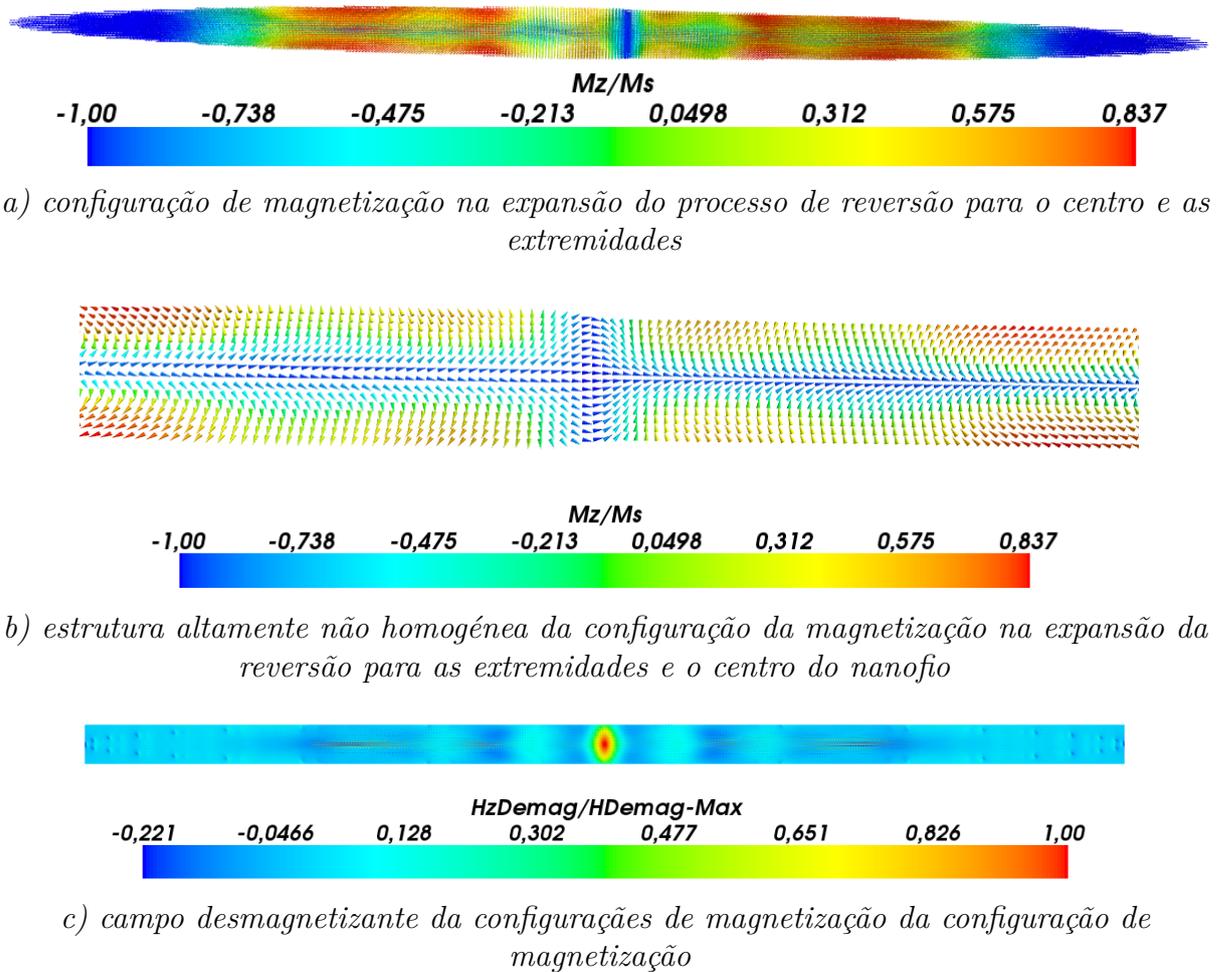
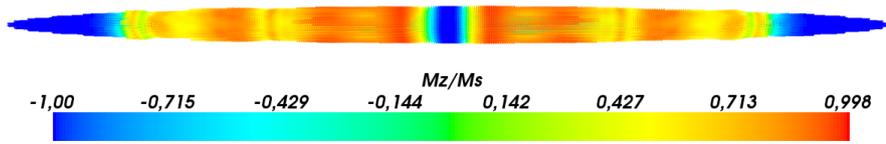


Figura 29 – Expansão das paredes de domínio para as extremidades e centro do nanofio elipsoidal, $t = 65ps$

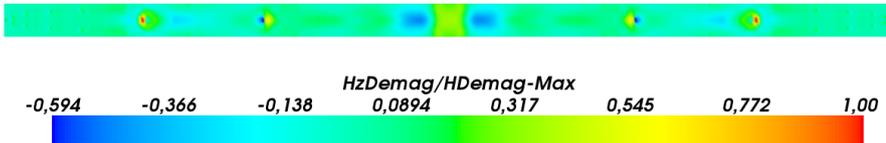
Nas figuras 31 e 32 se mostra a evolução temporal dos valores médios das componentes da magnetização nos eixos x e y. Nela se observa, a precessão dos valores médios das componentes da magnetização. As precessões podem ser analisadas de forma semelhante ao nanofio cilíndrico. Onde a precessão de menor magnitude se associa com a formação e translação das paredes de domínio. Enquanto a precessão de maior magnitude se associa com a aniquilação das paredes de domínio no centro do nanofio.

Além da precessão dos valores médios de magnetização discutidas acima, aparece outra precessão de amplitude ainda maior do que antes. De acordo com a sua forma indica um processo de amortecimento típico. O intervalo de tempo que acontece, coincide com o intervalo em que a reversão da magnetização é completada em nas extremidades do nanofio elipsoidal.

Nas simulações da dinâmica da reversão do nanofio, como uma sequência de poucos elipsóides (ou seja, sequências de 2, 4 e 5 elipsóides), há novos fatores a considerar. Estes são, a interação magnetostática e de troca entre os elipsóides. Como se mostra nas Figuras 33



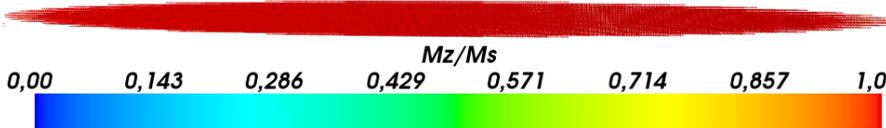
a) configuração da magnetização quando as paredes de domínio chegam ao centro do nanofio elipsoidal, $t = 90ps$



b) campo desmagnetizante del nanohilo no momento $t = 90ps$

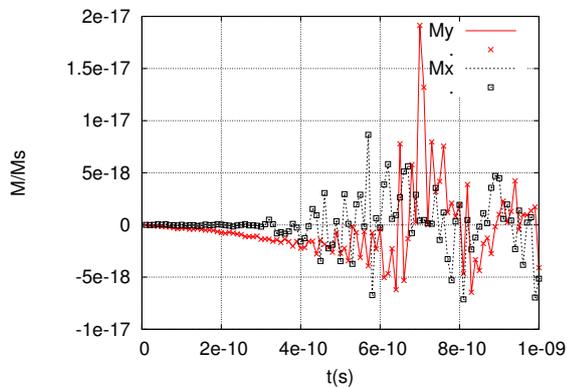


a) a reversão da magnetização conclue no meio do nanofio $t = 225ps$

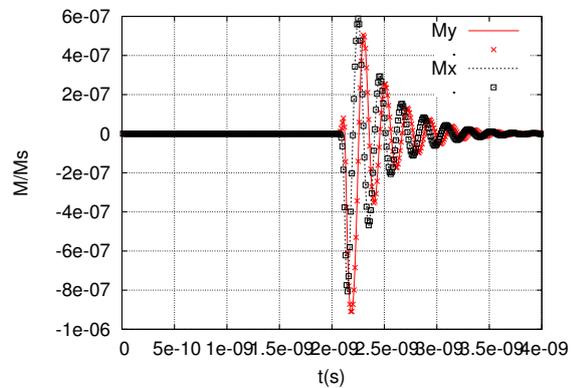


b) configuração de magnetização uma vez concluída a reversão da magnetização nas extremidades do nanofio $t = 620ps$

Figura 30 – Fase final do processo de reversão da magnetização do nanofio, elipsoidal.



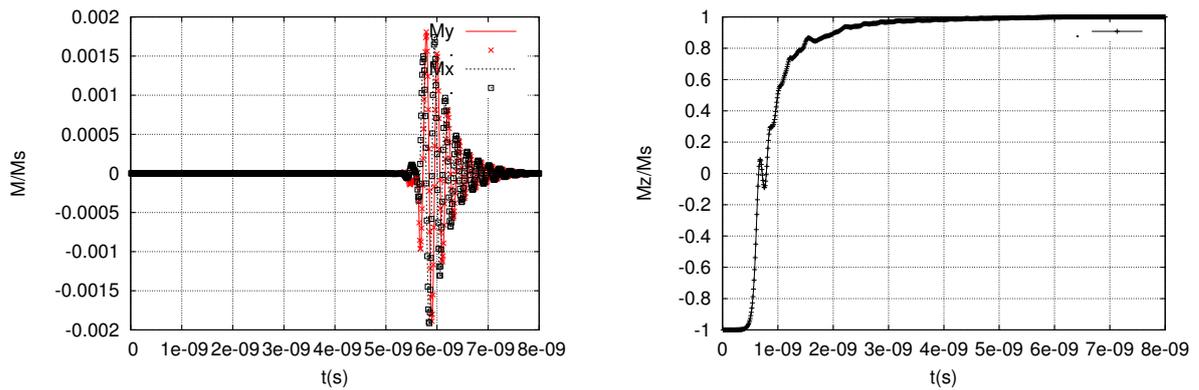
a) precessão devida à formação de estruturas de vórtice



b) precessão devida ao cancelamento das paredes de domínio no centro do nanofio

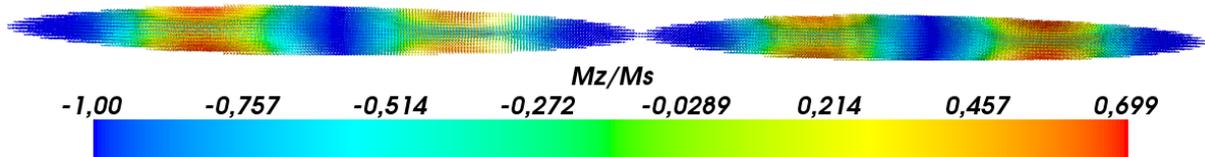
Figura 31 – Evolução no tempo dos valores médios das componentes da magnetização no nanofio com forma de elipsóide nas primeiras fases do processo de reversão

e 34, o processo de reversão passou através das mesmas etapas. Dessa forma apresentaram a mesma dinâmica que foi descrita na análise da reversão do nanofios composto por um elipsoide. Esta dinâmica foi apresentada simultaneamente em cada um dos elipsóides das seqüências de poucos elipsóides.

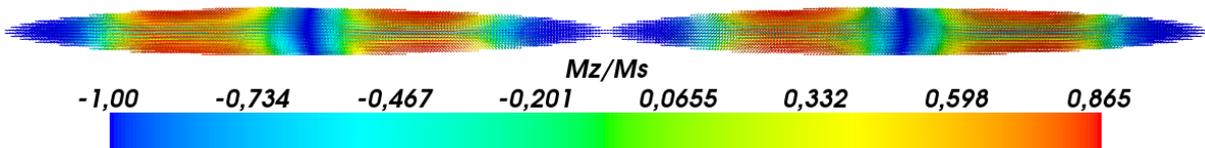


a) precessão devida à reversão da magnetização nas extremidades do nanofio b) evolução temporal do valor médio da componente da magnetização no eixo do nanofio

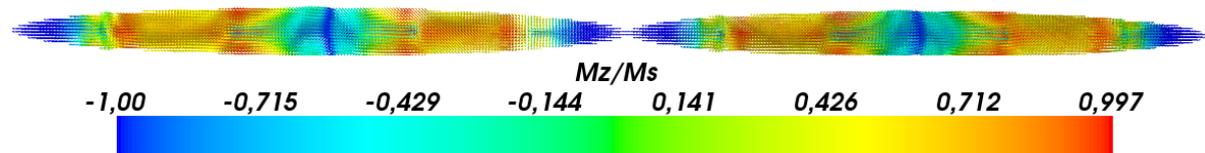
Figura 32 – Evolução no tempo dos valores médios das componentes da magnetização no nanofio com forma de elipsóide nas fases finais do processo de reversão



a) início do processo de reversão $t = 55ps$



b) estruturas de vórtice chegam no núcleo dos elipsóides $t = 125ps$



c) paredes de domínio avançam ao centro e às extremidades dos elipsóides $t = 180ps$

Figura 33 – Configurações de magnetização nas fases iniciais da reversão do nanofio simulado como uma sequência de dois elipsóides

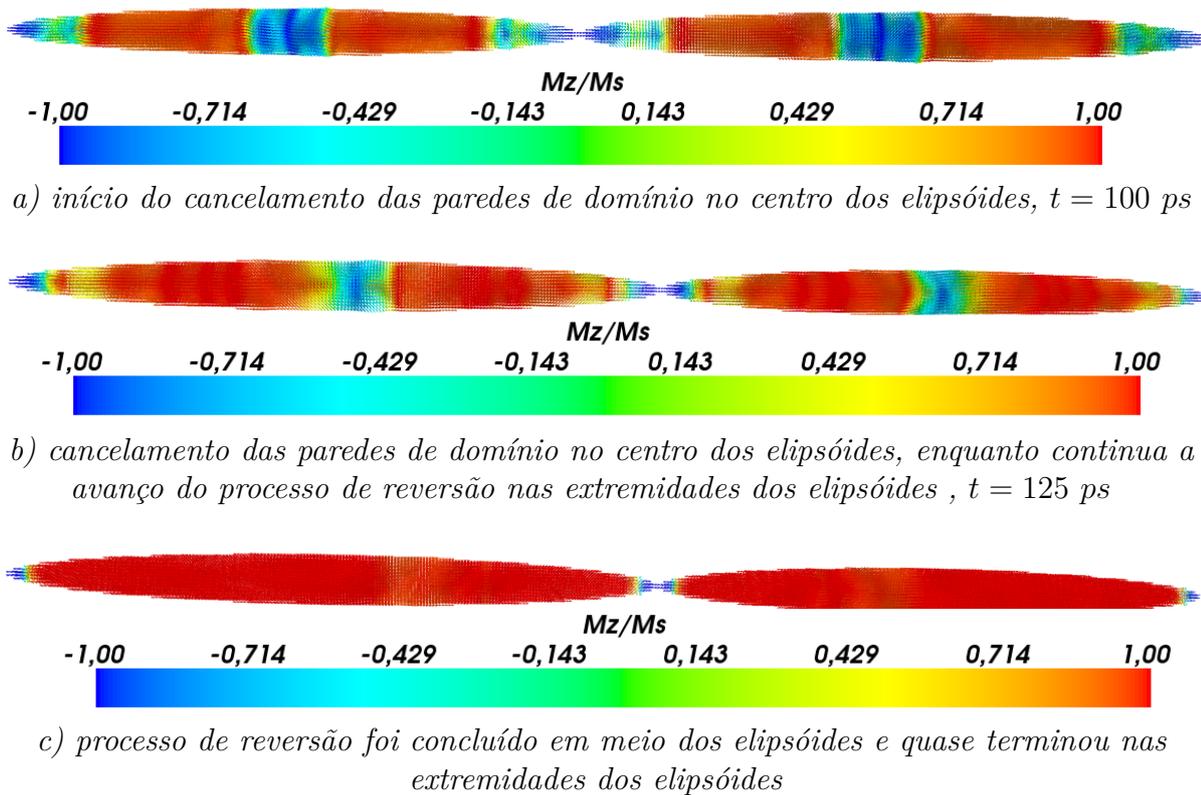


Figura 34 – Configurações de magnetização nas fases finais da reversão do nanofio simulado como uma sequência de dois elipsóides

Neste caso, não podem ser separados no gráfico da magnetização média vs tempo, os processo, de cancelamento das paredes de domínio no centro do elipsóide (Figura 35) e a expansão do processo de reversão para o centro e os extremos. Com o aumento do número de elipsóides se tem uma diminuição do tempo requerido para completar a reversão da magnetização. Isto é, porque o mesma dinâmica do processo de reversão ocorre em elipsóides cada vez menores.

Isto produz mudanças no intervalo de tempo em que ocorrem os diferentes fenómenos e a sobreposição da precessão devido ao cancelamento de paredes de domínio no núcleo dos elipsóides e à precessão da reversão da magnetização nos extremos dos elipsóides.

Na simulação da reversão da magnetização do nanofio como uma cadeia de 8 elipsóides, uma nova dinâmica foi obtida. Aqui, o processo de inversão de magnetização nos elipsóides, na ponta do nanofio começa na porção intermédia entre o centro da elipsóide e o extremo mais próximo do elipsóide. Depois, formam estruturas de vórtice e, simultaneamente se expande, para o centro e as extremidades do nanofio.

Neste caso, o processo não é simétrico como nas configurações anteriores (Figura 36), e acontece apenas na regiões intermédias entre o centro do elipsóide e seu extremo, nos elipsóides nas pontas da cadeia. Uma vez que o processo de reversão vai se espalhar para

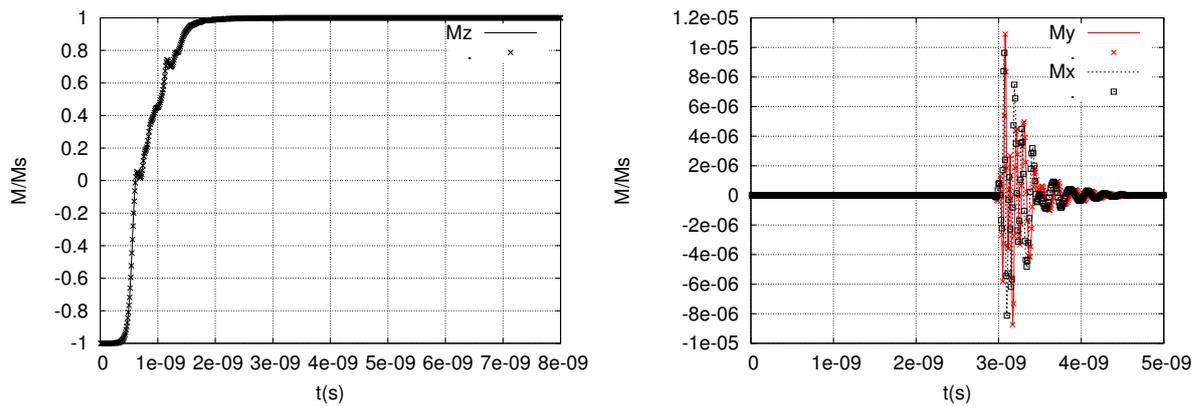


Figura 35 – Evolução temporal do valor médio das componentes da magnetização no nanofio simulado como uma cadeia de dois elipsóides. Da esquerda para direita: valor médio da componente da magnetização no eixo do nanofio, valores médios das componentes nos eixos x e y.

ocupar a totalidade dos elipsóides dos extremos ($t = 30$ ps), o par de elipsóides vizinhos a os elipsóides com momentos já revertidos começam a experimentar a mesma dinâmica. Depois se sobrepõem a dinâmica da reversão, que foi encontrada nas configurações com menor número de elipsóides.

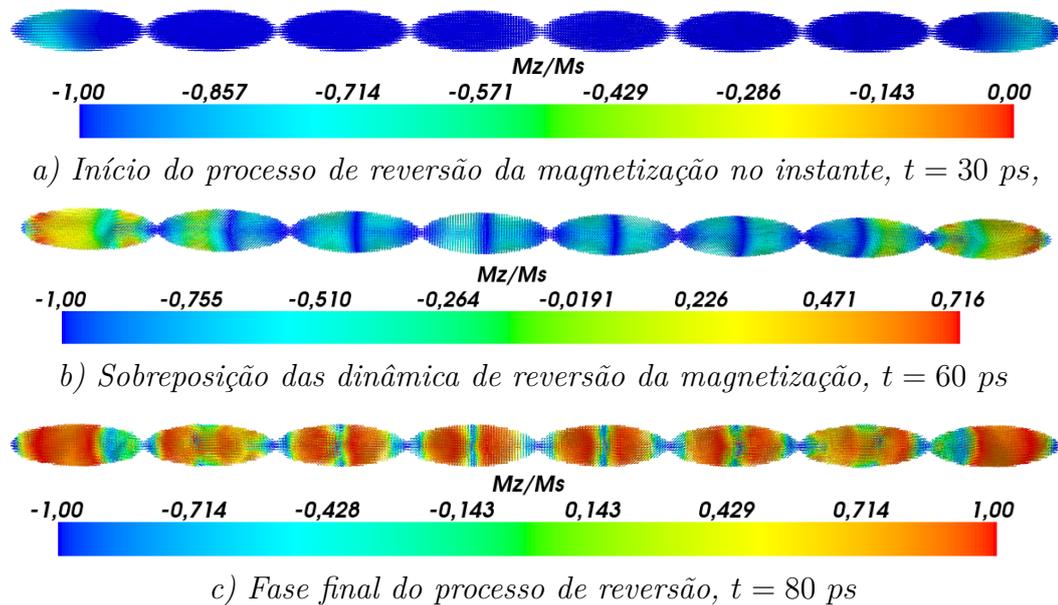


Figura 36 – Evolução temporal da magnetização no nanofio composto por 8 elipsóides.

Uma causa possível da mudança da dinâmica da reversão nesta configuração é a diminuição do tamanho dos elipsóides que formam o nanofio. Esta diminuição do tamanho, torna a interação dipolar entre os elipsóides, capaz de dificultar a formação das inhomogeneidades do campo nas regiões intermédias dos nanofios. Dessa forma a reversão vai começar nos extremos do nanofio, mas a interação dipolar não é suficiente para impedir posteriormente a formação de inhomogeneidades nas regiões intermédias dos elipsóides.

2.1.3 Nanofio simulado como um número médio de elipsóides

Nas simulações em que o nanofio foi considerado como uma sequência de um número médio de elipsóides (ou seja, 20, 25 e 40 elipsóides) foi encontrada uma nova variação da dinâmica de reversão da magnetização. A figura 37 mostra, a configuração da magnetização do nanofio composto por 20 elipsóides, depois de 20 ps de aplicar o campo. Nesse momento inicia do processo de reversão.

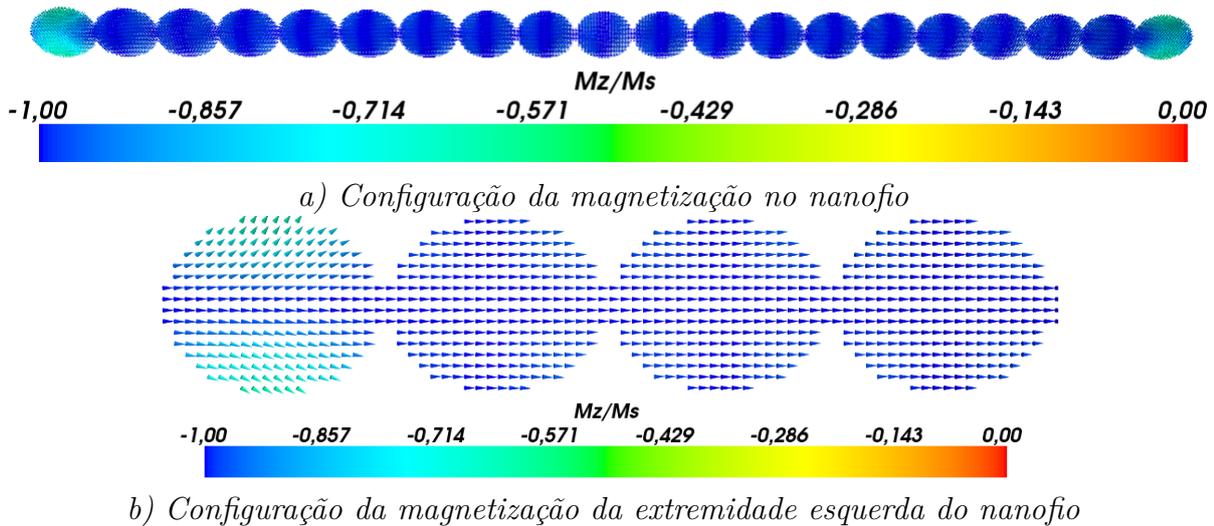


Figura 37 – Início do processo de reversão no nanofio composto por 20 elipsóides, $t = 20$ ps

Semelhante a como acontece no nanofio composto por 8 elipsóides, o processo de reversão inicia nos elipsóides mais externos. Neste caso a região onde inicia o processo é diferente. Na configuração formada por 8 elipsóides, a reversão inicia na região superficial, entre o centro e a extremidade livre dos elipsóides exteriores. Nesta configuração começa em toda a superfície de revolução do eixo menor do elipsóide externo. Na medida que os momentos da superfície mudam sua orientação são formadas estruturas de vórtices que se movem entre os extremos do elipsóide (Figura 38). Simultaneamente, o processo de reversão vai se aproximando ao núcleo do elipsóide.

Enquanto a reversão inicia no elipsóide exterior, no vizinho muda o perfil do campo desmagnetizante. Isto é devido a que com a mudança das orientações dos momentos do elipsóide mais externo, a interação dipolar entre o elipsóide exterior e seu vizinho é alterada (Figura 39). Uma vez que começam-se a formar estruturas de vórtice no elipsóide mais externo do fio, inicia a reversão da magnetização no elipsóide vizinho (Figura 40).

A reversão dos momentos nos elipsóides vizinhos começa na região da superfície entre o centro do elipsóide e a extremidade oposta ao elipsóide externo. Em seguida, o processo de reversão se propaga no sentido da outra extremidade do elipsóide, o que altera o campo desmagnetizante do elipsóide vizinho, conduzindo ao início da reversão nele. Este é um processo que ocorre consecutivamente entre os elipsóides da sequência. Nos

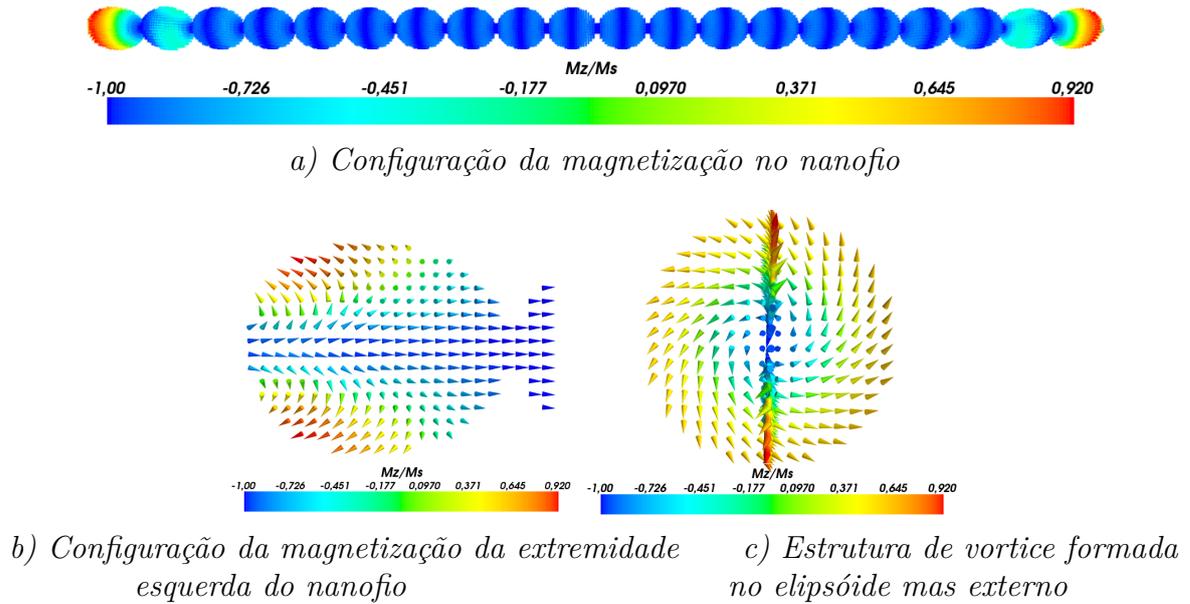


Figura 38 – Configuração da magnetização no nanofio composto por 20 elipsóides, $t = 40$ ps

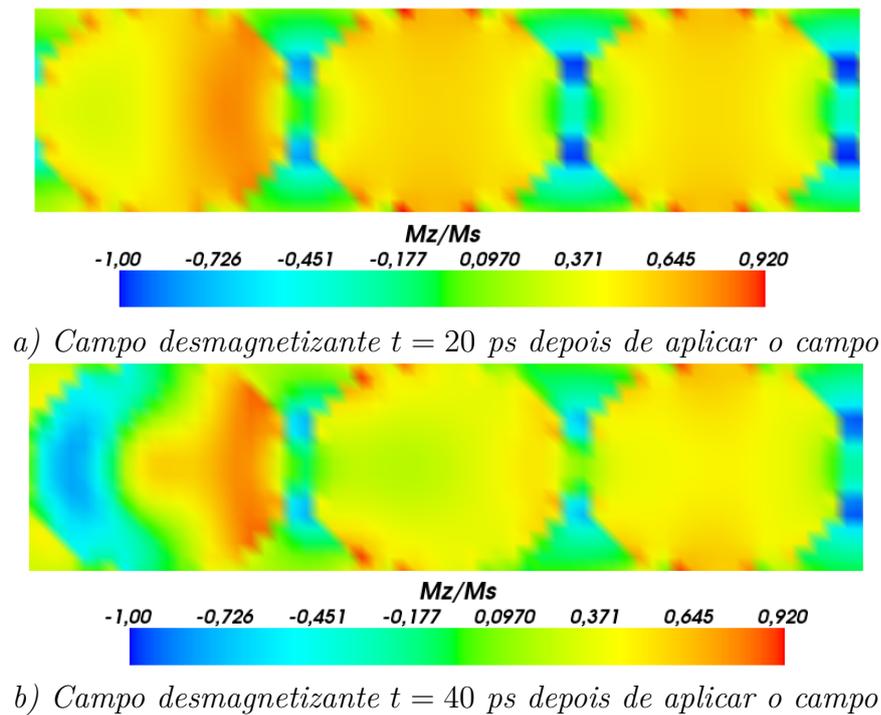
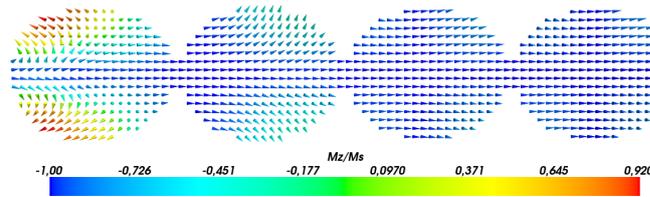


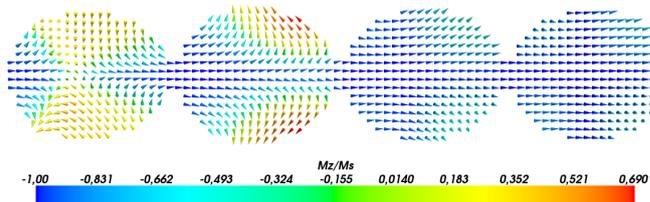
Figura 39 – Mudança do campo desmagnetizante na propagação do processo de reversão entre os elipóides

elipsóides, onde já se iniciou o processo de reversão, são formadas estruturas de vórtice, que se deslocam ao longo dos elipsóides até completar a reversão (Figuras 40 e 42).

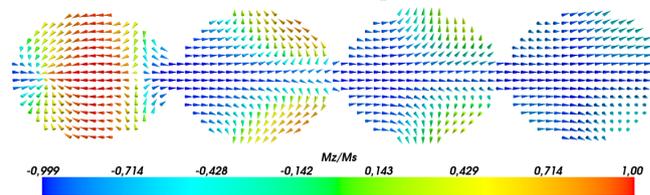
Nesta configuração, se observa que a variação no tamanho dos elipsóides produz uma mudança no papel das interações dipolares entre os nanofios. Isto modifica a dinâmica do processo de reversão. Neste momento o regime de uma inversão simultânea em cada



a) Início do processo de reverão no segundo elipsóide do extremo esquerdo do nanofio, $t = 40 \text{ ps}$



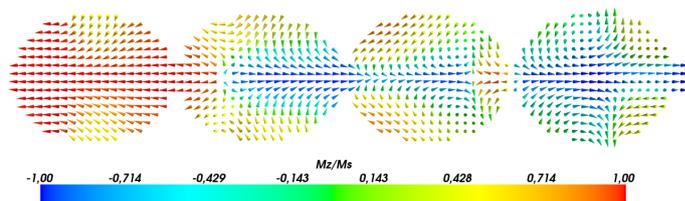
b) Início do processo de reverão no terceiro elipsóide do extremo esquerdo do nanofio, $t = 50 \text{ ps}$



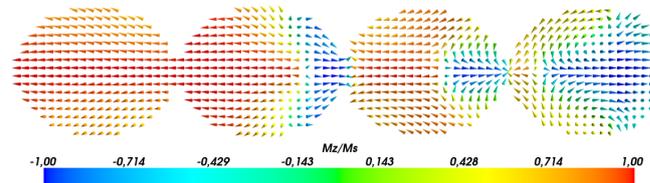
c) Início do processo de reverão no quarto elipsóide do extremo esquerdo do nanofio, $t = 60 \text{ ps}$

Figura 40 – Início e propagação da reversão da magnetização nos elipsóides do nanofio

um dos elipsóides a uma reversão sequencial. Mas, sem alterar o modo de reversão da magnetização.



a) A estrutura de vórtice no segundo elipsóide encontra o elipsóide vizinho reverteu completamente, $t = 85 \text{ ps}$

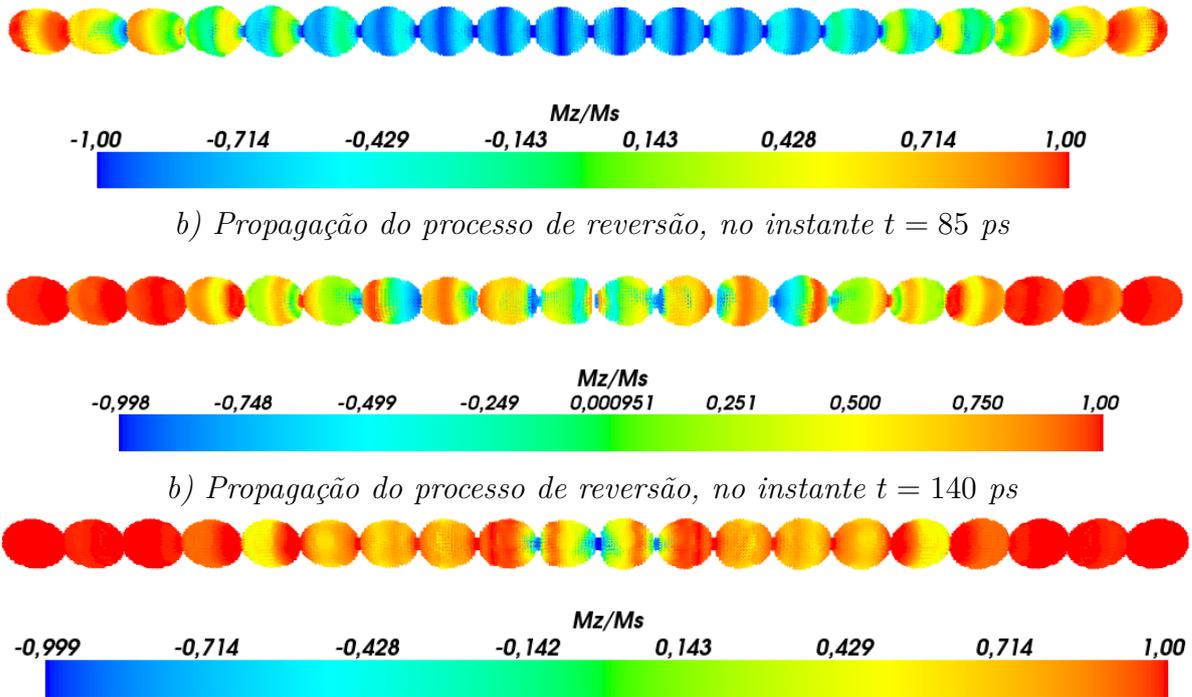


b) A parede de domínio no segundo elipsóide se propaga completando a reversão, $t = 95 \text{ ps}$

Figura 41 – Detalhes da propagação da reversão da magnetização entre os elipsóides do nanofio

Uma observação interessante é que a reversão começa a se completar no núcleo dos elipsóides, o que é esperado porque os momentos dessa região tem menor mobilidade.

Portanto, uma vez que os momentos eles alcançam a orientação onde a sua energia é mínima (neste caso é a orientação do campo aplicado), serão os momentos magnéticos mais difíceis de reorientar. Ainda assim, como a reversão é completada através do movimento de estruturas de vórtice entre as extremidades de cada elipsóide, uma vez que os momentos do núcleo estão orientados na direção do campo, a orientação deles pode sofrer flutuações.



c) Configuração de magnetização no final do processo de reversão, no instante $t = 160$ ps

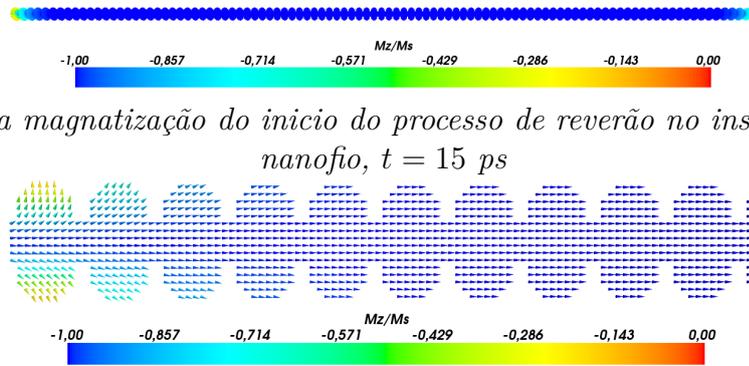
Figura 42 – Fase final da reversão da magnetização no nanofio de 20 elipsóides

Mas no caso em que um vórtice atinge o extremo do elipsóide e faz contato com a região de núcleo do elipsóide vizinho onde a reversão foi completada (Figura 41). A interação de intercâmbio com a região dos momentos revertidos do elpsoide vizinho, favorece que os momentos do núcleo do elipsóide se alinhem na direção do campo. Isto elimina as flutuações devido ao movimento das estruturas de vórtices. É por isso que se uma parede de domínio viaja na direção da extremidade oposta do elipsóide vizinho mencionado acima, separando uma região completamente invertida de outra no meio do processo de reversão.

Isto provoca um aumento da influência da interação de troca entre os elipsóides sobre a dinâmica do processo de reversão. Em geral, a evolução da reversão nas regiões de contato dos elipsóides são independentes. Isto sugere que a magnitude da interação de troca entre os elipsóides não é tão intensa como para produzir de forma sistemática, alterações significativas na dinâmica do processo de reversão.

2.1.4 Nanofio simulado como um conjunto de muitos elipsóides

Esta configuração é formada por uma sequência de elipsóides oblatos. Pelo que o núcleo de cada um dos elipsóides, interage fortemente com núcleo do elipsóide vizinho.

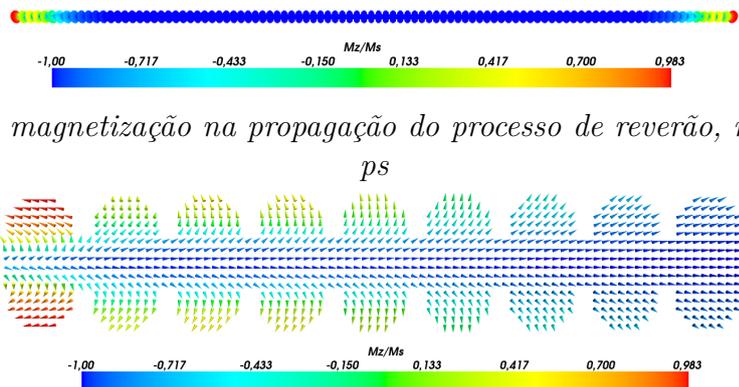


b) Visão geral da magnetização do início do processo de reverão no instante esquerdo do nanofio, $t = 15$ ps

b) Início do processo de reverão no terceiro elipsóide do extremo esquerdo do nanofio, $t = 15$ ps

Figura 43 – Propagação do início da reversão da magnetização entre os elipsóides do nanofio

O processo de reversão começa na região de maior curvatura dos elipsóides mais externos, 10 ps depois de ter sido aplicado o campo. Uma vez iniciado o processo de reversão, se formam rapidamente estruturas de vórtice, que viajam entre as extremidades dos elipsóides (Figura 43). O início do processo de reversão se propaga muito rapidamente, enquanto os núcleos dos elipsóides permanecem inalterados, devido ao acoplamento por interação de troca (Figura 44).



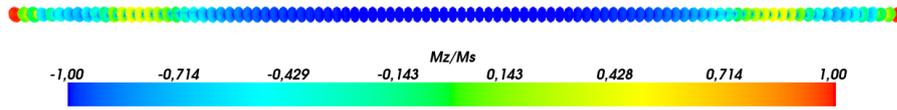
b) Visão geral da magnetização na propagação do processo de reverão, no instante $t = 40$ ps

b) Detalhe da propagação do processo de reverão esquerdo do nanofio, no instante $t = 40$ ps

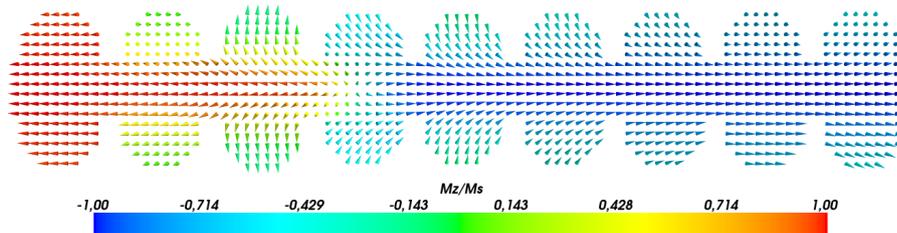
Figura 44 – Propagação do início da reversão da magnetização entre os elipsóides do nanofio

Depois que nas regiões de maior curvatura dos dois elipsóides mais extenos a reversão for concluída, inicia o processo de reversão no núcleo dos elipsóides (Figura 45). Nesta nova fase se formam duas paredes de domínio com forma de vórtice, que se movem

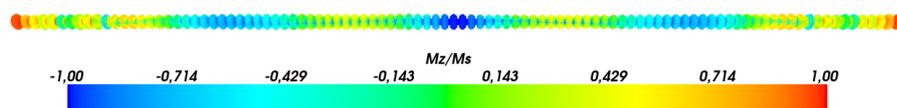
na direcção do centro do nanofio completando a reversão. Dessa forma as regiões de grande curvatura ficam sem reverter completamente os momentos. A reversão destas regiões é completada mais lentamente através do movimento das estruturas de vórtices entre as extremidades dos nanofios.



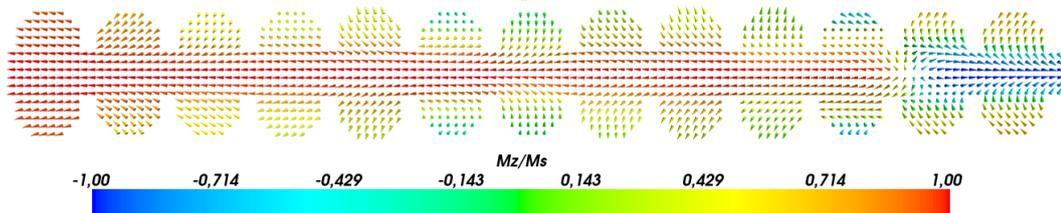
a) Visão geral da magnetização na propagação do processo de reverão, no instante $t = 80$ ps



b) Detalhe da propagação do processo de reverão esquerdo do nanofio, no instante $t = 80$ ps



c) Visão geral da magnetização na propagação do processo de reverão, no instante $t = 120$ ps



d) Detalhe da propagação do processo de reverão esquerdo do nanofio, no instante $t = 120$ ps

Figura 45 – Propagação do início da reversão da magnetização entre os elipsóides do nanofio

Aqui nota-se que nas regiões de maior curvatura (de superfície) é onde começa mais facilmente a variação da configuração de magnetização. Aqui, numa primeira fase, o efeito da energia dipolar facilita a propagação do início do processo de reversão consecutivamente em cada elipsóide. Onde o acoplamento entre os núcleos dos elipsóides pela interação de troca que tem um papel principal, facilitando a culminação do processo de reversão nos núcleos dos elipsóides (Figura 46).

Segundo os resultados dos mapas vetoriais, o nanofio pode ser classificado a partir da topologia do processo de reversão da magnetização, em regimes de cadeia de poucos elipsóides, número meio de elipsóides e muitos elipsóides.

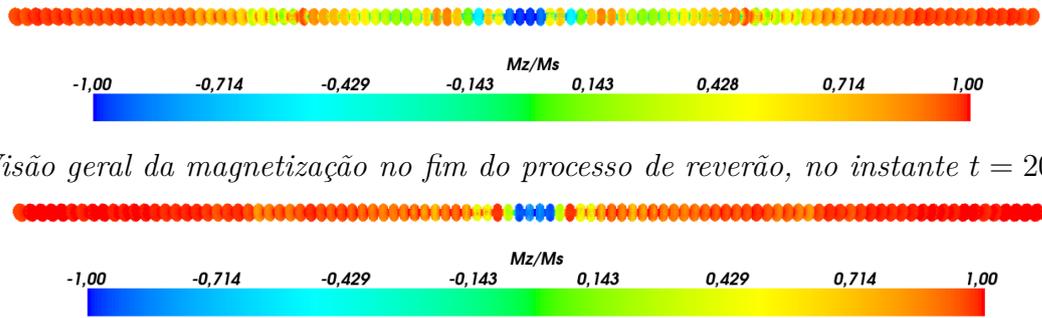


Figura 46 – Propagação do início da reversão da magnetização entre os elipsóides do nanofio

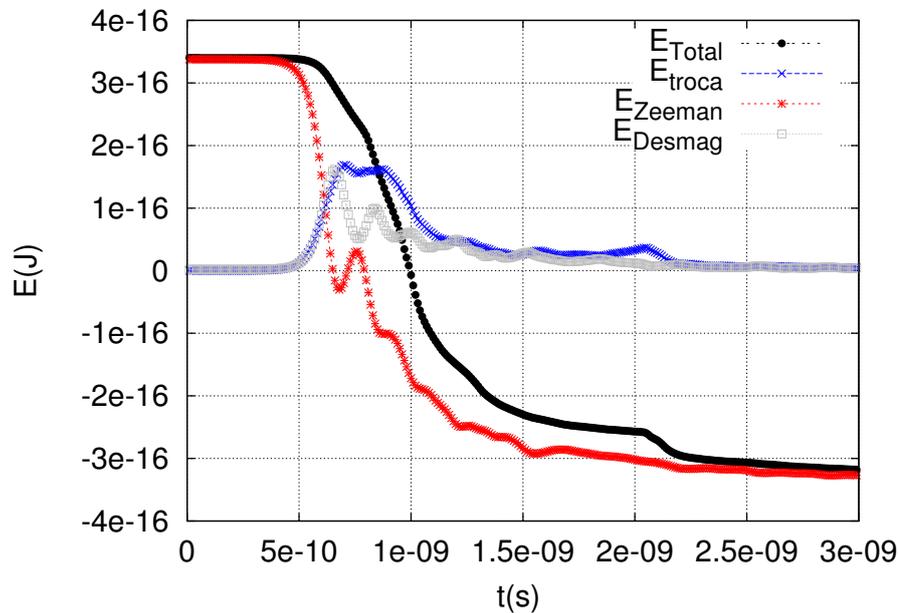
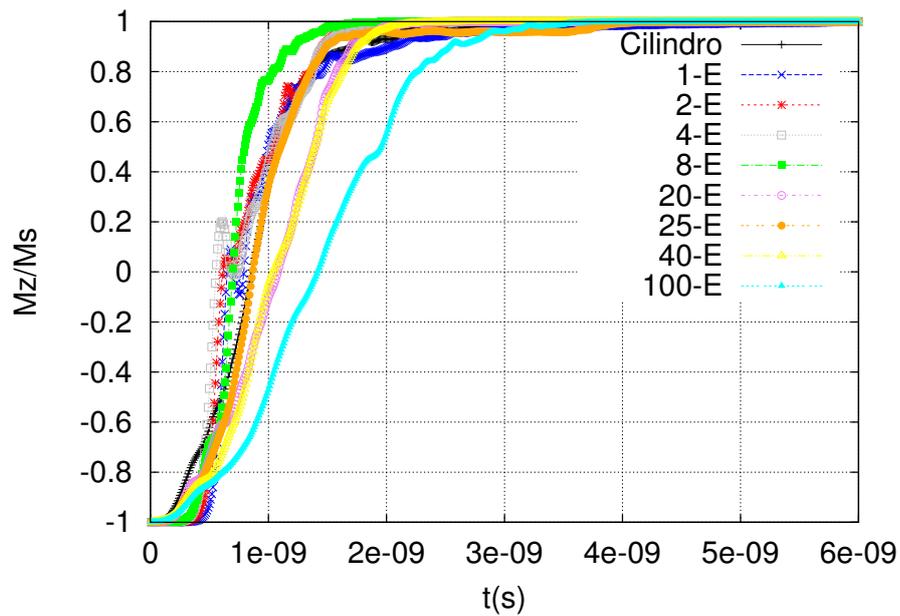


Figura 47 – Evolução temporal da energia nos nanofios em modo de reversão curling

Quando a evolução temporal do processo de reversão foi analisada, observou-se para todas as configurações um comportamento similar de evolução temporal das energias. A Figura 47 a) mostra, que o nanofio através do processo de reversão, passa de um estado de maior energia a um estado de menor energia (curva de energia total, E_{Total}), como era esperado. Pode-se ver que a interação de Zeeman é a que mais contribui para a energia total (curva E_{Zeeman}). Enquanto, as energias desmagnetizante e de troca apresentam um pico assimétrico, que se forma no instante em que a energia de Zeeman começa a diminuir.

A figura 48 mostra a evolução temporal do valor médio da magnetização de todas as configurações estudadas para este modo de reversão. Ela mostra que na medida que aumenta o número de elipsóides a inclinação da curvas é menor. Isto pode estar relacionado com a diminuição do número de paredes de domínio com o aumento do número de elipsóides. Para este modo de reversão foi observado que as extremidades dos elipsóides são regiões



O número antes da E representa a quantidade de elipsóides na configuração.

Figura 48 – Evolução temporal do valor médio da componente da magnetização no eixo do nanofio das configurações em modo curling

onde o avanço das paredes de domínio é difícil. O aumento da quantidade destas regiões com o aumento do número de elipsóides poderia explicar a redução de velocidade do processo de reversão.

2.2 Estática

Na análise estática das propriedades magnéticas foram obtidos os ciclos de histerese através da minimização da energia. Para isso foi aplicado inicialmente um campo externo na direção do eixo dos nanofios e também para direções do campo externo que desviam do eixo do nanofio a partir de 5 até 90 graus. Os valores de campo aplicado variaram entre +500 e -500 mT em cada uma das direções em que o campo externo foi aplicado. Neste caso, o campo foi variado 5 mT entre cada um dos estados de equilíbrio.

Na figura 49 são mostrados os ciclos de histerese de configurações representativas das distintas dinâmicas observadas. Estes ciclos de histerese correspondem a simulações com campo aplicados na direção do eixo do nanofio. Na Figura 49 se observa que os ciclos de histerese em cada uma das configurações, tem características de um sistema de dois estados. Isto significa que para este ângulo de aplicação do campo, coincidem os valores de campo coercitivo, campo de nucleação e campo de comutação. Estes valores se encontram num intervalo de $447,5 - 57,3 \text{ mT}$. Para configurações onde o nanofio é uma cadeia de elipsóides, se observa uma diminuição dos valores de campo coercivo com o aumento do número de elipsóides. Este resultado é semelhante ao resultado do modelo de nanofios como cadeia de elipsóides, Xiancong (13), onde foi obtido a diminuição do campo coercivo com a diminuição da razão de aspecto dos elipsóides (Figura 17). No modelo de Xiancong foi utilizada a reversão coerente. Isto sugere que a diminuição do campo coercivo é primariamente um resultado da diminuição do tamanho dos elipsóides, independentemente do modo de reversão presente na amostra.

Isto permite avaliar o efeito do tratamento térmico sobre as propriedades dos nanofios para sua utilização em dispositivos magnéticos. O tratamento térmico pode reduzir o contorno dos grãos cristalinos que formam o nanofio (27), reduzindo o número de cristais e, de acordo com nossos resultados, aumentaria a coercitividade. Para a aplicação em gravacion magnética a longo prazo são ideais materiais com uma ciclo de histerese quadrado e media coercividade (5). O tratamento térmico teria o potencial para melhorar as propriedades dos nanofios para sua aplicação em dispositivos magnéticos. O que foi observado no trabalho de Holanda (27) nos ciclos de histerese não retangulares de nanofios em membranas de alumina.

Quando o campo foi aplicado numa direção diferente ao eixo do nanofio os laços de histerese de todas as configurações mostraram características semelhantes. Na Figura 50 são apresentados os ciclos de histerese para diferentes ângulos para o nanofio composto por 4 elipsóides. Nessa figura observa-se que quanto mais se desviar a direção de aplicação do campo do eixo de nanofio, o ciclo de histerese se afasta cada vez mais das características de um sistema de dois estados, até ser diagonal quando o campo é perpendicular ao eixo do nanofio. Forma diagonal no ciclo de histerese para $\alpha = 90^\circ$ é ideal para o campo de comutação de cabeças de leitura nas aplicações de suportes magnéticos (5).

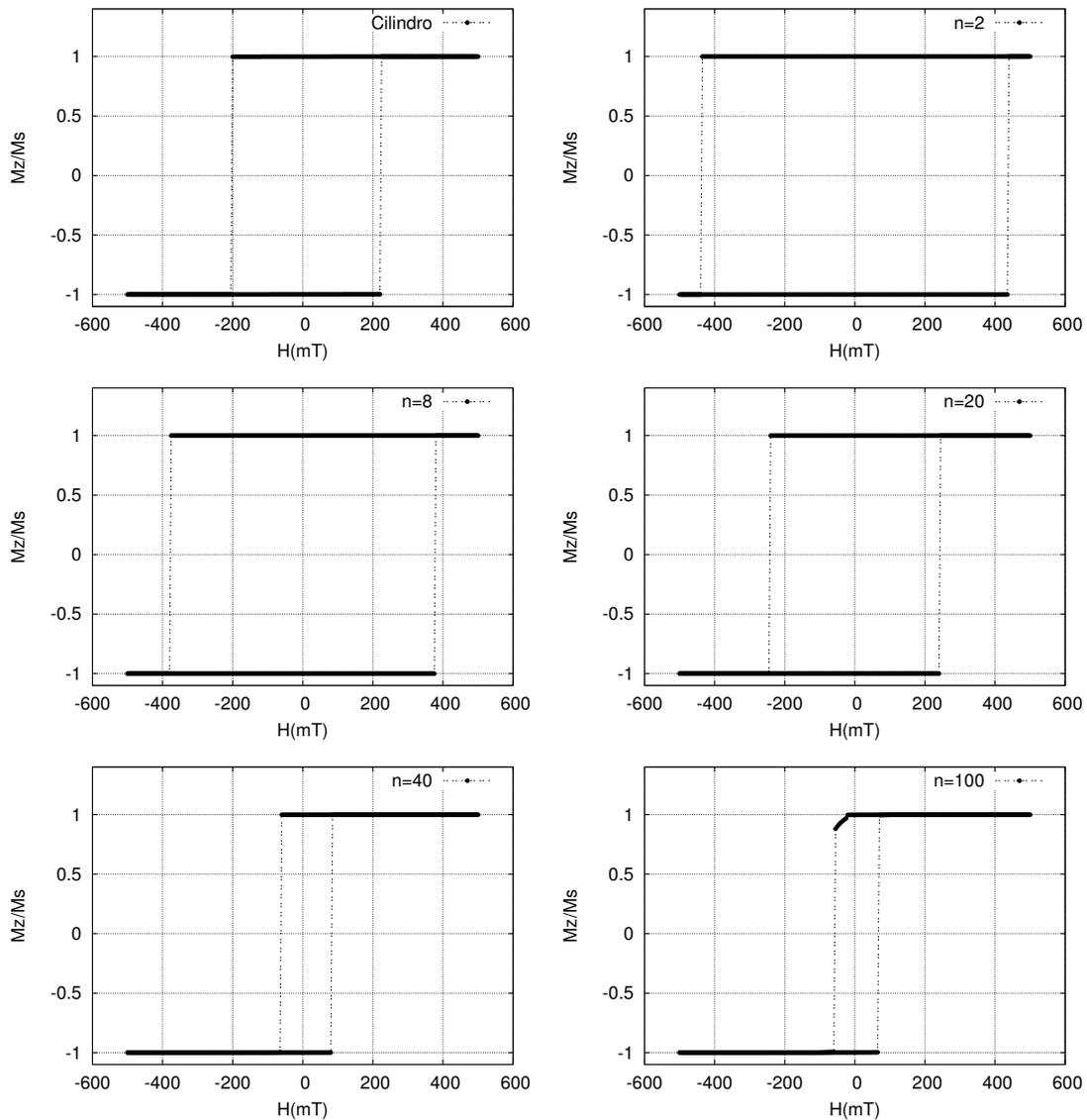


Figura 49 – Ciclos de histerese representativos das configurações simuladas com o campo aplicado no eixo do nanofio ($\theta = 0$), n é o número de elipsóides da configuração

Na medida em que o ângulo de desvio com respecto ao eixo do nanofio aumenta, os valores de campo de nucleação, do campo coercivo e do campo de comutação, começam a se diferenciar em seus valores (Figura 67). Para pequenos ângulos ($\alpha \leq 35^\circ$) valores dos campos coercivos e de comutação coincidem. Para ângulos entre 80 e 90 graus não foi possível definir o valor do campo de comutação, porque não foi observada nenhuma mudança abrupta nas curvas de histerese (Figura 51). Por isso foi possível obter a dependência angular do campo coercivo e a magnetização remanente para ângulos entre 0° e 90° (Figuras 53 e 52). Somente foi possível obter a dependência angular do campo de comutação entre 0° e 75° . Foi obtida a dependência angular do campo coercitivo e a magnetização remanente entre 0° e 90° .

A dependência angular da remanência se mostra na Figura 52. Nela se observa

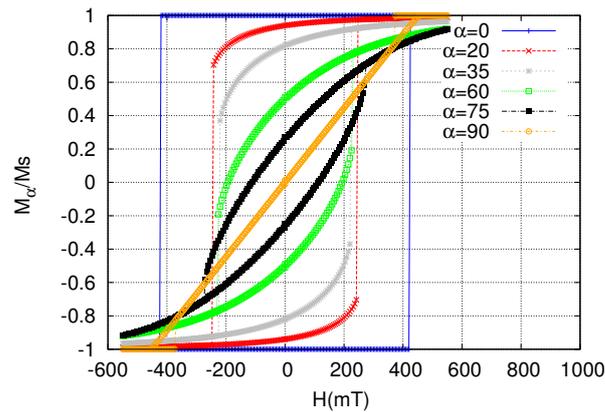


Figura 50 – Ciclos de histeres do nanafio formado por 4 elipóides para vários ângulos

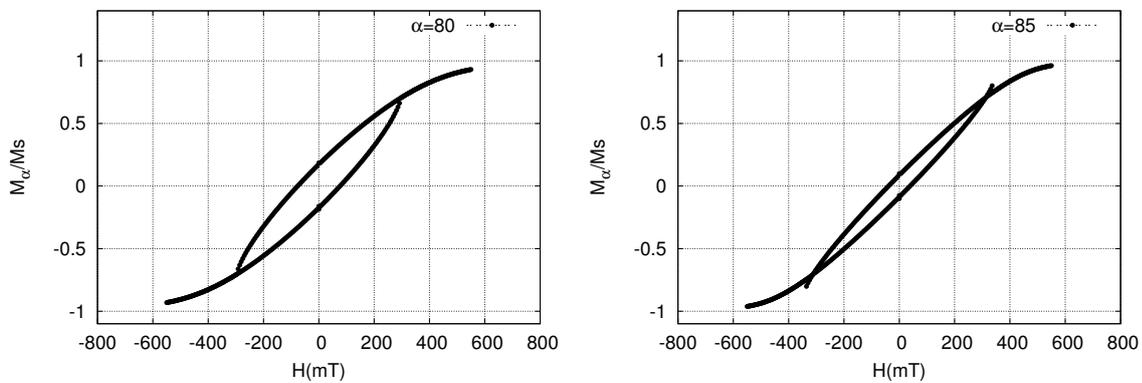


Figura 51 – Ciclos de histerese do nanafio composto por 4 elipsóides nos ângulos onde não é possível definir o campo de comutação.

uma diminuição da remanência com o aumento do ângulo. Isto é resultado da interação dipolar, que pela forma do nanofio faz que o nanofio seja fácil de magnetizar na direção de seu eixo e muito difícil de magnetizar na direção perpendicular.

Na figura 53 se mostra a dependência angular do campo coercitivo. Nela se observa que na maioria das configurações o campo coercitivo tem seu maior valor quando o campo é aplicado no eixo do nanofio. Isto acontece porque a magnitude decisiva na evolução da estrutura magnética é o torque exercido pelo campo efetivo $\vec{M} \times \vec{H}_{eff}$. Além disso na análise da evolução temporal das energias, se tem que a energia Zeeman é a de maior magnitude, pelo que a contribuição a o campo efetivo é maior. Assim quando o campo é aplicado, numa direção diferente ao eixo do nanofio, o campo aplicado e a magnetização não são antiparalelos. Com um campo externo menor que o campo coercitivo do eixo do nanofio é possível produzir um torque capaz de iniciar a reversão e fazer que a magnetização seja zero na direção do campo aplicado.

Na medida que aumenta o número de elipsóides da configuração a variação do campo coercitivo com o ângulo é menos pronunciada. Isto se deve à diminuição do campo

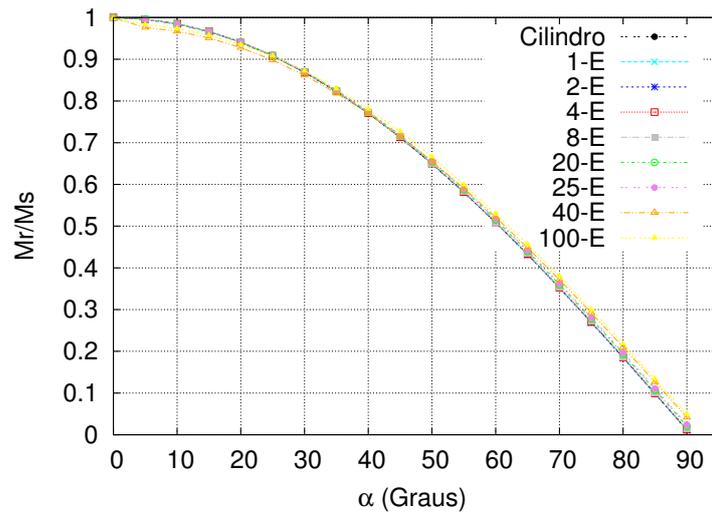


Figura 52 – Dependência angular da magnetização remanente no modo de reversão curling (a notação número-E indica o número de elipsóides da configuração).

coercitivo com a diminuição das dimensões dos elipsóides. Na configuração de 100 elipsóides não é observada a redução abrupta do campo coercitivo para ângulos pequenos.

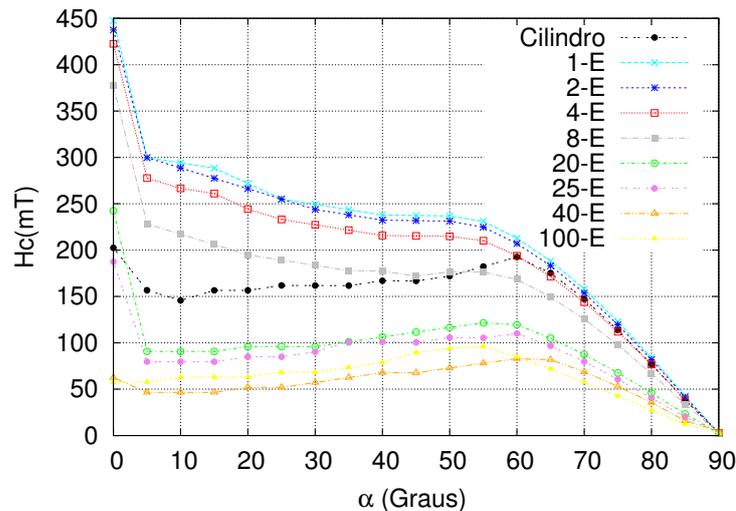


Figura 53 – Dependência angular do campo coercitivo das configurações simuladas no modo de reversão curling (a notação número-E indica o número de elipsóides da configuração).

Em geral o campo coercitivo das configurações diminui de forma abrupta seu valor, em 50° . Logo, nas configurações de poucos elipsóides o campo coercitivo diminui suavemente até 70° . Nas outras configurações o valor do campo coercitivo aumenta ligeiramente até os 70° . A partir desse ângulo os valores de campo coercitivo de todas as configurações diminuem gradualmente até valores perto de zero, em 90° .

A dependência angular do campo de comutação obtida neste trabalho [54](#), é similar com os resultados do modelo de Xiancong (Figura [17](#)) e com os resultados obtidos

experimentalmente por Wernsdorfer (Figura 15). Para ângulos menores que 35° o campo de comutação e o campo coercitivo coincidem, o aumento do torque, com a variação do ângulo de aplicação do campo deve ser suficiente para explicar o salto em nos gráficos 54, 15 e 17 para 0° . O campo coercitivo dos elipsóides diminui na medida que são menores, temos pequeno no salto na configuração cilíndrica (ver na Figura 54 as configurações as configurações Cilindro e 100 E). Isto explicaria porque o modelo analítico de nanofio cilíndrico não é capaz de explicar o salto no grafico 15.

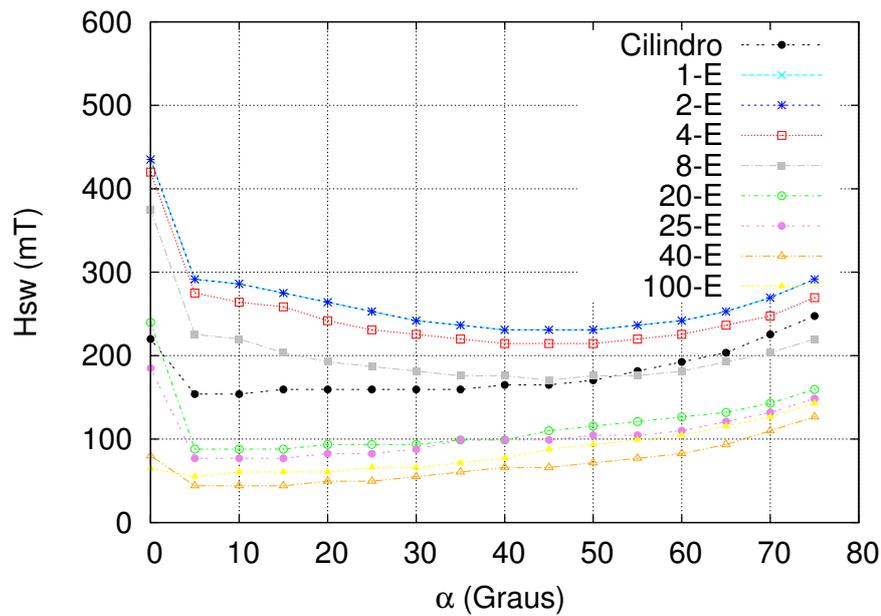


Figura 54 – Dependência angular do campo de comutação das configurações simuladas no modo de reversão curling (a notação número-E indica o número de elipsóides da configuração)

3 Efeito da rugosidade na reversão da magnetização em modo transversal

Neste capítulo são apresentados os resultados de simulações micromagnéticas para a análise do efeito da rugosidade (definida como o número de elipsóides nos nanofios) sobre as propriedades magnéticas dos nanofios. Para isso foi selecionado o diâmetro de nanofios que corresponde ao modo de reversão transversal, de acordo com as simulações feitas em cilindros. Cada nanofio é inicialmente simulado como um cilindro para "calibrar" os resultados com os resultados da literatura (31). Depois, o nanofio é simulado como uma sequência de elipsóides para configurações com quantidades diferentes de elipsóides.

Para cada configuração foram simulados também os ciclos de histerese a través da minimização da energia e a dinâmica de reversão da magnetização através da integração das equações de Landau-Lifshitz-Gilbert. Para as simulações foram escolhidos os mesmos parâmetros que no capítulo 2, exceto o diâmetro do nanofio. Isto é, $1 \mu m$ como comprimento para cada um dos nanofios de níquel, amortecimento $\alpha = 0,1$, razão gyromagnetic $\gamma = 3,09 MHz/Oe$, a constante de troca $A = 1,05 \times 10^{-11} J/m$ e polarização de saturação do níquel $J_s = 0,525 T$. Em todas as configurações utilizadas nas simulações o estado de magnetização inicial escolhido foi o da magnetização paralela ao eixo do nanofio.

Nestas simulações também foi considerado que em nanofios ferromagnéticos de níquel o efeito da energia magnetostática é tão forte que supera a energia magnetocristalina na definição do sentido de fácil magnetização (20, 63, 64). Além, os nanofios não são simuladas sob tensões mecânicas. Pelo que foram negligenciadas a energia magnetocristalina e a magnetoelástica. As dimensões das células a partir dos quais os resultados são independentes da presente célula tamanho na Tabela 3:

Configuraciones	cellsizeX (nm)	cellsizeY (nm)	cellsizeZ (nm)
Cilindro	1,0	1,0	2,0
1 Elipsóide	1,0	1,0	2,5
2 Elipsóides	1,0	1,0	2,5
4 Elipsóides	1,0	1,0	2,5
8 Elipsóides	1,0	1,0	2,5
20 Elipsóides	1,0	1,0	2,5
25 Elipsóides	1,0	1,0	2,5
40 Elipsóides	1,0	1,0	2,0
100 Elipsóides	1,0	1,0	1,0

Tabela 3 – Dimensões das células utilizadas nas simulações para o modo de reversão transversal

3.1 Dinâmica do processo de reversão da magnetização

Nas simulações da dinâmica de reversão foi aplicado um campo constante de 800 mT , suficientemente intenso para causar a reversão na direção oposta à da configuração inicial da magnetização em todas as amostras.

3.1.1 Cilindro

A rede foi discretizada em um total de $16 \times 16 \times 500$ células, e o passo temporal foi 1 ps . Na configuração inicial da simulação (Figura 55), todos os momentos magnéticos iniciais são orientados na direção negativa do eixo z (que coincide com o eixo do nanofio). Daqui em diante é usado o azul para representar a região com a configuração de magnetização inicial e o vermelho para a região onde a magnetização invertida.

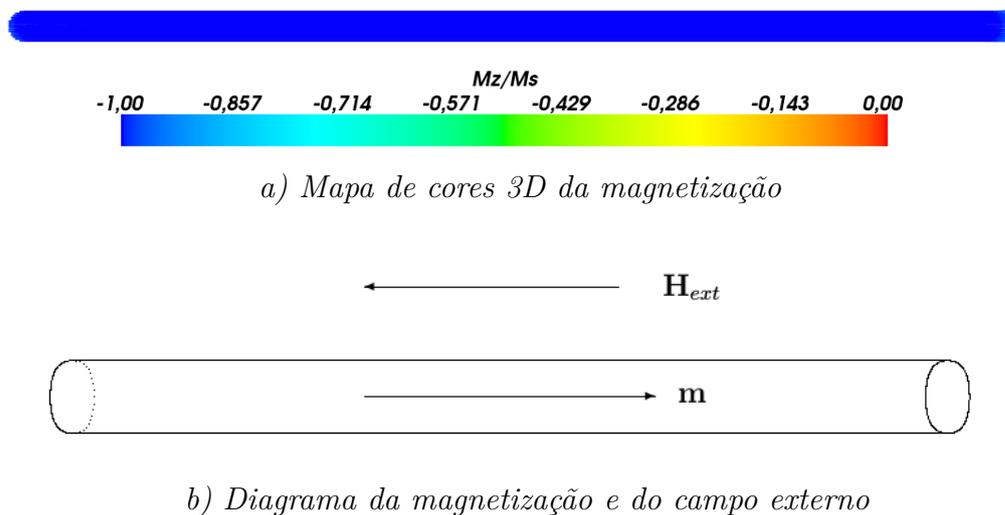


Figura 55 – A configuração inicial da magnetização não sofre modificações até $t = 15\text{ ns}$ após aplicado o campo

Quando um campo antiparalelo à direção de magnetização inicial foi aplicado na amostra, a reversão não começa imediatamente. A partir do instante $t = 15\text{ ns}$, observou-se nas extremidades do cilindro, que o campo de desmagnetização apresentou grandes inhomogeneidades sem apresentar alterações na configuração da magnetização (Figura 56). Isto foi explicado no capítulo anterior como um efeito da variação da mobilidades dos momentos de acordo com sua posição dentro na amostra.

A figura 57 apresenta a configuração da magnetização 17 ps após aplicar o campo. Nela são observadas as primeiras alterações da configuração da magnetização nas extremidades do nanofio. Pode ser observado que o processo de reversão inicia nos extremos do nanofio, onde se formam duas paredes de domínio transversais que se propagam em direção ao centro do nanofio (Figura 58).

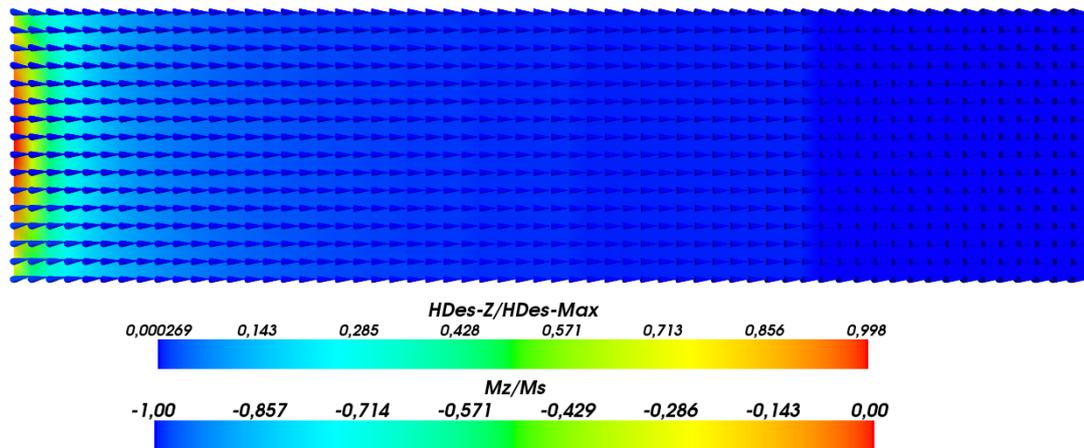
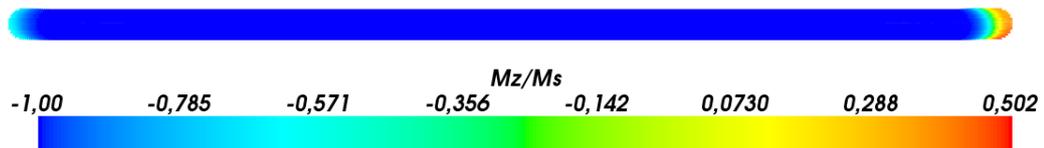
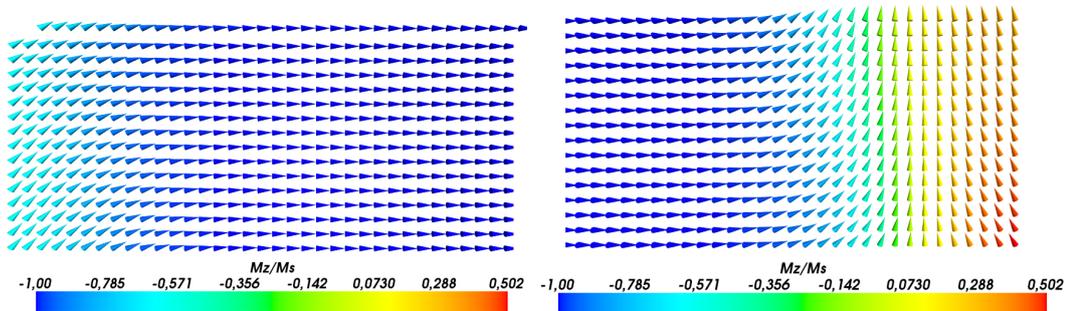


Figura 56 – Campo desmagnetizante e configuração da magnetização do nanofio cilíndrico no instante $t = 15$ ns



a) Configuração da magnetização no início do processo de reversão



b) Orientação dos momentos magnéticos no extremo esquerdo do nanofio c) Orientação dos momentos magnéticos no extremo direito do nanofio

Figura 57 – Início do processo de reversão no cilindro com 16 nm de diâmetro, $t = 17$ ns

Enquanto as paredes de domínio se propagam, os momentos da parede giram. Na figura 58 se apresentam as orientações dos momentos magnéticos dentro da parede de domínio. Eles variam suas direções uniformemente em cada instante, todas apontando na mesma direção. As paredes de domínio foram formadas nos extremos do nanofio giram em sentidos opostos, o que faz que o valor meio das componentes da magnetização oscile com amplitude, muito maior que na reversão através do modo curling (Figura 59).

Após 27 ns se formam novas paredes de domínio que aceleram o processo de reversão, e se movimentam até se encontrar e anular (Figura 60). Isto se observa claramente na

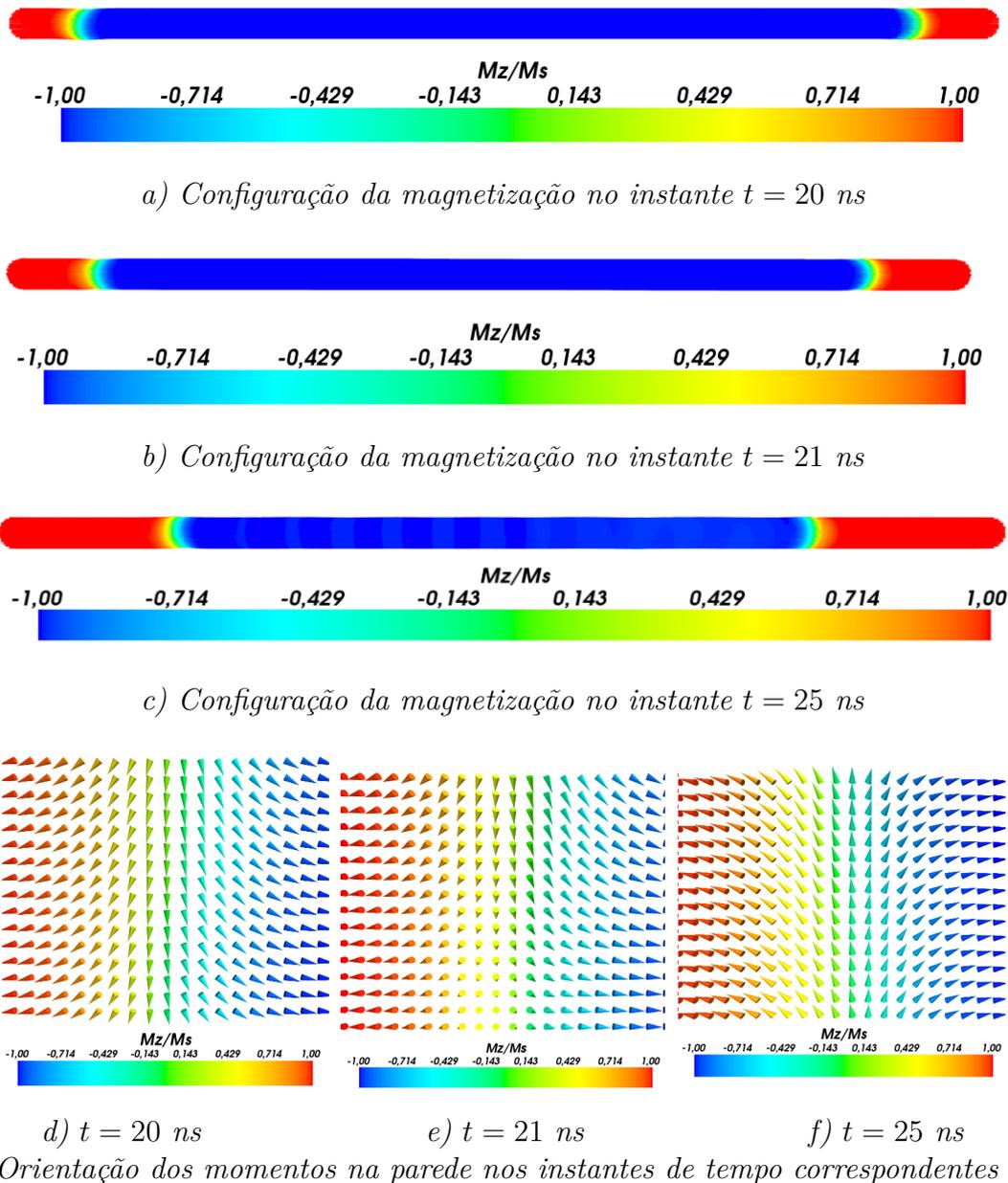


Figura 58 – Propagação da reversão da magnetização no cilindro com 16 nm de diâmetro em sua primeira fase

evolução temporal do valor médio da magnetização no eixo do nanofio. A figura 61 mostra a mudança do declive da curva de magnetização contra tempo no instante em que formam-se mais paredes de domínio.

No estudo realizado por Zhang Zhen (31) aplicando um campo de 600 mT, após se formar as paredes de domínio se trasladam até o centro do nanofio onde se anulam. Além disso ele obteve que para maiores valores do campo aplicado se formam mais paredes de domínio, durante o processo de reversão. Pelo que consideramos a formação de mais paredes de domínio como um efeito do aumento do valor do campo aplicado.

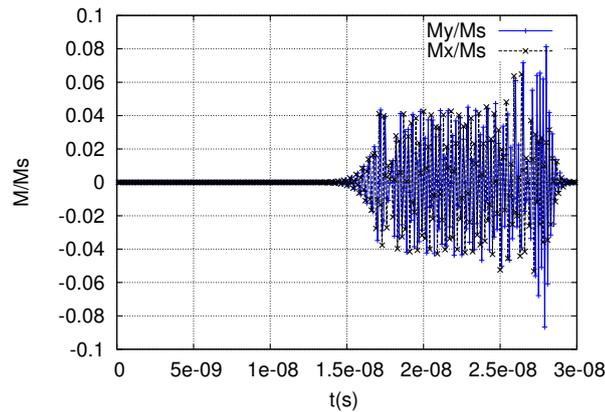


Figura 59 – Oscilação dos valores médios das componentes da magnetização durante a reversão em modo transversal

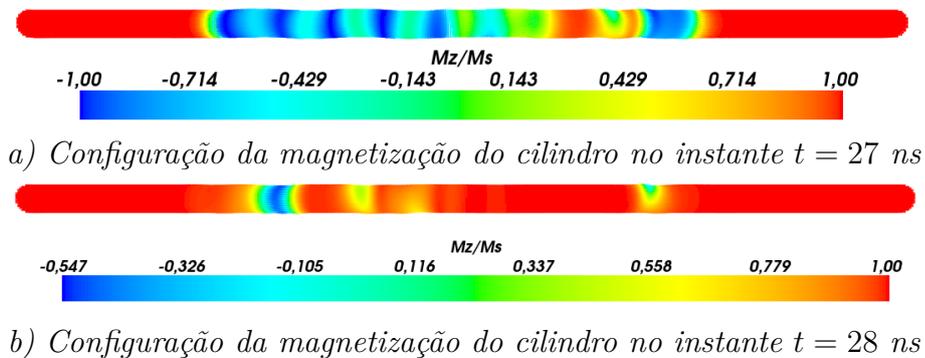


Figura 60 – Segunda fase de reversão, formação de mais paredes de domínio.

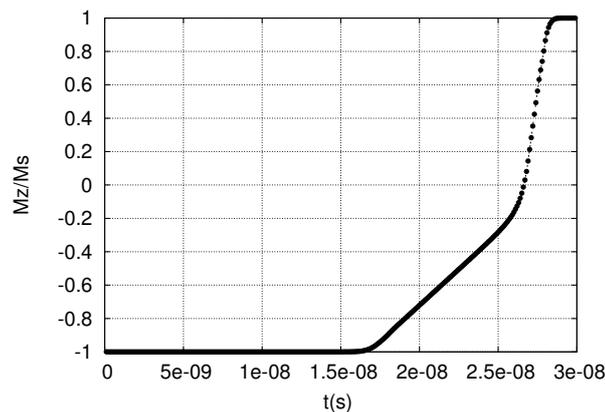


Figura 61 – Evolução temporal do valor médio da magnetização no eixo do nanofio

3.1.2 Nanofio simulado como um conjunto de elipsóides

Nas simulações do nanofio como uma sequência de elipsóides foram encontradas, duas dinâmicas de reversão da magnetização similares à dinâmica do cilindro. A diferença entre elas foi para as configurações compostas por poucos elipsóides, o processo de reversão início simultaneamente em todos os elipsóides, com a formação de mais de duas paredes de

domínio (Figura 62). Enquanto nas outras configurações a reversão inicio sequencialmente com duas paredes de domínio, para logo se formar mais paredes de domínio nos elipsóides não revertidos (Figura 63). Ao contrário do modo curling o processo de reversão não apresento dificuldades em se propagar nas extremidades dos elipsóides.

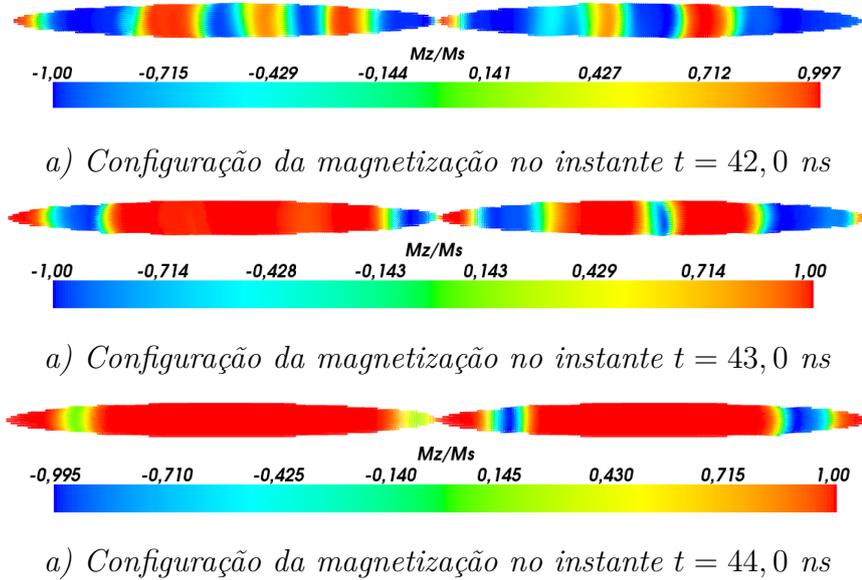


Figura 62 – Reversão da magnetização no nanofio como uma seqüência de 2 elipsóides

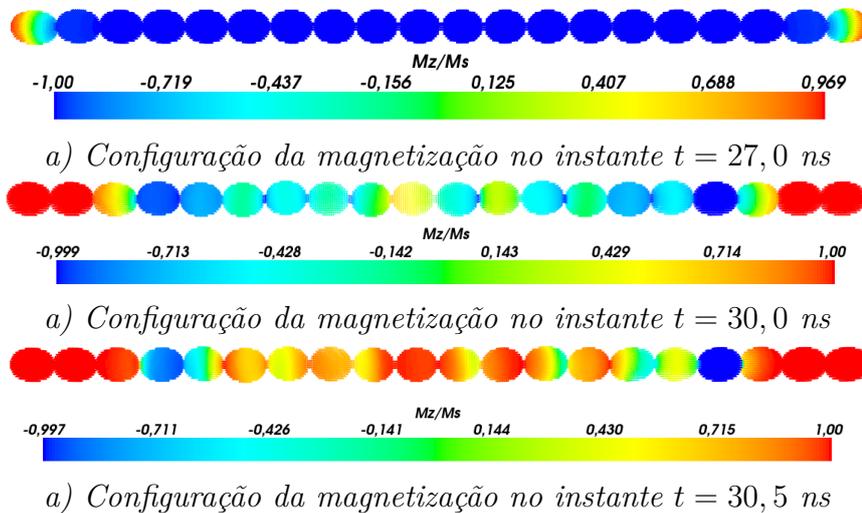


Figura 63 – Reversão da magnetização no nanofio como uma seqüência de 20 elipsóides

Segundo os resultados dos mapas vetoriais, o nanofio pode ser classificado a partir da topologia do processo de reversão da magnetização, em regimes de cadeia de poucos elipsóides e de muitos elipsóides. Quando a evolução temporal do processo de reversão foi analisada, observou-se para todas as configurações um comportamento similar de evolução temporal das energias. A Figura 47 a) mostra, que o nanofio através do processo de reversão, passa de um estado de maior energia a um estado de menor energia (curva de energia total, E_{Total}), como era esperado. Pode-se ver que a interação de Zeeman é a que

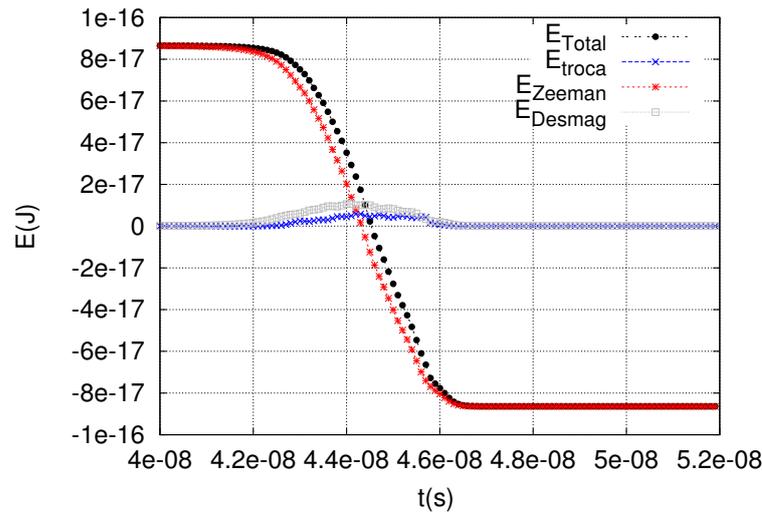


Figura 64 – Evolução temporal da energia nos nanofios em modo de reversão transversal

mais contribui para a energia total (curva E_{Zeeman}). Este comportamento é semelhante ao encontrado na mesma análise no capítulo anterior. Neste modo de reversão a contribuição da energia Zeeman a energia total é maior que no modo de reversão curling.

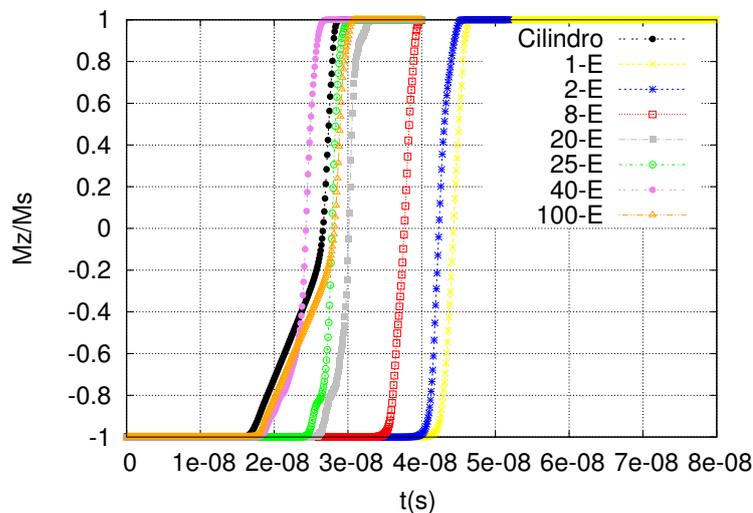


Figura 65 – Evolução temporal do valor médio da magnetização de todas as configurações simuladas para a reversão com modo transversal

Na figura 65 se apresenta a evolução temporal do valor médio da magnetização no eixo do nanofio das diferentes configurações. O tempo que leva para começar a reversão é mais de 15 ns para todas as configurações, por isso o processo de reversão neste modo demora para concluir que no modo curling. Nela se observa que o intervalo em que inicia o processo de reversão diminui com a redução das dimensões dos elipsóides que formam a sequência. Isto significa que o tratamento térmico dos nanofios, ao aumentar as dimensões dos elipsóides aumentaria o tempo necessário para completar a reversão.

3.2 Estática

Na análise estática das propriedades magnéticas foram obtidos os ciclos de histerese através da minimização da energia. Para isso foi aplicado inicialmente um campo externo na direção do eixo dos nanofios e também para direções do campo externo que desviam do eixo do nanofio a partir de 5 até 90 graus.

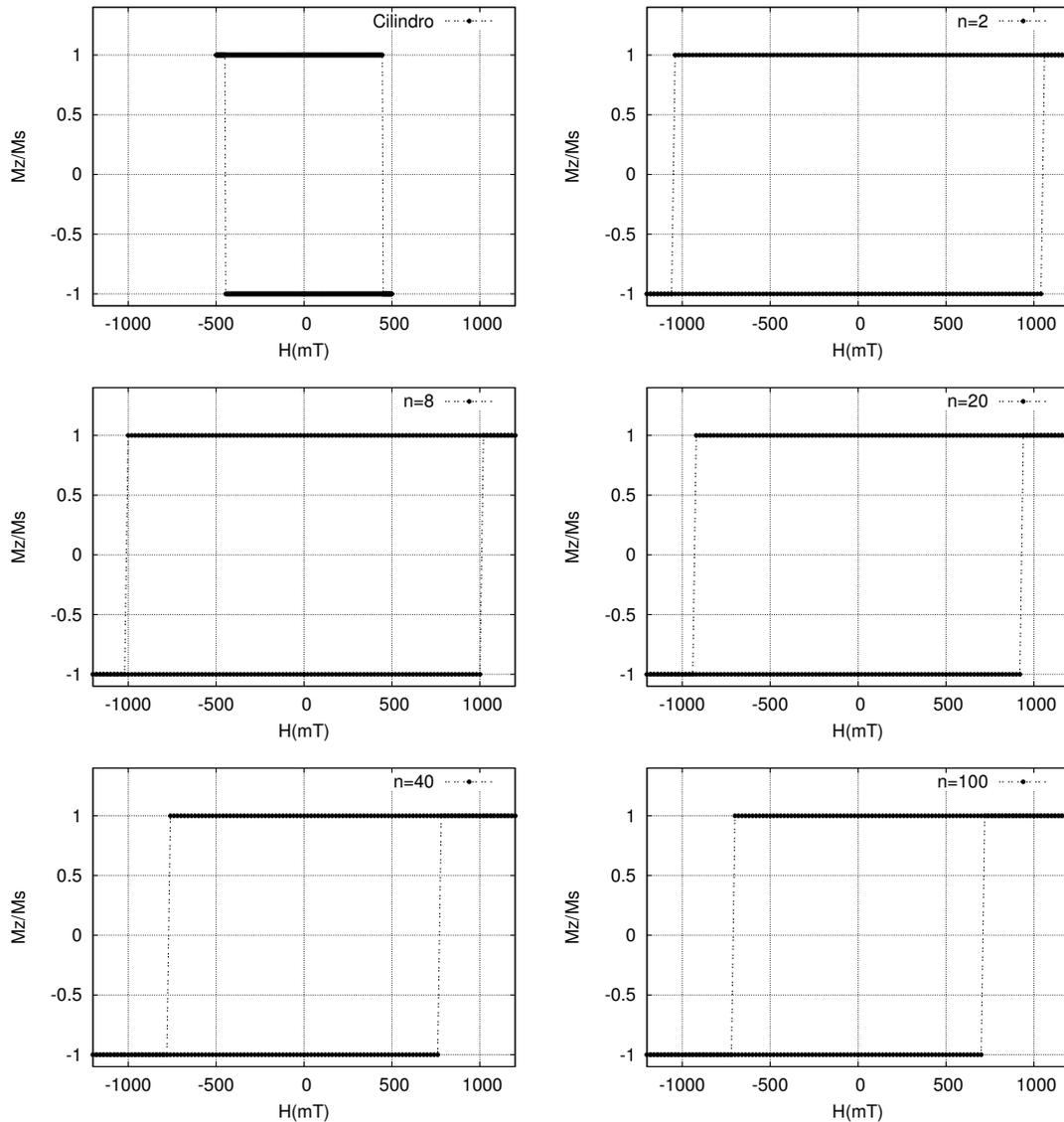


Figura 66 – Ciclos de histerese representativos das configurações simuladas com o campo aplicado no eixo do nanofio ($\theta = 0$), n é o número de elipsóides da configuração

Os valores de campo aplicado variam entre $+1500$ e -1500 mT em cada uma das direções em que foi aplicado. Neste caso, o campo é reduzido o aumentado em 5 mT entre cada estado de equilíbrio. Na figura 66 são mostrados os ciclos de histerese de configurações para as distintas dinâmicas observadas. Estes ciclos de histerese correspondem a simulações com campo aplicado na direção do eixo do nanofio. Na Figura 66 se observa que os ciclos de histerese em cada uma das configurações, tem características de um sistema

de dois estados. Isto significa que para este ângulo de aplicação do campo, coincidem os valores de campo coercitivo, campo de nucleação e campo de comutação. Estes valores se encontram num intervalo de $1520 - 450 \text{ mT}$. Onde todas as configurações apresentaram uma maior coercividade que suas homólogas no modo de reversão curling. Estos nanofios se apresentam como uma melhor alternativa que os nanofios estudados no capítulo anterior, para sua aplicação em gravação magnética.

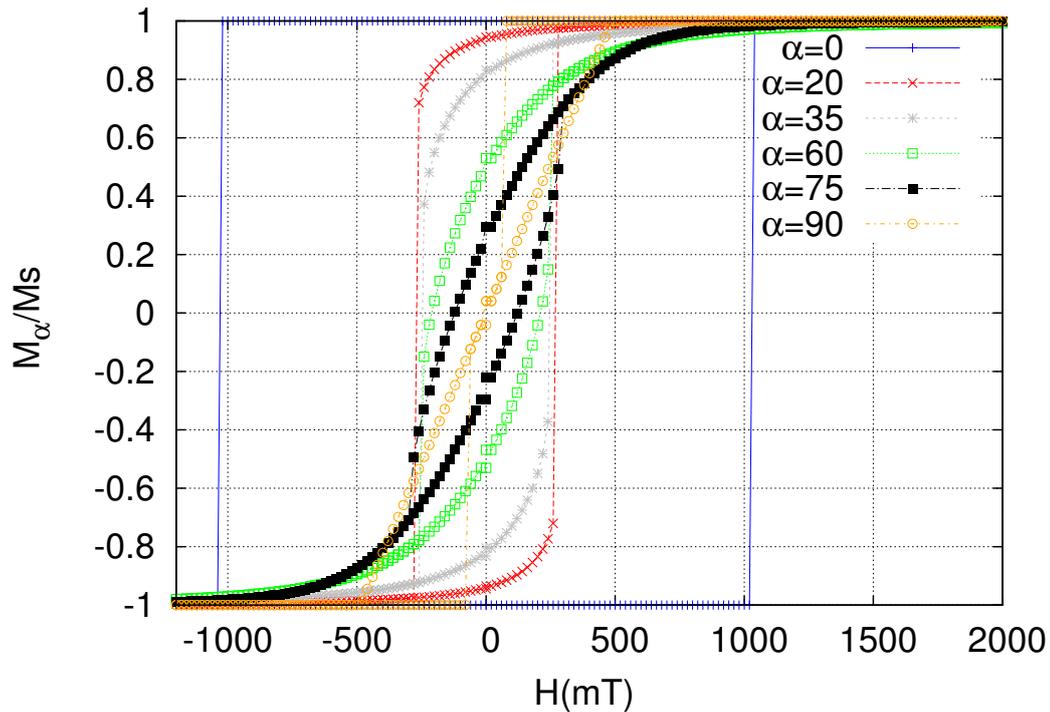


Figura 67 – Ciclos de histerese do nanafio formado por 4 elipóides para vários ângulos

As configurações onde o nanofio é simulado como uma cadeia de elipsóides, se observa uma diminuição dos valores de campo coercitivo com o aumento do número de elipsóides. Este resultado é semelhante ao do modelo de nanofios como cadeia de elipsóides Xiancong (13) e ao resultado do capítulo anterior (Figura 49), onde foi obtida a diminuição do campo coercitivo com a diminuição da relação de aspecto dos elipsóides (Figura 17). No modelo de Xiancong foi utilizado o modo de reversão coerente e no capítulo anterior a reversão acontece pelo modo curling. Isto reforça a ideia de que a diminuição do campo coercitivo é um resultado da diminuição do tamanho dos elipsóides, independentemente do modo de reversão presente na amostra.

Quando o campo foi aplicado numa direção diferente ao eixo do nanofio, os laços de histerese de todas as configurações mostraram características semelhantes. Na Figura 67 são apresentados os ciclos de histerese de diferentes ângulos para a configuração, composta por 4 elipsóides. Nessa figura observa-se que quanto mais se desviar a direção de aplicação do campo, do eixo de nanofio, o ciclo de histerese se afasta cada vez mais das características de um sistema de dois estados, até ser diagonal quando o campo é perpendicular ao eixo

do nanofio. O formato diagonal no ciclo de histerese para $\alpha = 90^\circ$ é ideal para o campo de comutação de cabeças de leitura nas aplicações de suportes magnéticos (5).

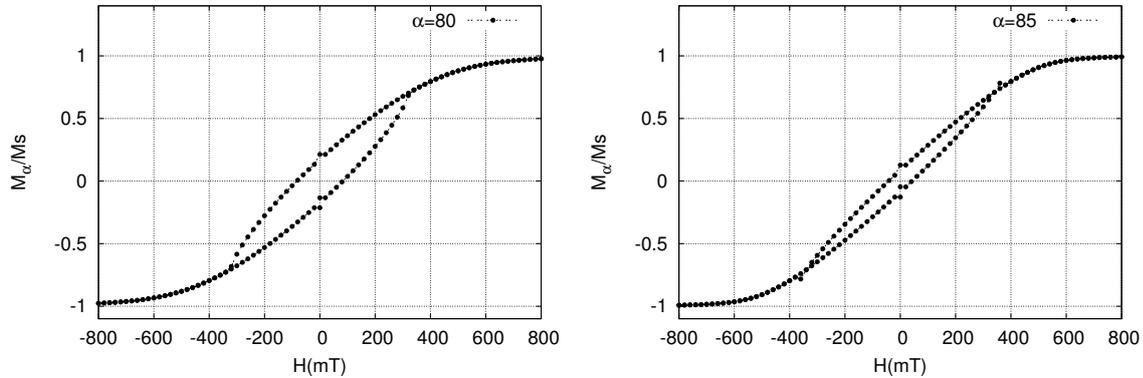


Figura 68 – Ciclos de histerese do nanofio composto por 4 elipsóides nos ângulos onde não é possível definir o campo de comutação.

À medida que o ângulo aplicação do campo desvia-se, em relação ao eixo do nanofio aumenta, os valores do campo de nucleação, do campo coercitivo e do campo de comutação, afastam-se. Para pequenos ângulos ($\alpha \leq 35^\circ$) estes continuam coincidindo os valores dos campos coercitivos e de comutação. Para os ângulos entre 80 e 90 graus não foi possível definir o valor do campo de comutação, porque não foi observada nenhuma mudança abrupta nas curvas de histerese (Figura 68). Foi possível obter a dependência angular do campo coercitivo e a magnetização remanente para ângulos entre 0° e 90° (Figuras 69 e 70). Somente foi possível obter a dependência angular do campo de comutação entre 0° e 75° . Enquanto foi obtida a dependência angular do campo coercitivo e a magnetização remanente foi obtida entre 0° e 90° .

A dependência angular da remanência se mostra na Figura 69. Nela vemos uma diminuição da remanência com o aumento do ângulo. Isto é resultado da interação dipolar, que pela forma do nanofio faz com que o nanofio seja fácil de magnetizar na direção de seu eixo e muito difícil na direção perpendicular.

Na figura 70 se mostra a dependência angular do campo coercitivo. Nela se observa que na maioria das configurações o campo coercitivo tem seu maior valor quando o campo externo é aplicado no eixo do nanofio. Isto acontece porque a magnitude decisiva na evolução da estrutura magnética é o torque exercido pelo campo efetivo $\vec{M} \times \vec{H}_{eff}$. Além disso na análise da evolução temporal das energias, se tem que a energia Zeeman é a de maior valor, pelo que contribuirá mais para o campo efetivo. Assim quando o campo é aplicado, numa direção diferente ao eixo do nanofio, o campo aplicado e a magnetização não são antiparalelos. Por isso que com um campo externo menor que o campo coercitivo do eixo do nanofio é possível produzir o torque capaz de iniciar a reversão e fazer que a magnetização seja zero na direção do campo aplicado.

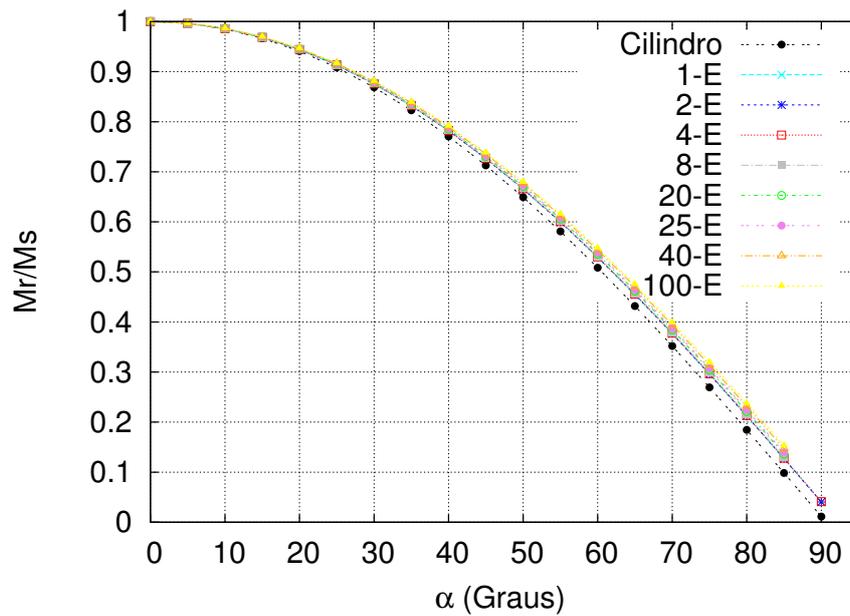


Figura 69 – Dependências angulares da magnetização remanente das configurações (a notação número-E indica o número de elipsóides da configuração)

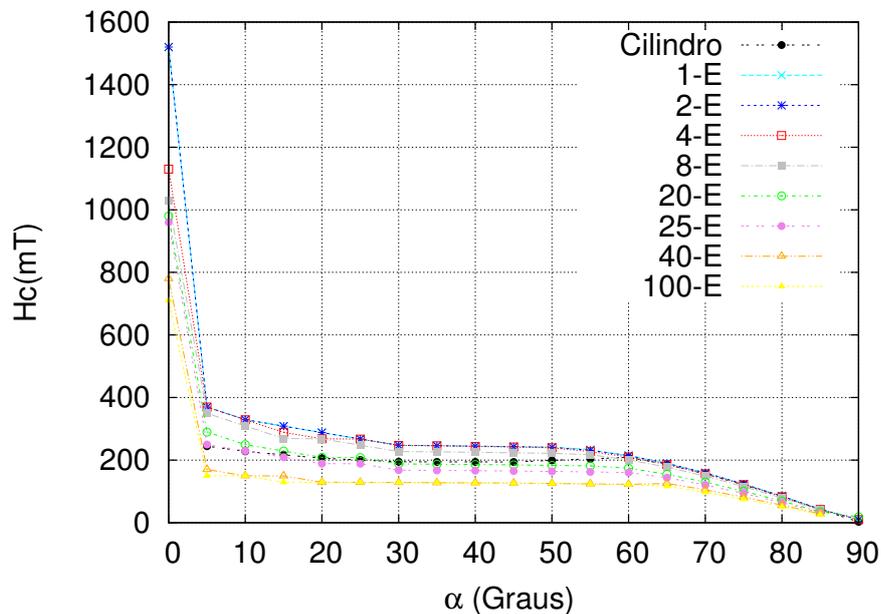


Figura 70 – Dependências angulares do campo coercitivo das configurações (a notação número-E indica o número de elipsóides da configuração).

Na medida que aumenta o número de elipsóides da configuração, a variação do campo coercitivo com o ângulo é menos pronunciada. Isto se deve à diminuição do campo coercitivo com a diminuição das dimensões dos elipsóides. Isto faz com que na configuração de 100 elipsóides não seja observada a redução abrupta do campo coercitivo para ângulos pequenos.

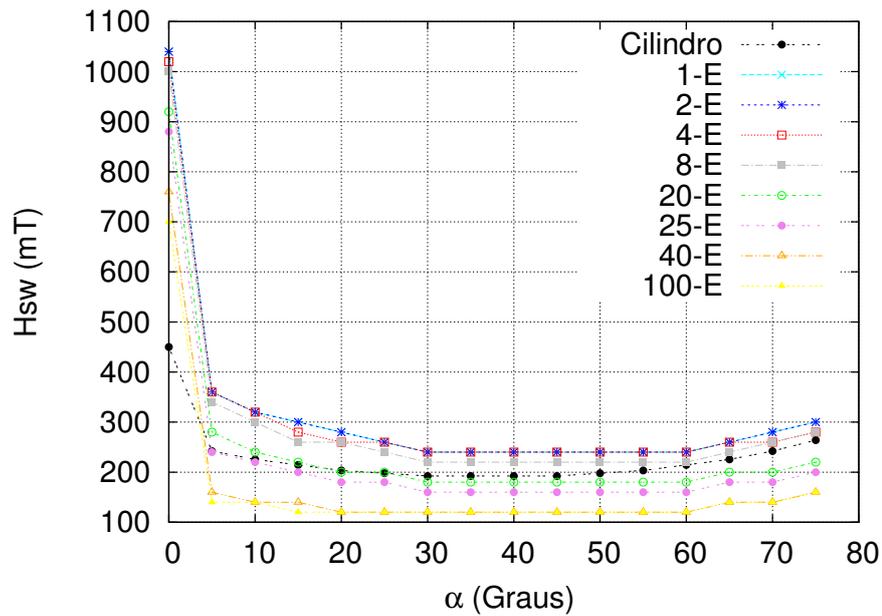


Figura 71 – Dependências angulares do campo de comutação das configurações (a notação número-E indica o número de elipsóides da configuração).

Em geral o campo coercitivo das configurações diminui de forma abrupta em 5° . Logo, nas configurações de poucos elipsóides o campo coercitivo diminui até 70° . Nas outras configurações o valor do campo coercitivo aumenta suavemente até 70° . A partir desse ângulo os valores do campo coercitivo de todas as configurações diminuem até valores perto de zero, em 90° .

A dependência angular del campo de comutação obtida neste trabalho 71, é similar com os resultados do modelo de Xiancong (Figura 17) e com os resultados obtidos experimentalmente por Wernsdorfer (Figura 15) e com os resultados do capítulo anterior. Em ângulos menores que 35° o campo de comutação e o campo coercitivo coincidem, o aumento do torque, com a variação do ângulo de aplicação do campo deve ser suficiente para explicar o salto nos gráficos 54, 15 e 17 para 0° .

4 Conclusão

Depois de nosso estudo é bom destacar os principais resultados. Por isso podemos concluir que

- A simulação micromagnética com OOMMF é ferramenta eficiente para o estudo das propriedades magnéticas de um nanofio.
- O formato da dependência angular do campo de comutação não é critério suficiente para identificar o modo de reversão que apresenta um nanofio.
- O formato da dependência angular do campo de coercitivo não é critério adequado para identificar o modo de reversão que apresenta um nanofio.
- O salto na dependência angular do campo de comutação obtido por Wernsdorfer é resultado da natureza policristalina dos nanofios, depende fortemente da rugosidade (dimensões dos grãos cristalinos) e se apresenta em qualquer modo de reversão.
- O aumento da rugosidade produz o passo de reversão simultânea nos elipsóides para reversão progressiva entre os elipsóides e a redução do campo coercitivo.
- Nos nanofios com modo de reversão transversal o aumento da rugosidade produz a diminuição do tempo necessário para completar a reversão no nanofio. Enquanto que nos nanofios com modo de reversão curling o aumento da rugosidade produz um pequeno aumento do tempo necessário para completar a reversão no nanofio.
- Para nanofios com a mesma rugosidade o tempo necessário para completar a reversão e valor do campo coercitivo é maior quando o modo de reversão é transversal.

5 Perspectivas para trabalhos futuros

Este trabalho nos deu direcionamente para novas pesquisas, entre elas:

- O estudo dos efeitos da rugosidade em conjunto de nanofios, porque nos nanofios obtidos em membranas a interação dipolar entre os nanofios tem um papel fundamental no processo de reversão da magnetização.
- O estudo dos efeitos da rugosidade em nanofios onde não são negligenciáveis os efeitos magnetocristalinos (nanofios de Co).
- Mostrou a necessidade de utilizar outro software de simulação porque enquanto o OOMMF provou ser útil, a capacidade de cálculo é muito limitada, já que pode ser utilizado apenas um computador nas simulações.

Referências

- 1 Oliveira A. B. ***Nanofabricação com microscópio de força atômica Estruturas magnéticas confinadas e transporte magnético***. 2009, 145f. Tese (Doutorado em Física)- Universidade Federal de Pernambuco. CCEN . 2009. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 22.
- 2 Kronmuller H. and Parkin S. ***Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials 1rd ed.*** New York:Wiley, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 8, 25 e 33.
- 3 Burn D. M. ***Domain wall behaviour in ferromagnetic nanowires with interfacial and geometrical structuring 2013***. 268f. Tese (Doutorado)- Durham University . 2013. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 26.
- 4 Almeida A. D. F. C. ***Spintronic Micromagnetic Simulations Using Parallel Computations 2013***. 143f. Tese (Doutorado em Física) Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Salamanca. 2013. Citado 3 vezes nas páginas 8, 33 e 36.
- 5 Boardman R. P. ***Computer simulation studies of magnetic nanostructures 2005***. 148f. Tese (Doutorado) - Faculty of Engineering, Science and Mathematics School of Engineering Sciences, University of Southampton. 2005. Citado 4 vezes nas páginas 8, 37, 72 e 86.
- 6 Maas M. G. ***Template-electrodeposited nanowires: synthesis, manipulation and application. 2010***. 108f. Tese (Doutorado)- Thesis University of Twente, Enschede, The Netherlands. 2010. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 39.
- 7 Carignan L., Yelon A., Menard D., and Caloz C. **Ferromagnetic Nanowire Metamaterials: Theory and Applications** . *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on*, 59(10):2568–2586, Oct 2011. Citado 3 vezes nas páginas 8, 40 e 42.
- 8 WuXia L., Jun Z., TieHan S., Grenville A. O., and Philip J. G. **Magnetic nanowires fabricated by anodic aluminum oxide template - a brief review**. *Physics, Mechanics and Astronomy*, 5(7):1181–1189, jul 2011. Citado 4 vezes nas páginas 8, 17, 18 e 40.
- 9 Molaes M. E. T. **Characterization and properties of microwires and nanowires of controlled size, composition, and geometry fabricated by electrodeposition and ion-track technology** . *Beilstein Journal of Nanotechnology*, (3):860–883., Dec 2012. Citado 3 vezes nas páginas 8, 39 e 41.
- 10 Pitzschel E. K. M. ***Magnetic nanowires and nanotubes with modulated diameters 2012***. 137f. Tese (Doutorado) - Universitat Hamburg. 2012. Citado 3 vezes nas páginas 8, 43 e 47.
- 11 Aharoni A. and Shtrikman S. **Magnetization Curve of the Infinite Cylinder**. *Phys. Rev*, 109(5):1522, mar 1958. Citado 3 vezes nas páginas 8, 43 e 44.
- 12 Wernsdorfer W., Doudin B., Mailly D., Hasselbach K., Benoit A., Meier J., Ansermet J.P., and Barbara B. **Nucleation of Magnetization Reversal in Individual**

- Nanosized Nickel Wires.** *Phys. Rev. Lett.*, 77(9):1873–, agost 1996. Citado 5 vezes nas páginas 8, 18, 19, 45 e 46.
- 13 Lu X., Ge S., Jiang L., and Wang X. **Chain of ellipsoids approach to the magnetic nanowire.** *Journal of Applied Physics*, 97(8):084304–084304–7, 2005. Citado 8 vezes nas páginas 8, 18, 19, 45, 46, 47, 72 e 85.
- 14 Fert A. **Nobel Lecture: Origin, development, and future of spintronics.** . *Reviews of Modern Physics*, 80(446):1517–, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 38.
- 15 Casanova F., Chiang C. E., Chang-Peng L., I. V. Ruminiski A. M. Sailor M. J. Roshchin, Schuller I. K., Ruminiski A. M., Sailor. M. J., and Schuller I. **Gas adsorption and capillary condensation in nanoporous alumina films** *Nanotechnology*, 19(31), jun 2008. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 38.
- 16 Yang P., Yan R., and Fardy M. **Semiconductor Nanowire: What's Next?** *Nano Letters*, 10(5):1529–1536, abr 2010. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 38.
- 17 Darques M., Spiegel J., Medina J.T., Huynen I., and Piroux L. **Ferromagnetic NW-loaded membranes for microwave electronics.** *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 321(14):2055–2065, jul 2009. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 38.
- 18 Vázquez M., M. Hernandez-Velez, Pirota K., Asenjo A., Navas D., Velazquez J., and Vargas P. **Arrays of Ni nanowires in alumina membranes: magnetic properties and spatial ordering.** *The European Physical Journal B*, 40(4):489–497, agost 2004. Citado na página 17.
- 19 Lin S.W., Chang S.C., Liu R.S., Hu S.F., and Jan N.T. **Fabrication and magnetic properties of nickel nanowires.** *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 282:28–31, nov 2004. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 38.
- 20 Aharoni A. **Introduction to the Theory of Ferromagnetism 1rd ed.** Oxford University Press, 1996. Citado 7 vezes nas páginas 18, 42, 43, 44, 49, 50 e 77.
- 21 Brown W. Jr. F. **Rigorous Calculation of the Nucleation Field in a Ferromagnetic Film or Plate.** *Physical Review*, 124(5):1348, Dec 1961. Citado na página 18.
- 22 Henry Y., Iovan A., George J. M., and Piroux L. **Statistical analysis of the magnetization processes in arrays of electrodeposited ferromagnetic nanowires.** *Phys. Rev.*, 66(18):184430–, nov 2002. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 44.
- 23 Zhan Q., Chen Z., Xue D, Li F., Kunkel H., Zhou X., Roshko R., and Williams G. **Structure and magnetic properties of Fe-Co nanowires in self-assembled arrays.** *Phys. Rev.*, 66(13):134436 –, Oct 2002. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 45.
- 24 Jacobs I. S. and Bean C. P. **An Approach to Elongated Fine-Particle Magnets** *Phys. Rev*, 100(4):1060 –, nov 1955. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 45.
- 25 Richter H. J., Hempel K. A., and Pietsch R. **Magnetization Processes of an Agglomerate of Two Spheres with Nonvanishing Magnetocrystalline Anisotropy .** *Japanese Journal of Applied Physics*, 26(6):L1070, 1987. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 45.

- 26 Richter H.J. and Hempel K.A. **Extension of the chain of spheres model**. *IEEE Transactions on Magnetism*, 24(2):1826 – 1828, Dec 1988. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 45.
- 27 Silva J.Jr H. **O modo coerente da reversão da magnetização de arranjos de nanofios metálicos** 2014. 131f. *Dissertação (Mestrado em Física)- Universidade Federal de Pernambuco. CCEN*. 2014. Citado 3 vezes nas páginas 18, 45 e 72.
- 28 Han G. C., Zong B. Y., Luo P., and Wu Y. H. **Angular dependence of the coercivity and remanence of ferromagnetic nanowire arrays**. *Journal of Applied Physics*, 9(11):9202–, may 2003. Citado 3 vezes nas páginas 19, 33 e 44.
- 29 Hertel R. **Computational micromagnetism of magnetization processes in nickel nanowires**. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 249(1-2):251–256, agost 2002. Citado 6 vezes nas páginas 19, 20, 48, 49, 50 e 55.
- 30 Sánchez F. G. **Modeling of field and thermal magnetization reversal in nanostructured magnetic materials** 2007. 170f. *Tese (Doutorado) -Universidad Autónoma de Madrid.Dpto de Física Teórica de la Materia Condensada*. 2007. Citado na página 19.
- 31 Zhen Z. **Magnetization Reversal in Soft Magnetic Nanowires** 2009. 76f. *Dissertação (Mestrado) -Hong Kong University of Science and Technology*. 2009. Citado 3 vezes nas páginas 20, 77 e 80.
- 32 Bertotti G. **Hysteresis in magnetism** 1 ed. Academic Press, 1998. Citado na página 22.
- 33 Cullity B.D. and Graham C. D. **Introduction to magnetic materials** 2 ed. John Wiley & Sons, 2009. Citado na página 22.
- 34 Getzlaff M. **Fundamentals of Magnetism**. Springer, 2008. Citado na página 24.
- 35 Landau L. and Lifshits E. **On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies**. *Phys. Zeitsch*, 8:153–169, 1935. Citado na página 32.
- 36 Gilbert T.L. **A Lagrangian formulation of the gyromagnetic equation of the magnetization field**. *Phys. Rev.*, 100:1243, 1955. Citado na página 32.
- 37 Gunther A., Monz S., Tschöpe A., Birringer R., and Michels A. **Angular dependence of coercivity and remanence of Ni nanowire arrays and its relevance to magnetoviscosity**. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 320(7):1340–1344, 2008. Citado na página 33.
- 38 Laroze D., Vargas P., Altbir D., and Vázquez M. **Box Model for Hysteresis Loops of Arrays of Ni Nanowires**. *Brazilian Journal of Physics*, 36(3B):908–909, 2006. Citado na página 33.
- 39 Fischbacher T., Franchin M., Bordignon G., and Fangohr H. **A Systematic Approach to Multiphysics Extensions of Finite-Element-Based Micromagnetic Simulations: Nmag**. *IEEE Transaction on Magnetism*, 43(6):2896–2898, jun 2007. Citado na página 34.

- 40 Scheinfein M. R. **LLG - Micromagnetics Simulator** Disponível em: <http://llgmicro.home.mindspring.com/> Acesso em: julho 2015, July 2008. Citado na página 34.
- 41 Scholz W. **Magpar - Parallel Finite Element Micromagnetics Package** Disponível em: <http://www.cwscholz.net/Main/MagparProject> Acesso em: julho 2015, January 2009. Citado na página 34.
- 42 Donahue M. J. and Porter D. G. **Object Micromagnetic Framework, OOMMF User's Guide** Disponível em: http://math.nist.gov/oommf/doc/progman12a5/progman12a5_20120928.pdf Acesso em: julho 2015. Citado na página 35.
- 43 **Tcl Developer Exchange** Disponível em: <http://www.tcl.tk/> Acesso em: julho 2015. Citado na página 35.
- 44 Ousterhout J. K. and Jones K. **Tcl and the Tk Toolkit**. Addison-wesley professional edition, 2009. Citado na página 35.
- 45 Auperle M. **Die Kunst der Programmierung mit C++: Exakte Grundlagen für die Professionelle Softwareentwicklung** 2 ed. Vieweg & Sohn, 2002. Citado na página 35.
- 46 Stockham T. G. **High speed convolution and correlation**. *Joint Computer Conference Proceedings*, 28:2298211;233, 1966. Citado na página 36.
- 47 Donahue M. J. and McMichael R. D. **Micromagnetics on Curved Geometries Using Rectangular Cells: Error Correction and Analysis**. *IEEE Transactions on magnetics*, 43(6):2878–2880, jun 2007. Citado na página 36.
- 48 **Micromagnetic Modeling Activity Group, NIST** Disponível em: <http://www.ctcms.nist.gov/rdm/mumag.org.html> Acesso em: julho 2015, July 2008. Citado na página 36.
- 49 McMichael R. D., Donahue M. J., Porter D. G., and Eicke J. **Comparison of magnetostatic field calculation methods on 2- D square grids as applied to a micromagnetic standard problem**. *J. Appl. Phys*, 85:5816–5818, abr 1999. Citado na página 37.
- 50 Fangohr H., Fischbacher T., Franchin M., Bordignon G., Generowicz J., Knittel A., Walter M., and Albert M. **NMAG User Manual Documentation** 2 ed. Disponível em: <http://nmag.soton.ac.uk/nmag/current/manual/manual.pdf> Acesso em: julho 2015. Citado na página 38.
- 51 Ferain E. and Legras R. **Templates for engineered nano-objects for use in microwave, electronic devices and biomedical sensing application**. *Nuclear Instruments and Methods Physics Research B*, 267(6):1028–1031, mar 2009. Citado na página 38.
- 52 Fert A. and Piraux L. **Magnetic nanowires**. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 200(1-3):338–358, Oct 1999. Citado na página 38.
- 53 Martin C. R. **Nanomaterials: A Membrane-Based Synthetic Approach**. *Science*, 266(5193):1961–1966, Dec 1994. Citado na página 38.

- 54 Shingubara S. **Fabrication of nanomaterials using porous alumina templates**. *Journal of Nanoparticle Research*, 5(1):17–30, abr 2003. Citado na página 39.
- 55 Masuda H. and Fukuda K. **Ordered Metal Nanohole Arrays Made by a Two-Step Replication of Honeycomb Structures of Anodic Alumina**. *Science*, 268(5216):1466–1468, jun 1995. Citado na página 39.
- 56 Ye B. ***Fabrication and magnetic property investigation of metallic nanowire arrays*** 2006. 53f. *Dissertação (Mestrado) - University of New Orleans, Department of Chemistry*. 2006. Citado na página 40.
- 57 Brown W. Jr F. **Criterion for Uniform Micromagnetization**. *Phys. Rev.*, 105(5):1479–, mar 1957. Citado na página 42.
- 58 J. E. P.Loaiza. ***Correlación entre las propiedades magnéticas y los parámetros morfológicos y estructurales de nanopartículas de $Mn_{0.5}Zn_{0.5}FeO$*** 2010. 92f. *Dissertação (Mestrado) - Universidad del Valle*. 2010. Citado na página 42.
- 59 Frei E. H., Shtrikman S., and Treves D. **Critical Size and Nucleation Field of Ideal Ferromagnetic Particles**. *Phys. Rev*, 106(3):443–, may 1957. Citado na página 43.
- 60 Stoner E. C. and Wohlfarth E. P. **A Mechanism of Magnetic Hysteresis in Heterogeneous Alloys**. *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond.*, 240(826):599–642, may 1948. Citado na página 49.
- 61 Forster H., Schrefl T., Scholz W., Suess D., V.Tsiantos, and Fidler J. **Micromagnetic simulation of domain wall motion in magnetic nano-wires**. *J. Magn. Magn. Mater.*, 249(1-2):181–186, ago 2002. Citado na página 49.
- 62 Ebels U., Dubail J. L., Wigen P. E., Piraux L., Buda L. D., and Ounadjela K. **Ferromagnetic resonance studies of Ni nanowire arrays**. *Phys. Rev B*, 64(14):44421 –, set 2001. Citado na página 50.
- 63 Lederman M., O’Barr R., and Schultz S. **Experimental Study of Individual Ferromagnetic Sub-micron Cylinders**. *IEEE Transactions on magnetics*, 31(6):3793–3795, ago 1995. Citado na página 77.
- 64 Pignard S., Goglio G., Radulescu A., Piraux L., Dubois S., Declé A., and Duvail J. L. **Study of the magnetization reversal in individual nickel nanowires**. *Journal of Applied Physics*, 87(2):824–829, jan 2000. Citado na página 77.