



Universidade Federal de Pernambuco
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação em Ciência de Materiais

Simulação micromagnética de arranjos hexagonais de nanocascas de Ni e Co

Dissertação de Mestrado

Yuset Guerra Dávila

Recife

2015

Yuset Guerra Dávila

**Simulação micromagnética de arranjos hexagonais de
nanocascas de Ni e Co**

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-graduação em Ciência de Materiais do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Ciência de Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Eduardo Padrón Hernández

Recife

2015

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

G934s Guerra Dávila, Yuset.
Simulação micromagnética de arranjos hexagonais de nanocascas de Ni e Co / Yuset Guerra Dávila. – Recife: O Autor, 2015.
129 f.: fig., tab.

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

1. Matéria condensada. 2. Magnetismo. I. Padrón Hernández, Eduardo (Orientador). II. Título.

530.41 CDD (22. ed.) UFPE-FQ 2015-21

YUSET GUERRA DÁVILA
SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA DE ARRANJOS HEXAGONAIS DE
NANOCASCAS DE NI E CO

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

Aprovada em: 30/09/2015.

BANCA EXAMINADORA

Prof^o. Eduardo Padrón Hernández (Orientador)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof^o Lincoln Rodrigues Sampaio de Araújo (Examinador Externo)
Universidade Federal de Campina Grande

Prof^o. Yurimiler Leyét Ruiz (Examinador Externo)
Universidade Federal do Amazonas

Este trabalho é dedicado à minha mãe, que sempre me espera lá em Cuba.

Agradecimentos

Os agradecimentos principais são direcionados a meu orientador Eduardo Padrón pela ajuda e oportunidade de ser parte do grupo de pesquisa. A meus amigos Raudel e Ariel pela ajuda incondicional. A Lídice pela solidariedade. A Jesus, Ammis, Josue e Pedro pela amizade constante. A meus amigos Frank e Lena que fizeram tudo pra eu estar hoje aqui, ao igual que Evert, a Ivet e Laritza pela amizade. A Henry, Varona e Pedro Antonio que me apoiaram quando precisei. A os novos amigos do laboratório, onde fico “como em casa”, Fredy, Paola, Bruno, Claudio, Jandrews, Renata, Von... E tantos outros esquecidos...

Agradecimentos para os membros do projeto *abnT_EX*¹, uma suíte para L^AT_EX que atende os requisitos das normas da ABNT, que foi utilizado para fazer o documento.

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

¹ <<http://www.abntex.net.br/>>

² <<http://math.nist.gov/oommf/>>

*“Soy enemigo de mí y soy amigo
de lo que he soñado que soy”
(Silvio Rodríguez, Detalle de mujer con sombrero)*

*“Sou inimigo de mim e sou amigo
do que sonhei que sou”
(Silvio Rodríguez, Detalhe de mulher com chapéu)*

Resumo

Neste trabalho foram estudados os efeitos da espessura em arranjos hexagonais de 100 nanocascas de Níquel (Ni) e Cobalto (Co). O estudo foi feito por simulação micromagnética utilizando *Object Oriented Micro Magnetism Framework (OOMMF)* baseado no método de diferenças finitas (MDF). As nanocascas têm um raio exterior fixo $R_e = 20\text{nm}$ e a espessura $R_e - R_i$ foi variada de acordo com a razão $\varepsilon = R_i/R_e$ onde R_i é raio interior, com $0 \leq \varepsilon \leq 0.8$. Para simular os ciclos de histerese e a reversão da magnetização assumimos que as cascas estão unidas. Além disso, se considerou ligação por interação de troca e contribuição magnetocristalina. No caso do Ni esta contribuição é cúbica com direções de anisotropia ao longo do eixo X, Y e Z e uniaxial no caso do Co com a direção fácil ao longo do eixo Z. Também incluímos interação *Zeeman* ao incidir um campo magnético externo e a contribuição magnetostática (desmagnetização). Não se consideram efeitos térmicos nas simulações. Para o Ni, os ciclos de histereses obtidos com o campo aplicado paralelo ao plano, mostraram que com a diminuição da espessura da casca o campo coercitivo diminui. Os valores da coercividade obtidos ($61.9 - 230.8\text{Oe}$) são maiores que os reportados para o Ni *bulk* (0.7Oe) e para cascas de Ni de tamanho sub-micrométrico (32.3Oe). Por outro lado verificamos que se encontram no intervalo dos valores reportados para pós de esferas ocas de Ni (102Oe) e também para arranjos de esferas ocas de tamanho nanométrico (104Oe). O aumento da coercividade para o arranjo de esferas ocas pode ser associado à sua estrutura. Assim, a resposta magnética deve ser dominada pela anisotropia de forma. Isto foi comprovado pela elevada remanência reduzida obtida (0.8), que é característico de uma direção de fácil magnetização. Para o Co os ciclos de histerese são abertos na região de baixos campos ($< 2500\text{Oe}$), o que foi reportado para cadeias de esferas ocas mesoscópicas. A magnetização remanente encontra-se no intervalo de $0.01 - 0.4$ dependendo da espessura da casca. O valor de 0.04 , incluído neste intervalo, foi reportado para nanofios de Co e Fe medidos com o campo aplicado perpendicular ao eixo do fio. Isto poderia ser um sinal de que em nossos arranjos o eixo efetivo de fácil magnetização é perpendicular ao plano do arranjo naquela amostra que tem o referido valor. O campo coercitivo tem valores entre 50 e 700Oe , que é muito maior em relação ao valor para amostras *bulk*, 10Oe . Este aumento é atribuído ao efeito da superfície ou anisotropia de forma. Também maior do que 40Oe reportado por outros autores em esferas ocas de 500nm de diâmetro e 40nm de espessura da casca. De acordo com os resultados obtidos é possível observar, durante a inversão dos momentos, a formação de vórtices bem organizados em arranjos de Co. O estudo da dinâmica feito neste trabalho, mostrou que a reversão dos momentos não é homogênea e começa nas bordas do arranjo. A relaxação em todos os sistemas aqui estudados é fortemente influenciada pelo valor de ε e quanto menor é a espessura da casca maior é o tempo de relaxação. O fator principal nas propriedades estáticas e dinâmicas de cascas nanométricas é justo sua espessura.

Palavras-chave: Nanocascas. Simulação Micromagnética. OOMMF.

Abstract

In this work we studied the effects of thickness of hollow structures in hexagonal array. Nanosized Nickel (Ni) and Cobalt (Co) hollow-spheres arrays were studied by micromagnetic simulation using object oriented micromagnetic framework (OOMMF) based in the finite difference method (FDM). The hollow spheres have a fixed external radius, $R_e = 20\text{nm}$ and the thickness of the spheroidal shell $R_e - R_i$ were systematically changed. The variation was according to the ratio $\varepsilon = R_i/R_e$ with $0 \leq \varepsilon \leq 0.8$. We assume that the spheres are connected. In addition we considered exchange interaction and magnetocrystalline contribution. In the case of Ni this contribution is cubic with directions along the X axis, Y and Z, in the case of Co, uniaxial with easy direction along the axis Z and interaction Zeeman. For the nickel, the hysteresis cycles obtained with the applied field parallel to the array shows that decreasing thickness of the shell the coercive field decreases. Compared with the coercive field (H_c) value of bulk Ni (0.7Oe) and that of hollow Ni submicrometer-sized spheres (32.3Oe), the hollow Ni nano-sized exhibit much enhanced coercivity ($61.9 - 230.8\text{Oe}$). Furthermore verified that are in the range of values reported for powder Ni hollow spheres (102Oe) and also to arrays of hollow spheres of nanometric size (104Oe). The increase of coercivity for the array of hollow spheres may be attributed to their special nanostructure. Thus the magnetic response is dominated by the shape anisotropy and consequently it translates into high remanence ($M_r/M_S = 0.8$). For the Co hysteresis loops are open in the low field region ($< 2500\text{Oe}$), which has been reported to chains mesoscopic hollow spheres. The remanent magnetization is in the range of $0.01 - 0.4$ depending on the thickness of the shell. The value of 0.04 in this range, has been reported in Co and Fe nanowires measured with the applied field perpendicular to the wire axis. This could be a sign that in our arrangements the effective easy axis of magnetization is perpendicular to the plane of arrangement that sample having this value. The coercive field has values between 50 and 700Oe , which is higher compared to the value for bulk samples, 10Oe . This increase is attributed to the effect of surface or shape anisotropy. Also higher than 40Oe reported by other authors in hollow spheres of 500nm diameter and 40nm thick bark. According to the results, it can estimate the coherent mode is the main solution of the reversion of the magnetization. However you can see, during inversion of moments, the vortex formation well organized in cobalt arrangements. The study on the dynamics done in this work showed that the reversal of the moments is not homogeneous and starts at the edges of the arrangement. The relaxation of all the systems studied here, it is strongly influenced by the value of ε , and the smaller the thickness of the shell is greater relaxation time. The main factor in the static and dynamic properties of nanoscale shells is just its thickness.

Keywords: Hollow-spheres. Micromagnetic Simulation. OOMMF.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Representação esquemática das possíveis configurações de magnetização em nanocascas esféricas ferromagnéticas: a) Coerente. b) <i>Curling</i>	23
Figura 2 – Diagrama do estado <i>Onion</i>	23
Figura 3 – a) Escala micromagnética. b) A magnetização $\vec{M}(r)$, é uma função vetorial contínua da posição no interior do material, e seu módulo, chamado de magnetização espontânea M_s , permanece constante em cada ponto do material. c) Representação na escala atômica dos momentos magnéticos individuais $\vec{\mu}_i$, e o vetor magnetização \vec{M} como a soma de todos os momentos magnéticos $\vec{\mu}_i$ dentro do volume dV	26
Figura 4 – Dinâmica da magnetização \vec{M} em presença de um campo magnético \vec{H}_{eff} . a) Sem dissipação $\alpha = 0$, a magnetização gira ao redor do campo com frequência $-\gamma_0 \vec{H}_{eff}$. b) Com amortiguamento $\alpha > 0$, depois de um intervalo de tempo a magnetização precessiona até que se alinha com o campo, devido ao termo dissipativo $\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt}$	29
Figura 5 – Representação da interação de troca entre primeiros vizinhos. No modelo micromagnético, cada elemento de volume de magnetização \vec{M} está a uma distancia Δx dos primeiros vizinhos onde \vec{r}_{ij} é o vetor posição que os liga.	31
Figura 6 – Densidade de energia para cristal uniaxial. A) eixo fácil ($K > 0$). B) Plano fácil ($K < 0$)	33
Figura 7 – Densidade de energia cúbica. A) Os eixos de coordenadas são direções fácies ($K_1 > 0$). B) Os eixos de coordenadas são direções fácies ($K_1 < 0$).	34
Figura 8 – Geometria correspondente com a equação 2.36.	35
Figura 9 – Celas irregulares na fronteira da amostra quando é usada uma discretização uniforme.	38
Figura 10 – Aproximação tipo escada: as células irregulares na fronteira foram substituídos por retângulos	38
Figura 11 – Representação da discretização da amostra magnética numa malha de células individuais de volume $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$. Cada célula está magnetizada de maneira uniforme com magnetização igual a $\vec{M}(i, j, k) = M_s \vec{m}(i, j, k)$	39
Figura 12 – Comparação do número de operações necessárias em uma amostra com um malhado de 50 células. Por substituição direta de \vec{H}_{dmg} com N^2 operações, utilizando a FFT com $N \log_2 N$ operações e os termos locais de \vec{H}_{eff} , com N operações.	45
Figura 13 – Lançador (<i>Launcher</i>) da Interface gráfica do usuário (GUI) do OOMMF.	49

Figura 14 – Fragmento do código micromagnético da simulação estática de um arranjo hexagonal de 100 nanocascas magnéticas de Ni. Mostram-se o <i>Atlas</i> , <i>Malhado</i> e os <i>termos de Energia</i> envolvidos.	52
Figura 15 – Fragmento do código micromagnético da simulação estática de um arranjo hexagonal de 100 nanocascas magnéticas de Ni. Particularmente mostram-se a forma de definir o <i>Evolver</i> e o <i>Driver</i> de minimização, além dos parâmetros da simulação como a magnetização de saturação M_s e a magnetização inicial \vec{m}_0	53
Figura 16 – Arranjo hexagonal de 100 nanocascas magnéticas.	55
Figura 17 – Arranjo hexagonal de 100 nanocascas magnéticas, depois de gerado o malhado pelo MDF.	55
Figura 18 – Geometria de uma nanocasca magnética, mostrando os raios interno e externo.	56
Figura 19 – Efeito do tamanho da malha na geometria da casca esférica. a) Malha de 2nm , b) Malha de 4nm , c) Malha de 8nm	56
Figura 20 – Esquema do campo magnético aplicado atuando paralelo ao eixo X.	57
Figura 21 – Esquema do campo magnético aplicado no plano XZ formando um ângulo θ com o eixo X.	58
Figura 22 – Ciclos de histerese simulados para diferentes valores da espessura, ϵ	59
Figura 23 – Coercividade em função da espessura da casca, ϵ	60
Figura 24 – Remanência em função da espessura da casca, ϵ	60
Figura 25 – Ciclos de histerese simulados para a espessura $\epsilon = 0.3$ variando o ângulo de aplicação do campo	62
Figura 26 – Coercividade em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.3$	63
Figura 27 – Remanência em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.3$	63
Figura 28 – Ciclos de histerese simulados para a espessura $\epsilon = 0.5$ variando o ângulo de aplicação do campo	64
Figura 29 – Coercividade em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.5$	65
Figura 30 – Remanência em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.5$	65
Figura 31 – Ciclos de histerese simulados para a espessura $\epsilon = 0.7$ variando o ângulo de aplicação do campo	66
Figura 32 – Coercividade em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.7$	67
Figura 33 – Remanência em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.7$	67
Figura 34 – Coercividade em função do ângulo para diferentes espessuras, ϵ da casca	68
Figura 35 – Remanência em função do ângulo para diferentes espessuras, ϵ da casca	68
Figura 36 – Esquema da simulação da reversão da magnetização. Inicialmente o arranjo tem uma magnetização na direção negativa do eixo X	69
Figura 37 – Esquema da simulação da reversão da magnetização. Durante a reversão os momentos começam a girar	70

Figura 38 – Esquema da simulação da reversão da magnetização. Depois de um tempo o campo magnético externo reverteu a magnetização	70
Figura 39 – Energia de troca durante a reversão da magnetização	71
Figura 40 – Evolução temporal das componentes m_y e m_z da magnetização	72
Figura 41 – Distribuição da magnetização no instante $9.52 \cdot 10^{-11} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.1$	73
Figura 42 – Distribuição da magnetização no instante $1.68 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.1$	74
Figura 43 – Distribuição da magnetização no instante $2.576 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.1$	75
Figura 44 – Distribuição da magnetização no instante $3.08 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.1$	76
Figura 45 – Distribuição da magnetização no instante $4.2 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.1$	77
Figura 46 – Distribuição da magnetização no instante $6.608 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.1$	78
Figura 47 – Energia de troca durante a reversão da magnetização	79
Figura 48 – Evolução temporal das componentes m_y e m_z da magnetização	80
Figura 49 – Distribuição da magnetização no instante $1.624 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.5$	81
Figura 50 – Distribuição da magnetização no instante $2.576 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.5$	82
Figura 51 – Distribuição da magnetização no instante $3.024 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.5$	83
Figura 52 – Distribuição da magnetização no instante $6.048 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.5$	84
Figura 53 – Distribuição da magnetização no instante $7.728 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.5$	85
Figura 54 – Energia de troca durante a reversão da magnetização	86
Figura 55 – Evolução temporal das componentes m_y e m_z da magnetização	87
Figura 56 – Distribuição da magnetização no instante $1.92 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.8$	88
Figura 57 – Distribuição da magnetização no instante $4.32 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.8$	89
Figura 58 – Distribuição da magnetização no instante $5.52 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.8$	90
Figura 59 – Distribuição da magnetização no instante $2.808 \cdot 10^{-9} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.8$	91

Figura 60 – Distribuição da magnetização no instante $4.056 \cdot 10^{-09} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.8$	92
Figura 61 – Ciclos de histerese simulados para diferentes valores da espessura, ϵ	94
Figura 62 – Coercividade em função da espessura da casca, ϵ	95
Figura 63 – Remanência em função da espessura da casca, ϵ	96
Figura 64 – Ciclos de histerese simulados para a espessura $\epsilon = 0.2$ variando o ângulo de aplicação do campo	97
Figura 65 – Coercividade em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.2$	98
Figura 66 – Remanência em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.2$	98
Figura 67 – Ciclos de histerese simulados para a espessura $\epsilon = 0.5$ variando o ângulo de aplicação do campo	100
Figura 68 – Coercividade em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.5$	101
Figura 69 – Remanência em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.5$	102
Figura 70 – Ciclos de histerese simulados para a espessura $\epsilon = 0.8$ variando o ângulo de aplicação do campo	103
Figura 71 – Coercividade em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.8$	104
Figura 72 – Remanência em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.8$	104
Figura 73 – Coercividade em função do ângulo para diferentes espessuras ϵ da casca	105
Figura 74 – Remanência em função do ângulo para diferentes espessuras ϵ da casca	106
Figura 75 – Energia de troca durante a reversão da magnetização	107
Figura 76 – Evolução temporal das componentes m_y e m_z da magnetização	108
Figura 77 – Distribuição da magnetização no instante $2.6 \cdot 10^{-11} s$ para arranjos de Co com $\epsilon = 0.1$	109
Figura 78 – Distribuição da magnetização no instante $4.4 \cdot 10^{-11} s$ para arranjos de Co com $\epsilon = 0.1$	110
Figura 79 – Distribuição da magnetização no instante $6.6 \cdot 10^{-11} s$ para arranjos de Co com $\epsilon = 0.1$	111
Figura 80 – Distribuição da magnetização no instante $1.98 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Co com $\epsilon = 0.1$	112
Figura 81 – Energia de troca durante a reversão da magnetização	113
Figura 82 – Evolução temporal das componentes m_y e m_z da magnetização	114
Figura 83 – Distribuição da magnetização no instante $2.2 \cdot 10^{-11} s$ para arranjos de Co com $\epsilon = 0.5$	115
Figura 84 – Distribuição da magnetização no instante $1.08 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Co com $\epsilon = 0.5$	116
Figura 85 – Distribuição da magnetização no instante $2.86 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Co com $\epsilon = 0.5$	117
Figura 86 – Energia de troca durante a reversão da magnetização	118
Figura 87 – Evolução temporal das componentes m_y e m_z da magnetização	119

Figura 88 – Distribuição da magnetização no instante $7.5 \cdot 10^{-11} s$ para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.8$	120
Figura 89 – Distribuição da magnetização no instante $1.45 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.8$	121
Figura 90 – Distribuição da magnetização no instante $7.45 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.8$	122

Lista de tabelas

Tabela 1 – Propriedades intrínsecas dos materiais e parâmetros da simulação.	54
--	----

Lista de abreviaturas e siglas

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
abnTeX	ABsurdas Normas para TeX
OOMMF	Object Oriented Micro Magnetism Framework
MDF	Método de diferenças finitas
MEF	Método de elementos finitos
NIST	National Institute of Standards and Technology
SI	Sistema Internacional
LLG	Landau-Lifshitz-Gilbert
CF	Condições de Fronteira
FFT	Transformada Rápida de Fourier
GUI	Interface Gráfica de Usuário
VTK	Visualisation Toolkit

Lista de símbolos

R_e	Raio exterior
R_i	Raio interior
ε	Espessura das cascas
R_{crit}	Raio crítico
\vec{M}	Vetor de magnetização
M_s	Magnetização de saturação
M_r	Magnetização remanente
H_c	Campo coercitivo
dV	Elemento de volume
dS	Elemento de superfície
\vec{H}	Campo magnético
\vec{H}_{eff}	Campo efetivo
u_v	Densidade de energia potencial
k_v	Densidade de energia cinética
L	Lagrangiana
l_v	Densidade volumétrica da Lagrangiana
u_s	Densidade superficial de energia potencial
μ_0	Permeabilidade magnética do vácuo
B_{eff}	Campo de indução
$\vec{\tau}$	Torque magnético
$\vec{\mu}$	Dipolo magnético
\vec{J}	Momento angular do dipolo magnético
\vec{S}	Spin do elétron

γ	Razão giromagnética
g	Fator de <i>Lande</i>
q_e	Carga do elétron
m_e	Masa do elétron
$\vec{\mu}_B$	Magneton de <i>Bohr</i>
\hbar	Constante reduzida de <i>Planck</i>
t	Tempo
α	Parâmetro de amortecimento
\mathcal{H}_{exch}	Hamiltoniano de <i>Heisenberg</i>
fN	Soma dos primeiros vizinhos
S_i, S_j, S	Integral intercâmbio
\mathcal{U}_{exch}	Energia de troca
θ_{ij}	Ângulo entre os spin \vec{s}_i e \vec{s}_j
\vec{s}_i	Vetor unitário na direção do spin
A	Constante de troca
a	Distancia entre os primeiro vizinhos
\vec{H}_{exch}	Campo de troca
$\mathcal{U}_{an,u}$	Energia magnetocristalina uniaxial
K	Constante de anisotropia magnetocristalina uniaxial
\vec{u}_k	Vetor unitário ao longo da direção de anisotropia
$\vec{H}_{an,u}$	Campo efetivo de anisotropia uniaxial
K_0, K_1, K_2	Constantes de anisotropia cúbica
$\mathcal{U}_{an,cub}$	Energia de anisotropia cúbica
$\vec{D}(\vec{r}, t)$	Vetor deslocamento eléctrico
$\vec{\rho}(\vec{r}, t)$	Densidade volumétrica de carga livre
$\vec{E}(\vec{r}, t)$	Campo eléctrico

$\vec{\nabla}$	Operador nabla
$\frac{d}{dt}$	Operador derivada temporal
$\frac{\delta}{\delta \vec{m}}$	Operador derivada funcional
$\frac{\partial}{\partial \vec{m}}$	Operador derivada parcial
\mathcal{U}_{dmg}	Energia de desmagnetização
u_{dmg}	Densidade de energia magnetostática
\vec{H}_{dmg}	Campo de desmagnetização
\vec{r}, \vec{r}'	Vetores de posição
$\sigma(\vec{r})$	Densidade superficial de carga
\mathcal{U}_{Zee}	Energia Zeeman
\vec{H}_{ext}	Campo magnético externo
ΔV	Volume da cela
$\Delta X, \Delta Y, \Delta Z$	Dimensões da malha
l_{ex}	Longitude de troca
l_w	Largura da parede
N	Numero total de celas
$\mathcal{N}_{\alpha\beta}$	Tensor de desmagnetização
\mathcal{F}	Operador de convolução
\mathcal{F}^{-1}	Operador de convolução inverso
\vec{m}_0	Magnetização inicial
θ	Ângulo de aplicação do campo magnético externo respeito do eixo X

Sumário

1	INTRODUÇÃO	21
2	FUNDAMENTOS DO MICROMAGNETISMO	25
2.1	Introdução	25
2.2	Equações de equilíbrio e dinâmica da magnetização	25
2.3	Contribuições da Energia ao campo efetivo	30
2.3.1	Energia de troca	30
2.3.2	Energia magnetocristalina	32
2.3.2.1	Anisotropia uniaxial	32
2.3.2.2	Anisotropia cúbica	33
2.3.3	Energia magnetostática	34
2.3.4	Energia <i>Zeeman</i>	36
3	MICROMAGNETISMO NUMÉRICO	37
3.1	Discretização espacial	37
3.2	Discretização das equações micromagnéticas	40
3.2.1	Discretização da energia de troca	40
3.2.2	Discretização da anisotropia magnetocristalina	42
3.2.3	Discretização da interação magnetostática	43
3.2.4	Discretização da interação <i>Zeeman</i>	45
3.3	Solução numérica da equação dinâmica de <i>Landau-Lifshitz-Gilbert</i>	46
4	SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA UTILIZANDO <i>OBJECT ORIENTED MICROMAGNETIC FRAMEWORK</i> (OOMMF)	48
4.1	Simuladores micromagnéticos	48
4.2	Object Oriented Micromagnetic Framework (OOMMF)	48
4.2.1	Pós-processamento	51
4.2.2	Código micromagnético da simulação	51
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	54
5.1	Considerações iniciais da simulação	54
5.2	Resultados da simulação do sistema de 100 nanocascas magnéticas de Ni	57
5.2.1	Simulação estática	57
5.2.1.1	Simulação para o campo aplicado paralelo ao plano do arranjo	58
5.2.1.2	Simulação para o campo aplicado formando ângulo θ com o eixo X	61
5.2.2	Estudo da dinâmica em arranjos de cascas de Ni	69

5.2.2.1	Simulação para casca de espessura $\varepsilon = 0.1$	71
5.2.2.2	Simulação para casca de espessura $\varepsilon = 0.5$	79
5.2.2.3	Simulação para casca de espessura $\varepsilon = 0.8$	85
5.3	Resultados da simulação do sistema de 100 nanocascas magnéticas de Co .	93
5.3.1	Simulação estática	93
5.3.1.1	Simulação para o campo aplicado paralelo ao plano do arranjo	93
5.3.1.2	Simulação para o campo aplicado formando ângulo θ com o eixo X	96
5.3.2	Estudo da dinâmica em arranjos de cascas de Co	106
5.3.2.1	Simulação para cascas de espessura $\varepsilon = 0.1$	106
5.3.2.2	Simulação para cascas de espessura $\varepsilon = 0.5$	112
5.3.2.3	Simulação para cascas de espessura $\varepsilon = 0.8$	117
6	CONCLUSÕES	123
7	PERSPECTIVAS	124
	REFERÊNCIAS	125

1 Introdução

Um nano-objeto é um objeto físico, que tem diferenças significativas nas propriedades, quando comparado com o material *bulk* correspondente. Por definição, é considerada, pelo menos uma das dimensões inferior a 100 nm (1). Quando se trata de nanopartículas (suas três dimensões estão na escala nanométrica), as propriedades magnéticas (e outras propriedades físicas) dependem em grande medida do tamanho. Neste caso as partículas que tem tamanhos comparáveis (ou menor que) os tamanhos dos domínios magnéticos, são as mais interessantes do ponto de vista do magnetismo. Devido aos avanços obtidos na síntese controlada de nano-objetos, em ciência de materiais, é possível sintetizar nanopartículas com diferentes formas e estruturas. Em particular, muitos estudos têm demonstrado os métodos e mecanismos de síntese de esferas ocas com dimensões que variam desde dezenas até centenas de nanômetros (2–5). As nanopartículas esféricas ocas têm uma série de propriedades interessantes diferentes às suas homólogas sólidas. Isto devido à sua baixa densidade, elevada área superficial específica, o espaço vazio no interior da nanoestrutura e a alta porosidade (sem afetar grandemente a sua estabilidade mecânica e térmica) (6–10).

A produção de nanopartículas esféricas ocas foi conseguida através da aplicação de vários métodos. Foi reportada, a síntese de nanopartículas ocas por efeito Kirkendall (10–16) e pela ação simultânea ou sequencial da substituição galvânica e o efeito Kirkendall (17, 18). Nanoestruturas metálicas ocas foram obtidas utilizando a técnica de sacrifício do molde (19), este molde pode ser removido utilizando um solvente adequado, solução ácida ou alcalina, ou por meio de calcinação a temperaturas elevadas. Para criar as partículas ocas, comumente são utilizadas esferas de sílica: pela sua boa monodispersividade, ampla gama de tamanhos e facilidade de síntese (20–22). As cascas também são obtidas com esferas de polímero (23) e micelas (24, 25). Reações de transmetalização entre nanopartículas de prata e chloraurato hidrofobizadas e íons de cloroplatinato em clorofórmio para dar origem à formação de nanocascas de platina (26). Esferas ocas de Índio foram sintetizadas por via sorvotermal (9). Várias nanoestruturas de Ni, tais como nanoesferas ocas, foram preparadas por tratamento hidrotérmico de uma solução alcalina de NaH_2PO_2 e $Ni(DS)_2$ a 100 °C (27), nanoestruturas magnéticas tipo cadeias de nanopartículas de Ni utilizando métodos químicos úmidos na presença de poli (vinilpirrolidona), PVP (28). Usando uma abordagem modificada, foram sintetizadas com sucesso, nanoestruturas tipos cadeias de nanoesferas ocas de Co. Com uma estratégia de deposição eletroquímica, com base em esferas de poliestireno, consegue-se a síntese de arranjos de nanocascas de Ni (29). Arranjos de esferas ocas de Si, foram obtidos por deposição electroforética de soluções coloidais de Si (30), os parâmetros estruturais das esferas ocas de Si são controláveis. Esferas ocas de metais (tais como Ni e Ag) (29, 31) se podem preparar a través de métodos similares somente mudando as soluções coloidais em sais de metais para o processo de electrodeposição. Foi recentemente

proposto um método, usando uma nova classe de copolímero formando micelas unimoleculares estruturalmente estáveis, onde é possível a síntese fácil de solventes orgânicos e nanocristais praticamente monodispersos e solúvel em água. Pode-se escolher a arquitetura e composição desejada que inclui *core-shell* e nanoestruturas ocas (32).

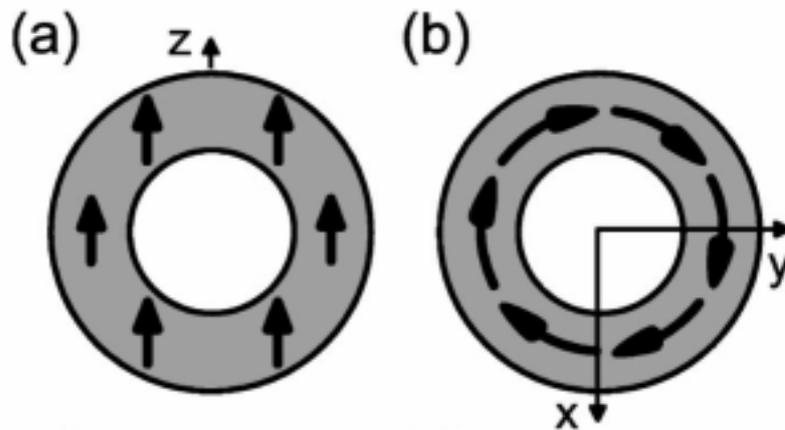
Por conseguinte, é possível adaptar as propriedades magnéticas de nanopartículas, variando a espessura da casca da estrutura oca, além do tamanho de partícula, criando interesse nas pesquisas para as potenciais aplicações. Estas aplicações estão surgindo na fronteira entre a ciência de materiais e muitos outros campos, tais como eletrônica, biomedicina, farmacêutica, ótica e catálise (24, 33–36). Por exemplo, têm sido utilizadas, como portadoras, em sistemas de liberação controlada de fármacos (37), materiais de alta sensibilidade para detecção de gás (38, 39), tintas, corantes, células artificiais e revestimentos (33, 36). Pode-se citar que a utilização de metais pode ser reduzida na fabricação de materiais condutores compósitos, utilizando preenchimentos de metais sob a forma de nanoestruturas ocas (40). Arranjos de esferas ocas tem sido intensivamente estudados para aplicações em sensores de superfície em espalhamento Raman, celas e baterias de íon-lítio (41).

Com base nas aplicações torna-se necessário explicar e compreender com maior propriedade o comportamento magnético e a dinâmica da magnetização destes novos materiais na escala nanométrica.

Existem poucos estudos sistemáticos sobre o magnetismo de cascas (42–44). As nanoesferas ocas ferromagnéticas têm recebido um tratamento analítico, *Goll et al* (42, 43) estudaram nanocascas ferromagnéticas para diferentes materiais magnéticos moles e duros, variando o raio externo e a espessura da casca R_e e $R_e - R_i$ respectivamente. Para materiais com estrutura cristalina uniaxial como o Co e materiais com estrutura cristalina cúbica como o Fe e Permalloy se encontraram duas configurações de magnetização: modo coerente e modo *curling* (Figura 1). Para o caso do Co e o Permalloy com o incremento da relação $\varepsilon = R_i/R_e$, o raio máximo em que tem lugar o modo coerente (raio crítico R_{crit}) são $R_{crit}(Co) = 28\text{ nm}$ e $R_{crit}(Permalloy) = 20.88\text{ nm}$, em relação às partículas *bulk* de raio crítico $R_{crit}(Co) = 22.2\text{ nm}$ e $R_{crit}(Permalloy) = 18\text{ nm}$ para uma espessura de casca de $\varepsilon = 0.9$.

Em contraste com as esferas *bulk*, em esferas ocas não existe nenhum processo de nucleação homogêneo da inversão da magnetização para o estado coerente. Em lugar de isto, a nucleação ocorre de forma não homogênea e começa nos polos internos da partícula monodomínio onde o campo de desmagnetização tem seu maior valor de $(-M_s)$. *Kong et al* (44) encontraram o estado *Onion* (Figura 2) no caso de nanocascas esféricas de Co, partindo de uma expressão analítica e comprovado por simulação micromagnética.

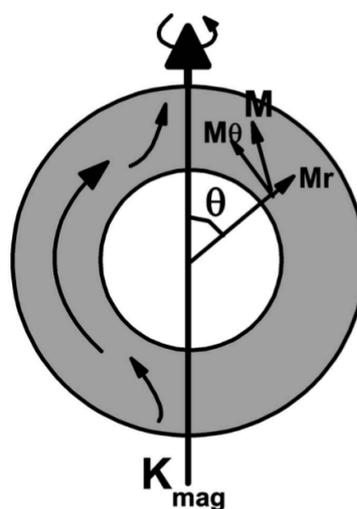
Figura 1 – Representação esquemática das possíveis configurações de magnetização em nanocascas esféricas ferromagnéticas: a) Coerente. b) *Curling*



Fonte: (42)

A simulação micromagnética permite pesquisas de caráter teórico, reduzindo substancialmente os custos da produção dos materiais, principalmente em caso de materiais caros. Proporciona o estudo dos efeitos de campos magnéticos aplicados ao material, na escala intermediária, entre os domínios magnéticos e as distâncias interatômicas. Além da visualização aproximada dos processos na dinâmica da magnetização (45).

Figura 2 – Diagrama do estado *Onion*.



Fonte: (44)

Os objetivos deste trabalho são, por meio da simulação micromagnética, estudar arranjos hexagonais de nanocascas magnéticas de Ni e Co. Especificamente, estudar os efeitos da espessura das estruturas ocas. Calcular numericamente a reversão da magnetização, utilizando o software de domínio público *Oriented Micro Magnetism Framework* (OOMMF), desenvolvido

pelo *National Institute of Standards and Technology (NIST)* baseado no método de diferenças finitas (MDF) (46).

Atualmente nosso grupo faz trabalhos com esses materiais e a previsão de propriedades torna-se importante na decisão de objetos a serem fabricados.

Para apresentar nossos resultados, a dissertação está estruturada em 7 capítulos, que mostram todo o processo da pesquisa. O primeiro capítulo é uma introdução, apresentada acima, que faz um estado da arte sobre as cascas magnéticas que serve de motivação para a pesquisa. Aqui se aborda a importância dos estudos por simulação micromagnética nestes objetos na escala nanométrica, particularmente o estudo dos efeitos da espessura das cascas sobre as propriedades magnéticas. O capítulo dois faz uma revisão sobre o formalismo micromagnético, que é a base teórica da pesquisa. Se descrevem os principais termos energéticos que contribuem ao campo efetivo é a equação de *Landau-Lifshitz-Gilbert* da dinâmica da magnetização. A continuação, o capítulo três, aborda os métodos numéricos do micromagnetismo utilizando o método de diferenças finitas (MDF), onde é feita a discretização dos termos energéticos e as equações micromagnéticas. O capítulo quatro é dedicado a descrever o simulador micromagnético OOMMF utilizado em nosso “experimento numérico” e se faz uma explicação do código da simulação. No capítulo cinco se mostram e discutem os principais resultados tanto do estudo estático como a dinâmica da magnetização para os arranjos de nanocascas de Ni e Co para diferentes espessuras da casca. No capítulo seis, se escrevem as conclusões mais importante que foram obtidas durante o trabalho. O capítulo sete é final e dedicado as perspectivas para trabalhos futuros.

2 Fundamentos do Micromagnetismo

2.1 Introdução

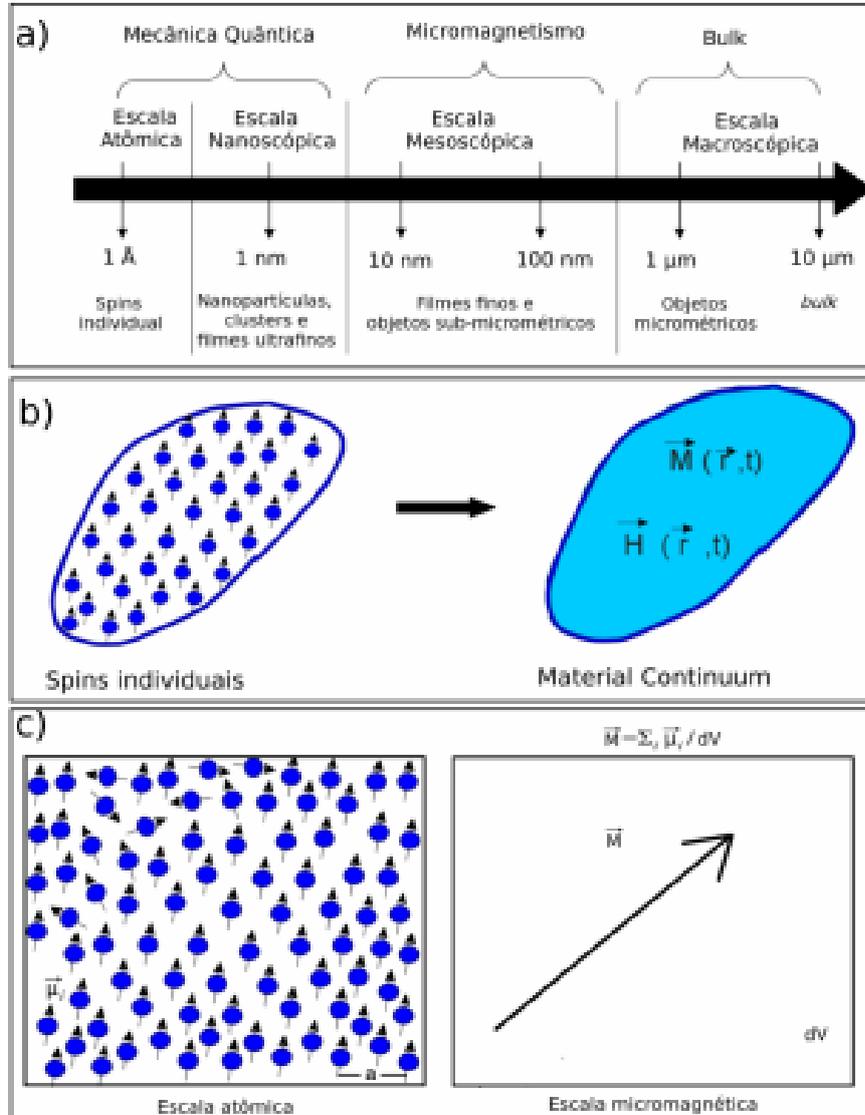
As propriedades magnéticas dos materiais têm explicação de origem quântica (45, 47, 48). No entanto, a fim de descrever as propriedades magnéticas do ponto de vista quântico, é preciso trabalhar a partir da escala atômica, considerando-se um sistema discreto de spins. Este formalismo é inviável, devido ao grande número de spins envolvidos. Na prática, o que é feito é utilizar um formalismo conhecido como Micromagnetismo, que demonstrou ser uma ferramenta útil para descrever a dinâmica da magnetização dos materiais ferromagnéticos. O Micromagnetismo é um formalismo teórico (45), que permite o estudo da magnetização a uma escala maior do que a escala atômica (Figura 3 a), mas suficientemente pequena, para permitir a visualização da dinâmica da estrutura dos domínios magnéticos. O Micromagnetismo é baseado na suposição de que a magnetização $\vec{M}(r)$, é uma função vetorial contínua da posição no interior do material, (Figura 3 b) e seu módulo, chamado de magnetização espontânea M_s , permanece constante em cada ponto do material. Como resultado, um material ferromagnético pode ser idealizado como um grupo de elementos de volume dV com uma magnetização M_s . A direção de magnetização é dada pelo vetor unitário $\vec{m}(r) = \vec{M}(r)/M_s$, que varia pouco de cada elemento de volume ao seu vizinho. Cada elemento do volume tem que ser suficientemente grande para que contenha um elevado número de átomos que são os responsáveis pelo momento magnético, (Figura 3 c) ou seja, muito maior do que a constante a da rede. No entanto, cada elemento de volume tem que ser pequeno, a fim de evitar uma mudança brusca na magnetização entre os elementos do volume, de acordo com a natureza contínua da função vetorial da magnetização.

Tendo em conta que o tipo de sistema a ser estudado é discreto, a aproximação contínua requer uma justificativa. Isto é baseado no fato de que a interação de troca é dominante em curtas distâncias, forçando os dipolos magnéticos (ou elementos de volume dV na descrição micromagnética) a serem paralelos, considerando, que as demais interações podem ser aproximadas como pequenas perturbações na orientação paralela entre os primeiros vizinhos. Por isso, é razoável dizer que $\vec{M}(r)$ é uma função contínua da posição, devido a que a magnetização varia ligeiramente entre cada elemento.

2.2 Equações de equilíbrio e dinâmica da magnetização

Para determinar a equação do equilíbrio, todas as contribuições de energia que atuam sobre a magnetização devem ser consideradas. A expressão pode ser obtida utilizando o princípio

Figura 3 – a) Escala micromagnética. b) A magnetização $\vec{M}(\vec{r})$, é uma função vetorial contínua da posição no interior do material, e seu módulo, chamado de magnetização espontânea M_s , permanece constante em cada ponto do material. c) Representação na escala atômica dos momentos magnéticos individuais $\vec{\mu}_i$, e o vetor magnetização \vec{M} como a soma de todos os momentos magnéticos $\vec{\mu}_i$ dentro do volume dV .



Fonte: Produzido pelo autor

variacional de Hamilton (49), a fim de resolver a evolução temporal do sistema:

$$\int_{t_1}^{t_2} L dt = \int_{t_1}^{t_2} \left(\int_V l_V dV + \int_S u_S dS \right) dt, \quad (2.1)$$

onde, L é o funcional Lagrangiano para o campo vetorial contínuo no espaço tridimensional, $\vec{m}(\vec{r}, t)$ e $l_V = k_V + u_V$ a densidade volumétrica da Lagrangiana. Sendo u_V e k_V as densidades de energia cinética e potencial respectivamente. Na segunda parte da equação 2.1, u_S representa a densidade superficial da energia potencial. Desenvolvendo algebricamente e considerando o

estado de equilíbrio estático, é possível alcançar as equações de equilíbrio para os pontos do volume e da superfície:

$$\frac{\delta u_v}{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)} = 0 \quad (2.2)$$

$$\left[\frac{\delta u_s}{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)} + \frac{\delta u_v}{\delta (\vec{\nabla} \vec{m}(\vec{r}, t))} \cdot \vec{n} \right] = 0 \quad (2.3)$$

No SI pode-se definir um vetor com as dimensões de um campo magnético a partir da derivada funcional da densidade de energia 2.2,

$$\vec{H}_{eff} = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta u_v}{\delta \vec{m}(\vec{r}, t)}, \quad (2.4)$$

onde a derivada funcional é dada pela expressão

$$\frac{\delta}{\delta \vec{m}} \equiv \frac{\partial}{\partial \vec{m}} - \vec{\nabla} \frac{\partial}{\partial (\vec{\nabla} \vec{m})}. \quad (2.5)$$

A quantidade \vec{H}_{eff} chamada campo efetivo, contém as contribuições das energias magnéticas envolvidas no sistema. De 2.2 obtemos as condições de equilíbrio do volume, em termos de \vec{H}_{eff} :

$$\vec{m} \times \frac{\delta u_v}{\delta \vec{m}} = 0 \Rightarrow \vec{m} \times \vec{H}_{eff} = 0 \quad (2.6)$$

A equação 2.6 representa o estado em que o torque de \vec{H}_{eff} sobre \vec{M} é igual a zero em cada elemento de volume do material. As equações 2.3 e 2.6 são conhecidas como equações de *Brown* (50). Suponha-se, agora, uma amostra ferromagnética com uma magnetização \vec{M} sob a influência de um campo magnético \vec{H}_{eff} . Em unidades do SI, o campo de indução \vec{B}_{eff} pode-se expressar por $\vec{B}_{eff} = \mu_0(\vec{M} + \vec{H}_{eff})$. Neste campo, cada elemento de volume do sistema experimenta um torque $\vec{\tau}$, dado por,

$$\vec{\tau} = \vec{M} \times \vec{B}_{eff} = \mu_0 \vec{M} \times \vec{H}_{eff}, \quad (2.7)$$

onde μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo. Da equação 2.7, podemos deduzir que o torque $\vec{\tau}$ tenta a girar cada elemento da magnetização em uma determinada direção, estabelecida por \vec{H}_{eff} local.

A expressão para a dinâmica da magnetização pode ser obtida a partir da equação de movimento dos dipolos magnéticos $\vec{\mu}$ sob a influência de um campo \vec{B}_{eff} , usando a segunda lei

de Newton. O torque sobre o dipolo magnético é igual à taxa da variação do momento angular, do dipolo magnético, \vec{J} :

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = \vec{\tau} = \mu_0 \vec{\mu} \times \vec{H}_{eff} \quad (2.8)$$

Na maioria dos materiais ferromagnéticos o momento angular \vec{J} , é devido principalmente ao spin do elétron ($\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \approx \vec{S}$) (51, 52). O spin \vec{S} e o dipolo magnético $\vec{\mu}$ estão relacionados através da razão giromagnética γ por,

$$\vec{\mu} = -\gamma \vec{S} \quad (2.9)$$

onde γ é:

$$\gamma = \frac{gq_e}{2m_e} = \frac{g\mu_B}{\hbar} < 0, \quad (2.10)$$

sendo g é o fator de *Lande*, para um elétron livre que é aproximadamente igual a 2. Os outros factores são a carga do elétron q_e e sua massa m_e , o magneton de *Bohr* μ_B e a constante de *Planck* reduzida \hbar . A equação da dinâmica do dipolo magnético pode ser escrita como,

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \gamma \mu_0 \vec{\mu} \times \vec{H}_{eff}. \quad (2.11)$$

No formalismo do micromagnetismo, como analisamos na secção anterior, ao invés de dipolos magnéticos individuais é considerado um grande número deles em cada elemento do volume dV (Figura 3 c)). Então, a equação da dinâmica da magnetização pode ser escrita como,

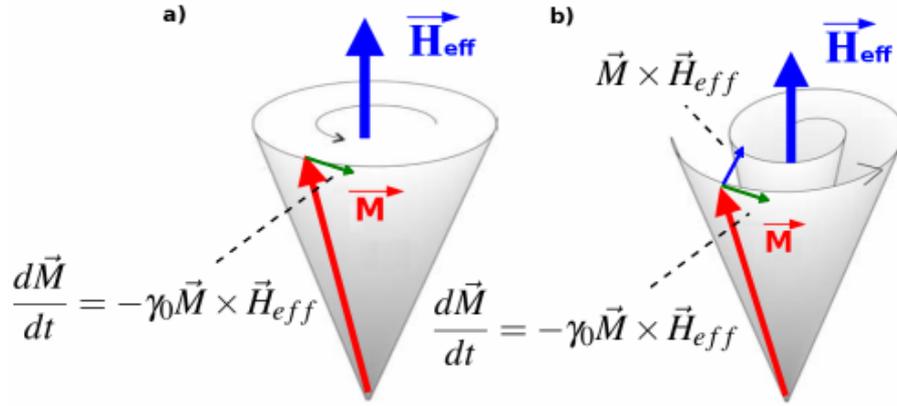
$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma_0 \vec{M} \times \vec{H}_{eff}, \quad (2.12)$$

onde γ_0 é definido como:

$$\gamma_0 = \mu_0 \frac{g|\vec{\mu}_B|}{\hbar} = -\mu_0 \gamma. \quad (2.13)$$

A expressão 2.12 significa que, na presença de um campo magnético constante, a magnetização \vec{M} vai girar indefinidamente, até nunca atingir o estado de equilíbrio. No entanto, a experiência demonstra, que depois de um tempo, a magnetização estará alinhada com o campo. Isto significa que o sistema vai para o estado de equilíbrio por algum mecanismo de origem dissipativa. Existem diversos processos que podem contribuir para a dissipação da energia, entre eles se encontram as interações da rede, espalhamento, correntes parasitas, etc. Todos estes processos são difíceis descrever. Em consequência, no micromagnetismo, são incluídos do

Figura 4 – Dinâmica da magnetização \vec{M} em presença de um campo magnético \vec{H}_{eff} . a) Sem dissipação $\alpha = 0$, a magnetização gira ao redor do campo com frequência $-\gamma_0 \vec{H}_{eff}$. b) Com amortiguamento $\alpha > 0$, depois de um intervalo de tempo a magnetização precessiona até que se alinha com o campo, devido ao termo dissipativo $\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt}$.



Fonte: Produzido pelo autor

ponto de vista fenomenológico, adicionando um termo dissipativo na equação dinâmica 2.12. A maneira mais simples de adicionar a dissipação na equação dinâmica é modificar o campo efetivo \vec{H}_{eff} , para incluir um tipo de dissipação ôhmica (47), (Figura 4 (b)),

$$\vec{H}_{eff} \Rightarrow \vec{H}_{eff} - \frac{\alpha}{\gamma_0 M_s} \frac{d\vec{M}}{dt}, \quad (2.14)$$

onde α é o parâmetro de amortecimento fenomenológico adimensional. Usando o campo efetivo modificado a partir de 2.14 em 2.12 é obtida a equação de *Gilbert*,

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma_0 \vec{M} \times \vec{H}_{eff} + \frac{\alpha}{M_s} \vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt}. \quad (2.15)$$

Da solução da equação 2.15, podemos verificar que o sistema perderá energia continuamente até alcançar o estado de equilíbrio, em que a magnetização \vec{M} é paralela ao campo efetivo \vec{H}_{eff} . Além disso, se $d\vec{M}/dt = 0$, o estado de equilíbrio dinâmico da equação 2.15, é reduzido para a equação de equilíbrio 2.6. O trabalho com a equação de *Gilbert*, na maioria dos casos, não é uma tarefa simples, porque a derivada temporal da magnetização está presente em ambos lados da expressão 2.15. No entanto, foi proposta por *Landau e Lifshitz* uma forma diferente de introduzir o termo fenomenológico de dissipação em 2.12. Esta proposta inclui um termo de dissipação que é perpendicular tanto ao vetor de magnetização \vec{M} como à precessão de $\vec{M} \times \vec{H}_{eff}$:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma_0 \vec{M} \times \vec{H}_{eff} - \frac{\gamma_0 \alpha}{M_s} \vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{H}_{eff}). \quad (2.16)$$

Ao contrário da equação de *Gilbert* 2.15, em 2.16 os termos da dissipação e precessão são desacoplados, e podem ser resolvidos numericamente. É possível obter uma equação que formalmente seja a mesma descrita por *Landau e Lifshitz* 2.16, e que expresse a mesma dinâmica da equação de *Gilbert* 2.15. Multiplicando ambos lados de 2.15 por $\vec{M} \times$ e usando as propriedades $\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c})\vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b})\vec{c}$, e $\vec{M} \cdot \vec{M} = M_s^2$, chega-se à seguinte expressão:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\frac{\gamma_0}{1+\alpha^2}\vec{M} \times \vec{H}_{eff} - \frac{\gamma_0}{1+\alpha^2}\frac{\alpha}{M_s}\vec{M} \times (\vec{M} \times \vec{H}_{eff}). \quad (2.17)$$

A equação acima é formalmente conhecida como a equação de *Landau-Lifshitz-Gilbert* (LLG) e descreve as mesmas propriedades físicas que a equação 2.15. A equação 2.17 será usada para resolver a dinâmica da magnetização do nosso trabalho. Tendo em conta $\vec{m} = \vec{M}/M_s$, muitas vezes é útil escrever a expressão acima, na forma:

$$(1+\alpha^2)\frac{d\vec{m}}{dt} = -\gamma_0 \left[\vec{m} \times \vec{H}_{eff} - \alpha \vec{m} \times (\vec{m} \times \vec{H}_{eff}) \right], \quad (2.18)$$

2.3 Contribuições da Energia ao campo efetivo

Nas seguintes subseções, são analisadas algumas contribuições da energia do campo efetivo 2.4, para utilização nos cálculos da equação dinâmica de LLG 2.17. Estas contribuições são de natureza quântica como as interações de troca e energia magnetocristalina, e de natureza clássica como as interações magnetostática e de tipo *Zeeman*. Os efeitos do campo térmico e outras contribuições não são considerados neste trabalho.

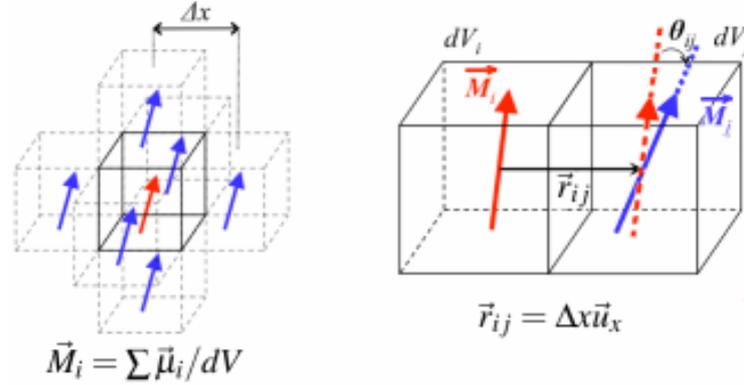
2.3.1 Energia de troca

Como afirmado anteriormente, a energia de troca em ferromagnéticos é a interação dominante em distâncias curtas, e portanto, é responsável pelo alinhamento paralelo entre os spins vizinhos. Sua origem é de natureza mecânico-quântica e devido ao princípio de exclusão de *Pauli*. O Hamiltoniano de *Heisenberg*, que descreve a interação de troca, é geralmente escrito como (50):

$$\mathcal{H}_{exch} = -\sum_{i,j}^{fN} 2J_{ij}\hat{S}_i\hat{S}_j. \quad (2.19)$$

A soma é entre os primeiros vizinhos fN , S_i e S_j representam operadores de spin e J_{ij} é a integral intercâmbio, cujo valor diminui rapidamente com a distância entre os spins. Portanto, só é significativa entre os vizinhos mais próximos. Isto significa que podemos escrever J em vez de J_{ij} . A fim de adaptar o Hamiltoniano de *Heisenberg* com a descrição contínua usada neste

Figura 5 – Representação da interação de troca entre primeiros vizinhos. No modelo micromagnético, cada elemento de volume de magnetização \vec{M} está a uma distancia Δx dos primeiros vizinhos onde \vec{r}_{ij} é o vetor posição que os liga.



Fonte: (53, p. 30)

trabalho, os operadores de spin são substituídos por vetores $\vec{S}_{i,j} = S_{i,j}\vec{s}_{i,j}$ (com $S_i = S_j = S$). O produto escalar em 2.19 é reescrito para obter a seguinte expressão para a energia de troca:

$$\mathcal{U}_{exch} = -JS^2 \sum_{i,j} \cos \theta_{ij}. \quad (2.20)$$

Na equação 2.20, θ_{ij} é o ângulo entre os spins \vec{s}_i e \vec{s}_j e j representa o primeiro vizinho dos spins i (Figura 5).

Assumindo que o ângulo entre os spins θ_{ij} é muito pequeno, podemos aproximar $\cos \theta_{ij} \approx 1 - \theta_{ij}^2/2$ em 2.20, especialmente considerando que é a soma para cada par de primeiros vizinhos, então,

$$\mathcal{U}_{exch} = JS^2 \sum_i \sum_j \theta_{ij}^2. \quad (2.21)$$

Na descrição do micromagnetismo o vetor unitário na direção do spin \vec{s}_i , de cada dipolo $\vec{\mu}_i$ presente na rede é substituído pelo vetor unitário $\vec{m}_i = \vec{M}_i/M_s$, em cada elemento de volume, sendo $\vec{M}_i = \sum \vec{\mu}_i/dV$ (Figura 5). Usando a variável contínua e adimensional da magnetização \vec{m} , pode-se escrever para ângulos pequenos,

$$|\theta_{ij}| \approx |\vec{m}_i - \vec{m}_j| \approx |(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla}) \vec{m}|, \quad (2.22)$$

onde \vec{r}_{ij} é o vetor de posição entre i e j (Figura 5), então a energia de troca pode ser escrita de acordo com,

$$\mathcal{U}_{exch} = JS^2 \sum_i \sum_{\vec{r}_{ij}} [(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\nabla}) \vec{m}]^2. \quad (2.23)$$

Na representação contínua, a soma de i é substituída pela integral sobre o volume V da amostra ferromagnética em estudo. Assim, a energia de troca tem a forma,

$$U_{exch} = \int_V u_{ex} dV = \int_V A \left(\vec{\nabla} \vec{m} \right)^2 dV, \quad (2.24)$$

onde A é a constante de troca em [*Joule/metro*], que é dada por,

$$A = \frac{JS^2z}{a}, \quad (2.25)$$

onde a é a distância entre os primeiros vizinhos e z é igual a 1, 2 ou 4, dependendo se a rede é cúbica simples, cúbica centrada na face ou cúbica centrada no corpo, respectivamente. A energia de troca é descrita por 2.24. A equação 2.24 é considerada válida a qualquer temperatura T , e A depende de T . Finalmente, utilizando 2.4 e 2.24 a expressão do campo de troca \vec{H}_{exch} pode ser escrita como:

$$\vec{H}_{exch}(\vec{r}) = \frac{2A}{\mu_0 M_s} (\nabla^2 \vec{m}(\vec{r})). \quad (2.26)$$

2.3.2 Energia magnetocristalina

Diversos experimentos mostraram que os materiais magnéticos geralmente não são isotrópicos, e portanto, têm direções preferenciais de magnetização. Essas direções são chamadas direções fáceis. As mesmas são mais fáceis de magnetizar, e se relacionam com as direções simétricas do cristal. A energia magnetocristalina é definida como a energia adicional necessária para magnetizar um material num determinado sentido. A referência é a energia na direção de fácil magnetização. Sua origem vem da interação spin-órbita a nível atômico. É muito difícil obter uma expressão a partir de um modelo microscópico, e por conseguinte, é utilizado um enfoque fenomenológico (47).

2.3.2.1 Anisotropia uniaxial

Tomando o primeiro termo da expansão em série de *Taylor*, a energia magnetocristalina para um cristal uniaxial é dada por:

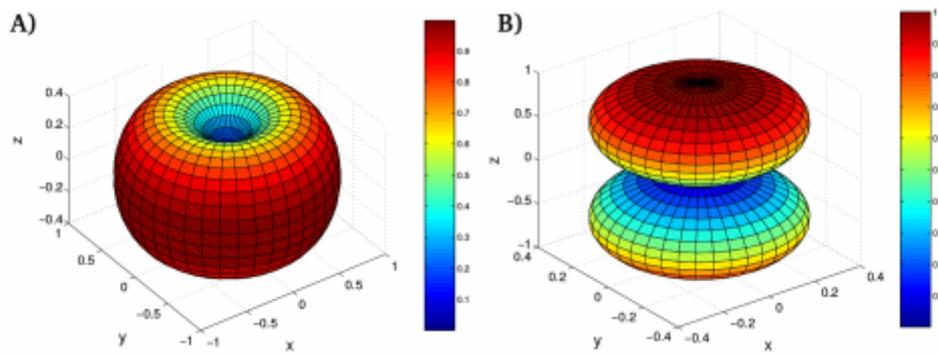
$$U_{an,u} = \int_V u_{an,u} dV = \int_V K \left(1 - (\vec{m} \cdot \vec{u}_k)^2 \right) dV, \quad (2.27)$$

onde $K(J/m)$ é a constante de anisotropia e \vec{u}_k o vetor unitário ao longo da direção de anisotropia. Quando $K > 0$ a direção de \vec{u}_k é uma direção fácil, pelo contrário, se $K < 0$, \vec{u}_k é uma direção difícil. No primeiro caso, a energia magnetocristalina tem um mínimo quando a magnetização é paralela ao eixo fácil \vec{u}_k . Por outro lado, quando $K < 0$, a energia de anisotropia tem um máximo quando a magnetização é paralela ao eixo difícil \vec{u}_k . Como resultado, o plano perpendicular ao

eixo difícil \vec{u}_k é chamado plano fácil, porque todas as direções paralelas a este plano são direções fáceis, e são mínimos da energia magnetocristalina uniaxial (Figura 6) A partir da equação da energia 2.27 e utilizando 2.4, o campo efetivo de anisotropia uniaxial $\vec{H}_{an,u}$ para cada elemento de volume é determinado por,

$$\vec{H}_{an,u}(\vec{r}) = \frac{2K}{\mu_0 M_s} (\vec{m} \cdot \vec{u}_k) \vec{u}_k. \quad (2.28)$$

Figura 6 – Densidade de energia para cristal uniaxial. A) eixo fácil ($K > 0$). B) Plano fácil ($K < 0$)



Fonte: (54, p. 21)

2.3.2.2 Anisotropia cúbica

Quando, a densidade de energia tem simetria cúbica, é principalmente devido ao acoplamento de spin-retículo cristalino, em cristais cúbicos. Basicamente existem três direções privilegiadas. Uma expansão típica da densidade de energia de anisotropia em coordenadas cartesianas é,

$$u_{an,cub} = K_0 + K_1 (m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2) + K_2 m_x^2 m_y^2 m_z^2 + \dots \quad (2.29)$$

K_0 , K_1 e K_2 são constantes de anisotropia do material. Em geral dos resultados experimentais se obtêm $K_1 \gg K_2$, então 2.29 é:

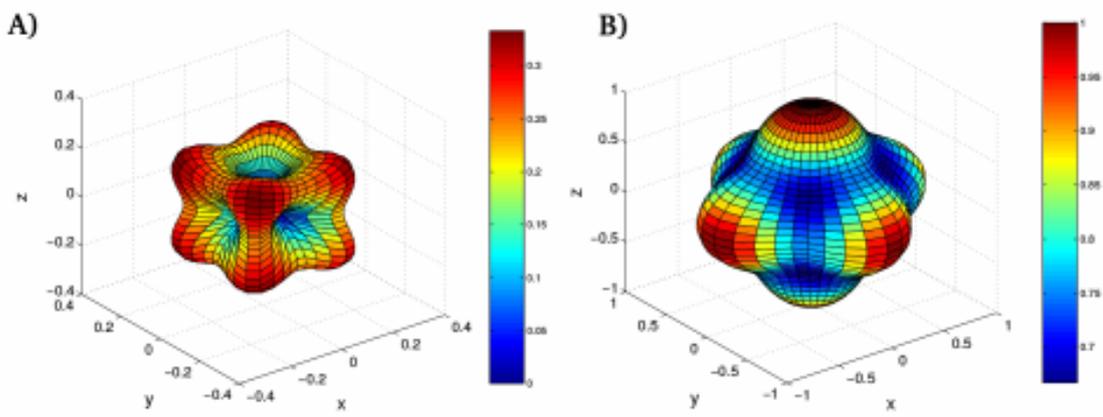
$$u_{an,cub} = K_1 (m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2). \quad (2.30)$$

Sendo assim, a energia em simetria cúbica apresenta a expressão:

$$U_{an,cub} = \int_V K_1 (m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2) dV. \quad (2.31)$$

Quando $K_1 > 0$, temos seis mínimos de energia equivalentes, correspondentes às direções positivas e negativas dos eixos x , y , z . Em contrapartida, quando $K_1 < 0$ uma situação mais complexa ocorre. De fato, há oito mínimos equivalentes. Estas direções são ao longo das direções que apontam para os vértices do cubo (por exemplo, a direção $[1\ 1\ 1]$). Neste caso eixos coordenados tornam-se direções difíceis (Figura 7). É importante destacar que o carácter da interação é local. Ou seja, a energia magnetocristalina está relacionada com um volume elementar $dV(\vec{r})$ e depende apenas da sua magnetização $\vec{M}(\vec{r})$.

Figura 7 – Densidade de energia cúbica. A) Os eixos de coordenadas são direções fácies ($K_1 > 0$). B) Os eixos de coordenadas são direções fácies ($K_1 < 0$).



Fonte: (54, p. 22)

2.3.3 Energia magnetostática

A energia magnetostática é a energia associada com a interação magnetostática entre os dipolos magnéticos do material. O campo criado pelos dipolos é chamado campo magnetostático ou de desmagnetização, porque do ponto de vista do material, este campo tenta desmagnetizar a amostra. Este é um dos campos clássicos derivados das equações de *Maxwell* 2.32, cuja contribuição é essencial para o formalismo micromagnético. Esta contribuição é também uma das mais difíceis de calcular.

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) &= \rho(\vec{r}, t) \\
 \vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) &= 0 \\
 \vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{\partial \vec{B}(\vec{r}, t)}{\partial t} \\
 \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, t) &= \vec{j}(\vec{r}, t) - \frac{\partial \vec{D}(\vec{r}, t)}{\partial t}
 \end{aligned} \tag{2.32}$$

Nas equações 2.32, $\vec{D}(\vec{r}, t)$ o vetor de deslocamento eléctrico, $\rho(\vec{r}, t)$ é a densidade

volumétrica de carga livre, $\vec{B}(\vec{r}, t)$ vetor indução magnética, $\vec{E}(\vec{r}, t)$ é o campo eléctrico, $\vec{H}(\vec{r}, t)$ é o campo magnético, $\vec{j}(\vec{r}, t)$ é a densidade volumétrica de corrente.

É bem conhecido que um elipsoide uniformemente magnetizado ao longo de seus eixos experimenta um campo magnético que se opõe à magnetização. Este campo é chamado campo de desmagnetização \vec{H}_{dmg} . Naturalmente, o mesmo efeito é observado em outras geometrias de materiais magnéticos com magnetizações ao longo de diferentes direcções. Considerando a aproximação magnetostática, caso em que o campo magnetostático é o único campo presente, ou seja, na ausência de correntes livres no material, correntes eléctricas, ou outro campo magnético, as equações de Maxwell são reduzidas a:

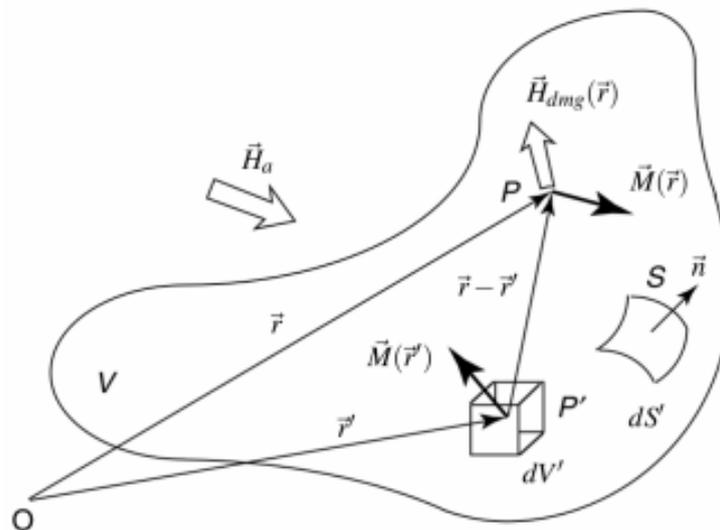
$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}) &= 0 \\ \vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}) &= 0. \end{aligned} \tag{2.33}$$

Sabendo que $\vec{B} = \mu_0(\vec{M} + \vec{H})$, sendo agora \vec{H} igualado ao campo magnetostático \vec{H}_{dmg} , as equações podem ser escritas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \mu_0 (\vec{M}(\vec{r}) + \vec{H}_{dmg}(\vec{r})) &= 0 \Leftrightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{H}_{dmg}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{M}(\vec{r}) \\ \vec{\nabla} \times \vec{H}_{dmg}(\vec{r}) &= 0. \end{aligned} \tag{2.34}$$

A tarefa de calcular o campo magnetostático $\vec{H}_{dmg}(\vec{r})$ é análoga a calcular o campo eléctrico $\vec{E}(\vec{r})$ criado por uma distribuição de cargas eléctricas $\rho(\vec{r})$, dentro de um volume V , de um dieléctrico delimitado por uma superfície S .

Figura 8 – Geometria correspondente com a equação 2.36.



A partir das equações 2.34, e tendo em conta as condições de contorno na superfície para o campo $\vec{H}_{dmg}(\vec{r})$, podemos definir as densidades volumétrica e superficial de carga magnética, como $\rho_m(\vec{r})$ e $\sigma_m(\vec{r})$ respetivamente. Sabe-se que não existem cargas magnéticas, as quantidades acima referidas são definidas assim, com a finalidade de auxiliar no cálculo do campo $\vec{H}_{dmg}(\vec{r})$. Com a mesma metodologia utilizada para o cálculo do campo elétrico \vec{E} .

$$\begin{aligned}\rho_m(\vec{r}) &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{M}(\vec{r}) \\ \sigma_m(\vec{r}) &= \vec{M}(\vec{r}) \cdot \vec{n}\end{aligned}\quad (2.35)$$

Em 2.35 \vec{n} é o vetor unitário perpendicular à superfície S. A partir destas equações, é possível obter a seguinte expressão para o campo magnetostático, $\vec{H}_{dmg}(\vec{r})$ (Figura 8):

$$\vec{H}_{dmg}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \left[\int_{V'} \frac{(\vec{r} - \vec{r}') \rho_m}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} dV' + \int_{S'} \frac{(\vec{r} - \vec{r}') \sigma_m}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} dS' \right]. \quad (2.36)$$

Esta equação é válida em todos os pontos da amostra. Aquí $|\vec{r} - \vec{r}'|$ é a distância entre o ponto (\vec{r}) onde o campo vai ser calculado e todos os outros campos criados pelos momentos magnéticos (em \vec{r}'). A energia magnetostática pode ser escrita como,

$$\mathcal{U}_{dmg} = \int_V u_{dmg} dV = -\frac{1}{2} \mu_0 \int_V \vec{H}_{dmg} \cdot \vec{M}(\vec{r}) dV. \quad (2.37)$$

O fator 1/2 é adicionado devido à fonte do campo magnetostático, $\vec{H}_{dmg}(\vec{r})$ e à distribuição de magnetização, $\vec{M}(\vec{r})$ no volume da amostra.

2.3.4 Energia Zeeman

O campo *Zeeman* é conhecido em micromagnetismo como o campo aplicado externamente e que pode ser usado para magnetizar a amostra em qualquer direção. Este campo, é comumente utilizado, para obter a curva de histerese típica do material. Dentro do formalismo micromagnético, este campo é geralmente uniforme em a amostra, no entanto, pode variar no espaço e no tempo. Isto é, geralmente, uma boa aproximação, porque em experimentos típicos, a amostra, de tamanho micrométrico, é imersa num campo externo $\vec{H}_{ext}(\vec{r})$, que é considerado uniforme. Já que o campo *Zeeman* $\vec{H}_{ext}(\vec{r})$ é considerado uma variável externa para o sistema, e neste formalismo representa um campo vetorial cuja magnitude e direção são conhecidas, a densidade de energia *Zeeman* pode ser escrita como (50):

$$\mathcal{U}_{Zee} = \int_V u_{Zee} dV = -\mu_0 \int_V \vec{H}_{ext}(\vec{r}) \cdot \vec{M}(\vec{r}) dV. \quad (2.38)$$

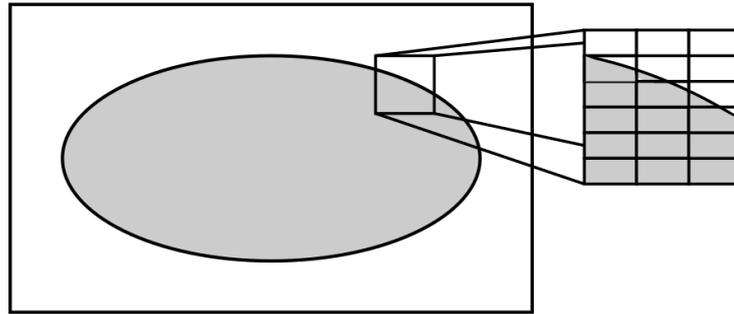
3 Micromagnetismo numérico

Temos visto até agora que o micromagnetismo é um formalismo semiclássico, que permite o estudo do comportamento de materiais magnéticos na nanoescala. Este comportamento é descrito através de equações diferenciais em derivadas parciais não-lineares que, em geral não têm soluções analíticas, com exceção de poucos casos de geometrias muito simples (50–52, 55). Estas equações podem ser resolvidas por técnicas numéricas (45). Pode-se dizer que, em micromagnetismo, existem duas aproximações que podem ser vistas como de natureza oposta. Por um lado, o sistema atômico discreto de momentos magnéticos é aproximado a um sistema contínuo, como descrito no Capítulo 2. Por outro lado, temos que discretizar as expressões contínuas previamente obtidas, a fim de resolver o problema numericamente. Este capítulo é dedicado a explicar como é feita a discretização da geometria e a equação dinâmica, bem como todas as diferentes contribuições ao campo efetivo \vec{H}_{eff} , usando o método de diferenças finitas (MDF) (45), que é utilizado neste trabalho.

3.1 Discretização espacial

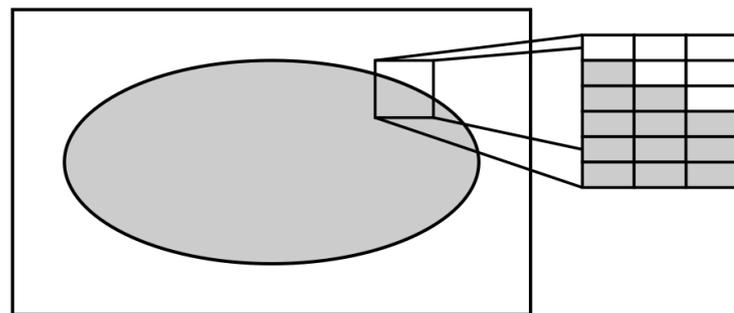
Como é descrito acima, o micromagnetismo requer da resolução de um conjunto de equações diferenciais não-lineares, envolvendo interações de longo alcance (magnetostática), de curto alcance (troca) e local (magnetocristalina, campos externos). Este conjunto de equações não têm soluções analíticas, com exceção de casos muito idealizados, e portanto, tem que ser resolvidas numericamente. Para isto, devemos discretizar espacialmente a amostra magnética. Neste caso, a estrutura passa de um sistema contínuo, em que a variável é o campo vectorial $\vec{M}(\vec{r}) = M_s \vec{m}(\vec{r})$ para um sistema discreto em que as variáveis são os valores da magnetização em cada cela da malha computacional, $\vec{M}(i, j, k) = M_s \vec{m}(i, j, k)$. Existem duas abordagens de discretização comumente usadas em micromagnetismo; o método de elementos finitos (MEF) (56) e o método de diferenças finitas (MDF) (45). O MEF é baseado na interpolação da magnetização utilizando funções com base linear, em uma malha tetraédrica geralmente não uniforme. Por outro lado, o MDF, em materiais ferromagnéticos com geometrias não retangulares, é habitual considerar um domínio computacional retangular que contém a amostra ferromagnética. A magnetização é definida igual a zero no exterior do material e o domínio retangular é discretizado utilizando uma malha uniforme. Isto resulta no surgimento de celas não retangulares na fronteira do material, Figura 9. Na prática o comum é substituir a fronteira da amostra por uma escada (aproximação tipo escada, Figura 10) que introduz erros significativos de cálculo (57). No entanto, na maioria das simulações esses erros são o suficientemente pequenos para ser ignorados. Nos casos em que forem importantes, tem sido desenvolvidas algumas técnicas *ad hoc* (58–60). O MDF é geralmente mais fácil de implementar, em particular, em relação ao malhado da amostra.

Figura 9 – Celas irregulares na fronteira da amostra quando é usada uma discretização uniforme.



Fonte: (57)

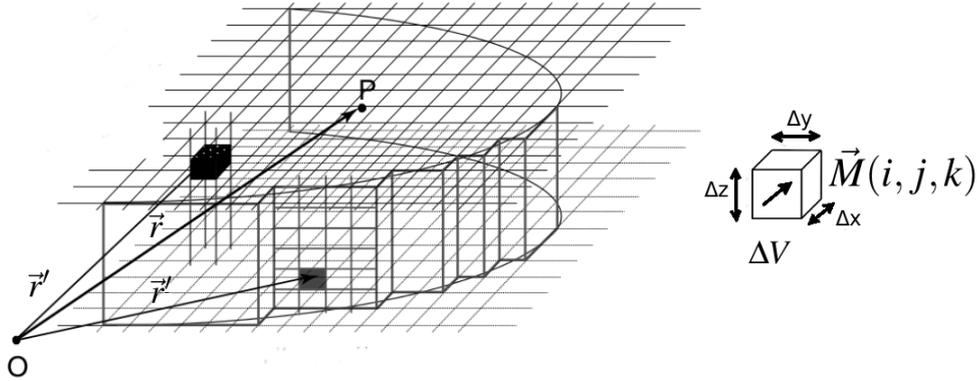
Figura 10 – Aproximação tipo escada: as células irregulares na fronteira foram substituídos por retângulos



Fonte: (57)

Neste trabalho é utilizado o MDF, uma vez que é feita a discretização espacial, algumas considerações devem ser tidas em conta, em relação ao tamanho de cada cela de volume ΔV (Figura 11). Essencialmente, deve ser maior do que a escala atômica, mas não demasiado grande, a fim de cumprir com o formalismo do micromagnetismo mesoscópico. Em outras palavras, deve conter um número suficiente de spins magnéticos, a fim de considerar que o módulo da magnetização M_s é constante em cada cela, mas suficientemente pequena para que a magnetização possa ser considerada uma função contínua da posição no interior do material. Isto conduz ao que se chama o comprimento característico, que em micromagnetismo, é a escala em que a magnetização varia significativamente. Portanto, para resolver um problema numericamente, o tamanho de cada cela computacional, tem que ser suficientemente pequeno em relação ao comprimento característico.

Figura 11 – Representação da discretização da amostra magnética numa malha de células individuais de volume $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$. Cada célula está magnetizada de maneira uniforme com magnetização igual a $\vec{M}(i, j, k) = M_s \vec{m}(i, j, k)$.



Fonte: (45)

Existem, pelo menos, dois comprimentos característicos de escala que são tipicamente utilizados em micromagnetismo. Ainda que um tamanho de cela adequado tem que ser escolhido, dependendo do problema a resolver, estes dois servem como critério. Eles são o comprimento de troca l_{ex} e largura da parede l_w , que são dadas respetivamente por:

$$l_{ex} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \quad (3.1)$$

e

$$l_w = \sqrt{\frac{A}{K}}, \quad (3.2)$$

onde A é a constante de troca e K é a constante de anisotropia magnetocristalina.

Em geral, o comprimento de troca l_{ex} é a escala importante quando a interação magnetostática dipolar domina sobre a anisotropia magnetocristalina. Caso de materiais magnéticos moles, por exemplo. Quando se consideram materiais com alta anisotropia, a largura de parede l_w torna-se a escala de referência. Nos materiais ferromagnéticos são amplamente usadas as escalas l_{ex} e l_w e normalmente variam entre 4 nm e 8 nm. Aqui são definidos alguns limites sobre o tamanho da cela que é utilizada nas simulações. No entanto, isto pode variar, dependendo do tipo de problema a ser resolvido. Com estruturas magnéticas mais complexas a precisão numérica pode forçar o uso de menores tamanhos de células. Por conseguinte os tempos de simulação são maiores.

3.2 Discretização das equações micromagnéticas

Uma vez alcançada a discretização espacial, as equações de equilíbrio 2.6 e dinâmica 2.18 devem ser discretizadas para resolvê-las numericamente. Por isso, esta secção é dedicada a encontrar as contrapartes discretas das funções contínuas que descrevem todas as contribuições para o campo efetivo local \vec{H}_{eff} , em cada cela computacional.

3.2.1 Discretização da energia de troca

A partir da função contínua da densidade de energia de troca na equação 2.24 é possível expressar para cada cela da malha computacional (i, j, k) :

$$u_{exch}(i, j, k) = A \left[\left(\vec{\nabla} m_x(i, j, k) \right)^2 + \left(\vec{\nabla} m_y(i, j, k) \right)^2 + \left(\vec{\nabla} m_z(i, j, k) \right)^2 \right], \quad (3.3)$$

onde

$$\left(\vec{\nabla} m_n \right)^2 = \left(\frac{\partial m_n}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_n}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_n}{\partial z} \right)^2, \quad (3.4)$$

com $n = x, y, z$.

Na aproximação de diferenças finitas, as derivadas são substituídas por relações no centro de cada cela da malha, pelo que a expressão anterior pode ser escrita como:

$$\left(\vec{\nabla} m_n \right)^2 = \left(\frac{\Delta_x m_n}{\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{\Delta_y m_n}{\Delta y} \right)^2 + \left(\frac{\Delta_z m_n}{\Delta z} \right)^2, \quad (3.5)$$

onde Δx , Δy e Δz , são as distâncias espaciais nas três dimensões entre cada cela da malha, enquanto que Δ_x , Δ_y e Δ_z são os operadores de diferenças finitas em cada direção espacial.

Considerando o vector unitário da magnetização $\vec{m}(i, j, k)$ no ponto (i, j, k) , e o primeiro vizinho na direção x , $(i + 1, j, k)$ com magnetização $\vec{m}(i + 1, j, k)$, o primeiro termo de 3.5 pode ser escrito como,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\Delta_x m_x}{\Delta x} \right)^2 &= \left(\frac{m_x(i + 1, j, k) - m_x(i, j, k)}{\Delta x} \right)^2 = \\ &= \frac{m_x^2(i + 1, j, k) - 2m_x(i + 1, j, k)m_x(i, j, k) + m_x^2(i, j, k)}{\Delta x}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Os segundo e terceiro termos de 3.5 podem ser obtidos de um modo semelhante. Dado que $|\vec{m}(i, j, k)| = 1$ para todas as celas, a equação 3.6 torna-se,

$$\left(\frac{\Delta_x m_x}{\Delta x} \right)^2 = \frac{1}{\Delta x^2} [2 - 2m_x(i + 1, j, k)m_x(i, j, k)]. \quad (3.7)$$

Um método semelhante pode ser utilizado para obter as relações para os primeiros vizinhos nas direções positivas de y e z . Naturalmente, os primeiros vizinhos no sentido negativo de cada componente cartesiana também devem ser considerados, e, portanto, a partir de 3.5 (com $n = x$) temos que

$$\begin{aligned} (\Delta m_x)^2 &= \frac{1}{\Delta x^2} [(2 - 2m_x(i+1, j, k)m_x(i, j, k)) + (2 - 2m_x(i-1, j, k)m_x(i, j, k))] + \\ &+ \frac{1}{\Delta y^2} [(2 - 2m_x(i, j+1, k)m_x(i, j, k)) + (2 - 2m_x(i, j-1, k)m_x(i, j, k))] + \\ &+ \frac{1}{\Delta z^2} [(2 - 2m_x(i, j, k+1)m_x(i, j, k)) + (2 - 2m_x(i, j, k-1)m_x(i, j, k))] , \end{aligned} \quad (3.8)$$

e da mesma forma para $(\Delta m_y)^2$ e $(\Delta m_z)^2$. A partir da equação 3.8 a densidade de energia de troca na equação 3.3 em cada ponto da malha pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} u_{exch}(i, j, k) &= \frac{2A}{\Delta x^2} \sum_{i', j', k'}^{fN} [1 - \vec{m}(i, j, k) \cdot \vec{m}(i', j', k')] + \\ &+ \frac{2A}{\Delta y^2} \sum_{i', j', k'}^{fN} [1 - \vec{m}(i, j, k) \cdot \vec{m}(i', j', k')] + \\ &= \frac{2A}{\Delta z^2} \sum_{i', j', k'}^{fN} [1 - \vec{m}(i, j, k) \cdot \vec{m}(i', j', k')] , \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde fN é o número de primeiros vizinhos em cada direção cartesiana. A energia de troca total 2.24 pode ser aproximada a,

$$U_{exch} = \int_V u_{exch} dV \approx \sum_{ijk}^N u_{exch}(i, j, k) \Delta V , \quad (3.10)$$

onde $N = N_x N_y N_z$ é o número total de celas no interior da amostra discretizada.

Na representação discreta da derivada funcional ($\delta/\delta\vec{m} \equiv \partial/\partial\vec{m} - \vec{\nabla} \cdot \partial/\partial(\vec{\nabla}\vec{m})$) torna-se a derivada ordinária ($\partial/\partial\vec{m}$), que é válida, se for considerado que os ângulos entre a magnetização de uma determinada cela e seus vizinhos são pequenos. Por conseguinte, a contribuição ao campo efetivo devido à interação de troca pode ser calculada a partir de,

$$\vec{H}_{exch}(i, j, k) = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\partial u_{ex}(i, j, k)}{\partial \vec{m}(i, j, k)} , \quad (3.11)$$

para obter finalmente,

$$\begin{aligned} \vec{H}_{exch}(i, j, k) &= \frac{2A}{\mu_0 M_s} \left[\frac{\vec{m}(i+1, j, k) + \vec{m}(i-1, j, k)}{\Delta x^2} + \frac{\vec{m}(i, j+1, k) + \vec{m}(i, j-1, k)}{\Delta y^2} + \right. \\ &\left. + \frac{\vec{m}(i, j, k+1) + \vec{m}(i, j, k-1)}{\Delta z^2} \right] . \end{aligned} \quad (3.12)$$

Outros aspetos importantes que resultam da variação da energia de troca, são as condições de fronteira (CF) sobre a superfície da amostra, resultantes das descontinuidades da interação de troca na superfície, conhecida como CF “livre”(45,50). Ao longo deste trabalho é considerada a CF mais simples,

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial \vec{n}} = 0. \quad (3.13)$$

3.2.2 Discretização da anisotropia magnetocristalina

O termo de interação local magnetocristalina é muito fácil de discretizar partindo da função densidade de energia de anisotropia uniaxial 2.27, de onde obtemos

$$u_{an,u}(i, j, k) = K \left[1 - (\vec{m}(i, j, k) \cdot \vec{u}_k)^2 \right], \quad (3.14)$$

onde \vec{u}_k é o vector unitário na direção fácil, e, por conseguinte, toda a energia desta contribuição é dada por,

$$\mathcal{U}_{an,u} = \int_V u_{an,u} dV \approx \sum_{i,j,k}^N u_{an,u}(i, j, k) \Delta V. \quad (3.15)$$

A contribuição da energia magnetocristalina ao campo efetivo pode ser determinada a partir da derivada funcional da densidade de energia de anisotropia uniaxial 3.14:

$$\vec{H}_{an,u}(i, j, k) = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\partial u_{an,u}(i, j, k)}{\partial \vec{m}(i, j, k)} = \frac{2K}{\mu_0 M_s} (\vec{m}(i, j, k) \cdot \vec{u}_k) \vec{u}_k. \quad (3.16)$$

No caso da anisotropia cúbica, o análogo discreto da energia pode ser obtida a partir da equação 2.31:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{an,cub}(i, j, k) \approx \sum_{i,j,k} u_{an,cub}(i, j, k) \Delta V = \sum_{i,j,k} [K_1 (m_x^2(i, j, k)m_y^2(i, j, k) + \\ + m_y^2(i, j, k)m_z^2(i, j, k) + m_x^2(i, j, k)m_z^2(i, j, k))] . \end{aligned} \quad (3.17)$$

A expressão discreta para o campo de anisotropia $\vec{H}_{an,cub}$ obtida a partir da discretização da energia é:

$$\vec{H}_{an,cub}(i, j, k) = -\frac{2D(i, j, k)\vec{m}(i, j, k)}{\mu_0 M_s}, \quad (3.18)$$

onde D é uma matriz diagonal com elementos:

$$D_{11} = K_1[m_y^2(i, j, k) + [m_z^2(i, j, k)]] \quad (3.19)$$

$$D_{22} = K_1[m_x^2(i, j, k) + [m_z^2(i, j, k)]] \quad (3.20)$$

$$D_{33} = K_1[m_x^2(i, j, k) + [m_y^2(i, j, k)]] \quad (3.21)$$

3.2.3 Discretização da interação magnetostática

A fim de discretizar o campo magnetostático $\vec{H}_{dmg}(\vec{r})$, é necessário ter em conta que este campo no ponto $\vec{r}(i, j, k)$ depende da magnetização $\vec{m}(\vec{r}')$ de todos os outros pontos $\vec{r}'(i', j', k')$, no interior do volume da amostra. Assumindo que a magnetização $\vec{m}(i, j, k)$, em cada cela (i, j, k) , da malha é uniforme, o campo magnetostático médio em cada cela é igual a (45):

$$\vec{H}_{dmg}(i, j, k) = -M_s \sum_{\beta}^{(x,y,z)} \sum_{i'j'k'}^N \mathcal{N}_{\alpha\beta}(i-i', j-j', k-k') \cdot \vec{m}_{\beta}(i', j', k'), \quad (3.22)$$

onde a soma é sobre o número total de celas, N e $\mathcal{N}_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}')$ é um tensor simétrico de 3×3 chamado tensor de desmagnetização dado por:

$$\mathcal{N}_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \oint_{S_r} \oint_{S_{r'}} \frac{d\vec{S}_r d\vec{S}_{r'}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (3.23)$$

Aqui S_r e $S_{r'}$ são as superfícies das celas nas posições \vec{r} e \vec{r}' , enquanto \vec{S}_r e $\vec{S}_{r'}$ são os vetores correspondentes à superfície $\vec{S}_r = S_r \vec{n}$ e $\vec{S}_{r'} = S_{r'} \vec{n}$, sendo \vec{n} a normal unitária. Como foi indicado em 3.22, a avaliação do campo magnético estático \vec{H}_{dmg} requer a soma em todas as celas no interior da amostra. Isto significa, que temos um total de N^2 operações. Note-se que o número de operações é multiplicado por três porque cada componente cartesiana do campo é avaliada separadamente. Os demais termos que contribuem para a equação dinâmica requerem, apenas, de N operações. Uma vez que são interações locais ou de curto alcance como a interação de troca. Como resultado, simulações compostas por um grande número de celas tornam muito difícil de avaliar a equação 3.22 diretamente. No entanto, já que o tensor de desmagnetização $\mathcal{N}_{\alpha\beta}$ depende apenas da posição relativa entre as celas, $(\vec{r} - \vec{r}')$ e da geometria da amostra, a equação 3.22 pode ser reconhecida como uma convolução discreta de $\mathcal{N}_{\alpha\beta}$ com \vec{m} . Por um lado, isto significa que $\mathcal{N}_{\alpha\beta}$ só precisa ser calculado uma vez no início da simulação. Por outro lado, o campo magnetostático pode ser calculado de forma mais eficiente, utilizando as técnicas da Transformada Rápida de Fourier (FFT) (61). A razão pela qual é mais eficiente utilizar FFTs é porque a convolução se torna um produto simples no espaço de Fourier. Brevemente é discutido abaixo.

Cada coordenada cartesiana do campo magnetostático 3.22 $\vec{H}_{dmg,n}, (n \equiv x, y, z)$ tem a forma de uma convolução discreta no espaço de coordenadas tridimensional. Pelo teorema da convolução é possível o seguinte produto no espaço de Fourier:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[H_{dmg,x}(i, j, k)] &\equiv \tilde{H}_{dmg,x}(k_x, k_y, k_z) = \mathcal{F}[\mathcal{N}_\beta(i, j, k)] \mathcal{F}[m_\beta(i, j, k)] = \\ &= \tilde{\mathcal{N}}_{\alpha\beta}(k_x, k_y, k_z) \tilde{m}_\beta(k_x, k_y, k_z). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Neste caso (k_x, k_y, k_z) são as coordenadas no espaço de Fourier. As componentes $H_{dmg,y}$ e $H_{dmg,z}$ são calculadas de um modo semelhante. Portanto, a fim de calcular o campo magnetostático \vec{H}_{dmg} primeiramente é necessário determinar o tensor de desmagnetização $\mathcal{N}_{\alpha\beta}$, realizar a sua FFT e armazená-la em memória. Uma vez que a magnetização em cada ponto da malha é conhecida, a FFT é também realizada, seguido pelo produto no espaço de Fourier, tal como é descrito em 3.24. Para recuperar o valor do campo magnetostático, ao espaço “real” é realizada a FFT inversa de 3.24:

$$H_{dmg,x}(i, j, k) \equiv \mathcal{F}^{-1}[\tilde{H}_{dmg,x}(k_x, k_y, k_z)]. \quad (3.25)$$

No total, temos seis FFT (três diretas para cada componente cartesiana de \vec{m} no espaço de Fourier, e três inversas para cada um deles, para trazer o resultado de \vec{H}_{dmg} de volta para o espaço “real”, somado a três produtos para cada componente de \vec{H}_{dmg} 3.24. Isto significa que, usando o método de FFT, o número de operações necessárias para calcular \vec{H}_{dmg} é aproximadamente $N \log_2 N$ para cada FFT. Isto representa uma melhoria considerável em comparação com as N^2 operações que resultam quando é avaliada diretamente a equação 3.22 (Figura 12). Precisamos ter cuidado ao aplicar esta técnica, já que a convolução realizada pelo método FFT supõe que os dados de magnetização presentes na região de cálculo se repitam periodicamente no espaço infinito. Isto pode ser evitado utilizando a técnica de preenchimento com zeros (*zero-padding*) (62). Podemos utilizar aplicando à região física onde os dados de magnetização estejam no espaço de Fourier. Esta técnica é implementada, adicionando celas computacionais, em torno da região física de zero magnetização. De modo que o número total de celas seja, pelo menos, duas vezes maior que a região física em cada direção. Isto é, $K_x \geq 2N_x$, $K_y \geq 2N_y$ e $K_z \geq 2N_z$ no espaço de Fourier. Ao fazer este procedimento, podemos garantir que a periodicidade da região aumentada, não afeta a região física quando se avalia a FFT.

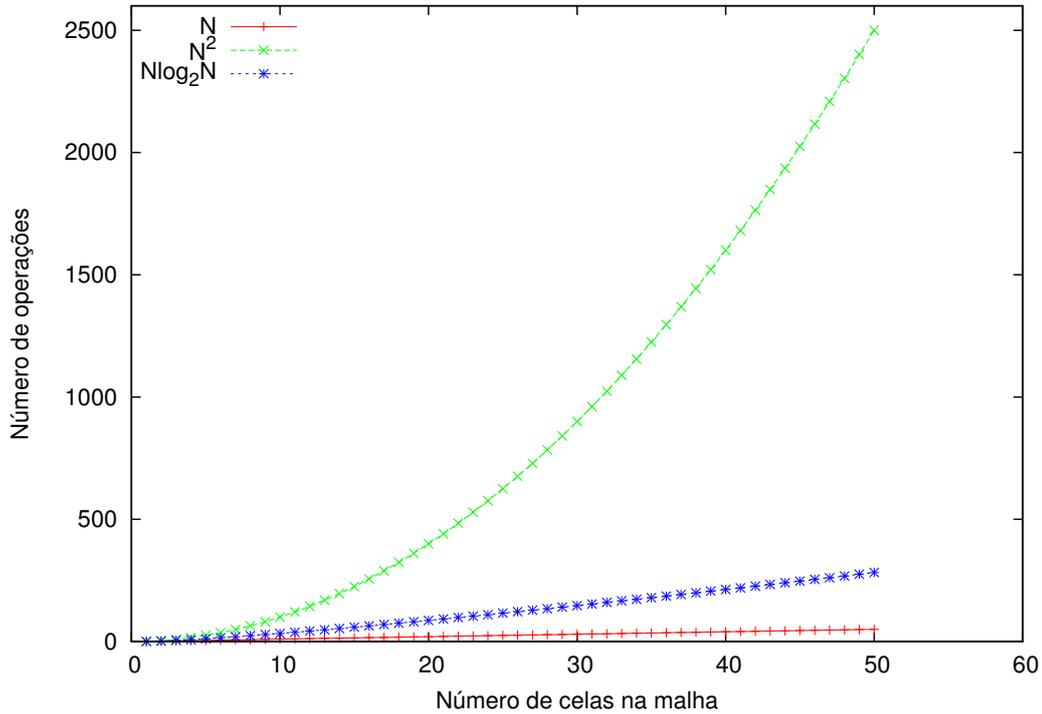
A energia magnetostática pode ser calculada numericamente a partir da equação 2.37, sabendo que, em cada cela, a densidade de energia é,

$$u_{dmg}(i, j, k) = -\frac{1}{2} \mu_0 M_s \left[\vec{H}_{dmg}(i, j, k) \cdot \vec{m}(i, j, k) \right], \quad (3.26)$$

e, por conseguinte, a energia magnetostática de todo o sistema é dada por

$$\mathcal{U}_{dmg} = \int_V u_{dmg}(\vec{r})dV \approx \sum_{i,j,k}^N u_{dmg}(i,j,k)\Delta V. \quad (3.27)$$

Figura 12 – Comparação do número de operações necessárias em uma amostra com um malhado de 50 células. Por substituição direta de \vec{H}_{dmg} com N^2 operações, utilizando a FFT com $N\log_2 N$ operações e os termos locais de \vec{H}_{eff} , com N operações.



Fonte: Produzido pelo autor

3.2.4 Discretização da interação Zeeman

Como acontece com a interação magnetocristalina, a interação *Zeeman* é devida a um campo magnético externo. Por conseguinte, é local, portanto a discretização da sua densidade de energia e a contribuição ao campo efetivo é obtido sem muita dificuldade. Então, a densidade de energia *Zeeman* do sistema pode ser calculada numericamente a partir da equação 2.38, obtendo-se:

$$\mathcal{U}_{Zee} = \int_V u_{Zee}(\vec{r})dV \approx -\mu_0 M_s \sum_{i,j,k}^N \vec{H}_{ext}(i,j,k) \cdot \vec{m}(i,j,k), \quad (3.28)$$

onde o módulo \vec{H}_{ext} do campo é escolhido pelo usuário no experimento da simulação e dado como parâmetro inicial.

3.3 Solução numérica da equação dinâmica de *Landau-Lifshitz-Gilbert*

Para resolver numericamente a equação de LLG, com as componentes de campo efetivo, diferentes algoritmos para resolução de equações diferenciais ordinárias podem ser implementados (62). Um ponto importante a considerar é que, na tentativa de resolver a equação LLG, a precisão tem que ser preservada tanto no espaço como no tempo. Dentro dos algoritmos podemos encontrar, o esquema de integração semi-implícito de *Crank-Nicholson* (45), os algoritmos preditor-corretor e algoritmo de *Runge-Kutta*(62, 63). O método de *Runge-Kutta* é um dos métodos mais utilizados para integrar equações diferenciais ordinárias, é um algoritmo iterativo de passo simples, ou seja, que pode ser simbolizado como:

$$y_{n+1} = G(y_n), \quad n \leq 0. \quad (3.29)$$

Isto significa que, no processo iterativo, a solução no ponto $n + 1$, apenas dependerá da solução anterior no ponto n . Neste método, o problema de encontrar as derivadas parciais da função $f(x, y)$ consiste em avaliar a função $f(x, y)$ em vários pontos (63). Um esquema de ordem 4 (onde são realizadas 4 avaliações da função $f(x, y)$) pode ser:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, y_n) \\ k_2 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right) \\ k_3 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right) \\ k_4 &= hf(x_n + h, y_n + k_3) \\ y_{n+1} &\approx y_n + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} + O(h^5), \end{aligned} \quad (3.30)$$

onde $f(x_n, y_n)$ é a solução da equação diferencial, h é o tamanho do passo, que tem a função do ponto n a $n + 1$, e $O(h^5)$ é o termo de erro, o qual pode ser estimado, por cálculo duplo utilizando (63):

$$e_h = \frac{y_h - y_{2h}}{15}. \quad (3.31)$$

Escrevendo este algoritmo com o formalismo micromagnético para a equação 2.18,

temos:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= \delta t f(t, \vec{m}(t)) \\
 k_2 &= \delta t f\left(t + \frac{\delta t}{2}, \vec{m}(t) + \frac{k_1}{2}\right) \\
 k_3 &= \delta t f\left(t + \frac{\delta t}{2}, \vec{m}(t) + \frac{k_2}{2}\right) \\
 k_4 &= \delta t f(t + \delta t, \vec{m}(t) + k_3) \\
 \vec{m}(t + \delta t) &\approx \vec{m}(t) + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} + O(h^5).
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

Aqui $f(t, \vec{m}(t))$ é o membro direito de 2.18. Note-se que o campo efetivo $\vec{H}_{eff}(t)$, é também uma função de $\vec{m}(t)$, devido às interações de troca, magnetocristalina, magnetostática e *Zeeman*. O que significa que em cada etapa k_n , \vec{H}_{eff} deve ser calculado antes da avaliação de $f(t, \vec{m}(t))$. Também deve ser considerado que o método de *Runge-Kutta* não mantém o módulo da magnetização constante. Portanto, a magnetização deve ser renormalizada em cada passo k_n . Resolvendo a equação 3.32 para cada cela da amostra discretizada, é obtida a solução numérica da equação dinâmica 2.17 ou 2.18 para cada instante δt .

4 Simulação micromagnética utilizando *Object Oriented Micromagnetic Framework* (OOMMF)

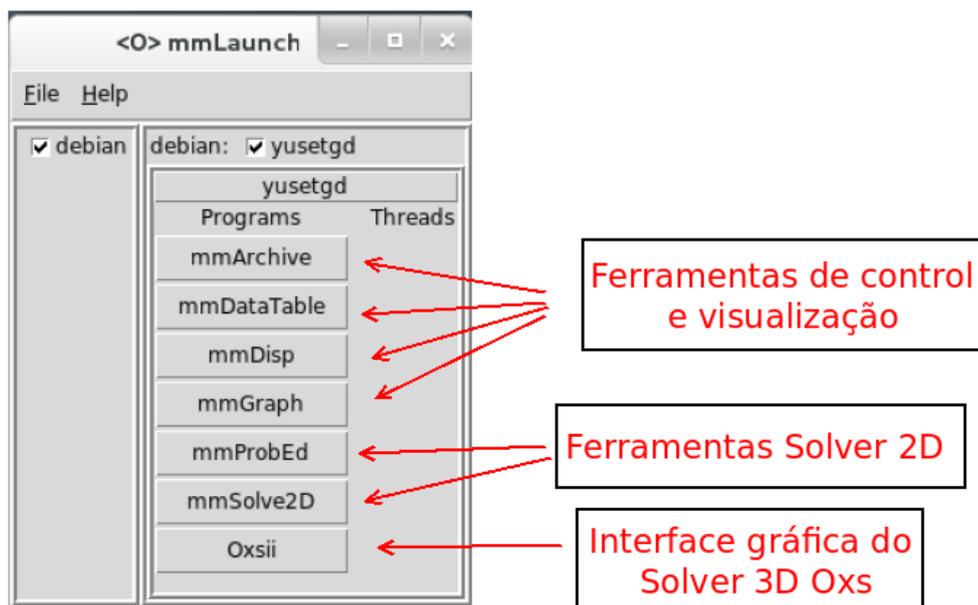
4.1 Simuladores micromagnéticos

Um simulador micromagnético é um software computacional especializado, que resolve numericamente as equações diferenciais, que descrevem o modelo micromagnético. Pode-se utilizar em uma diversidade de geometrias em amostras magnéticas. Existe uma variedade de simuladores micromagnéticos que podem ser classificados pelo método de discretização utilizado: simuladores baseados no MDF e no MEF. Podem também ser classificados pela licença de uso: de código aberto ou comerciais (46, 64–72). De maneira geral podem-se destacar os simuladores OOMMF, MAGPAR, NMAG e SIMULMAG. Na discretização, os simuladores baseados em MDF como o OOMMF (46) são, em geral, mais rápidos e precisam menos memória que as ferramentas baseadas em MEF (45) como os simuladores Magpar (71) e NMAG (72). Por outra parte os simuladores baseados em MDF são utilizados para amostras onde a forma pode ser descrita por uma malha cúbica regular. A eleição de um simulador depende dos requisitos de precisão e rendimento – tempo de execução do problema concreto. Além do método de discretização e a licença de usuário, outros fatores influenciam na eleição de um simulador. Pode ser o suporte para scripts, suporte para a execução em paralelo e a linguagem de programação utilizada. Em este trabalho foi utilizado o simulador OOMMF, que é um padrão em simulações micromagnéticas. É um programa de domínio público que utiliza o método de discretização em diferenças finitas e calcula o campo de desmagnetização utilizando o algoritmo da FFT. Suporta a programação em paralelo *multithreads* em estações de trabalho multinúcleo (não suporta a paralelização em *clusters*), além de ter suporte para *scripts*. Experimentalmente foi avaliado, e citado em mais de 1800 publicações científicas (73).

4.2 Object Oriented Micromagnetic Framework (OOMMF)

O OOMMF acrônimo de (*Object Oriented Micromagnetic Framework*) é um simulador micromagnético desenvolvido pelo NIST (46). Está desenhado para ser portátil, flexível e extensível, com uma interface gráfica fácil de usar. O código está escrito em C++ (74) e *TCL/TK* (75). Pode ser utilizado em uma ampla gama de plataformas; *Unix*, *Windows NT* e *Windows 9X*. Não está estruturado em um só programa. É uma coleção de programas, cada um especializado em tarefas específicas como parte de um sistema de simulação micromagnética.

Figura 13 – Lançador(Launcher) da Interface gráfica do usuário (GUI) do OOMMF.



Fonte: Produzido pelo autor

Uma vantagem desta arquitetura modular é que cada programa pode ser melhorado ou substituído sem necessidade de redesenhar o sistema como um todo. Além da ferramenta Oxs, que executa a simulação, o OOMMF oferece ferramentas de controle e visualização que se comunicam através de *TCP/IP*. A ferramenta Oxs está escrita principalmente em *C++* e as outras ferramentas, além da interface gráfica de usuário (GUI) estão escritas em *TCL/TK*. O código pode ser modificado em 3 níveis diferentes:

- No nível superior, os programas individuais interagem através de protocolos bem definidos por conectores de rede (*network sockets*). Podem ser conectados em diversas formas desde a interface de usuário (GUI). Figura 13
- O segundo nível de modificação é mediante a utilização do *script TCL/TK*. Alguns módulos permitem aos *scripts TCL/TK* ser importados e executados e os *scripts* de alto nível são relativamente fáceis de modificar ou substituir.
- No nível mais baixo, é proporcionada a fonte em *C++* e pode ser modificada.

O Oxs (OOMMF eXtensible Solver) é o motor de cálculo micromagnético extensível, capaz de resolver problemas definidos em redes de três dimensões de celas retangulares que contêm os spins tridimensionais. Há duas interfaces proporcionadas a Oxs: a interface interativa (Oxsii) Figura 13, que pode ser controlada através de uma GUI, e o modo *batch* (Boxsi), que é utilizado através da linha de comandos, que é adequada para o uso do *scripts shell*.

A definição do problema em Oxs se consegue a partir de arquivos de entrada em formato .MIF. Uma simulação em Oxs é feita como uma coleção de objetos *Oxs_Ext* (extensões Oxs).

Estes objetos se definem por meio de blocos específicos no arquivo de entrada MIF. Os objetos *Oxs_Ext* disponíveis em OOMMF podem-se organizar em: *Atlases*, *Malhas*, *Energias*, *Evolvers*, *Drivers*, *Objetos de campo escalar*, *Objetos de campo vetorial* e *Classes de suporte para MIF*:

- *Atlases*: A geometria da simulação se especifica em *Oxs* através do *atlas*, que divide o domínio em um ou mais subconjuntos disjuntos chamados regiões. Os tipos de *atlas* disponíveis são: *Oxs_BoxAtlas*, *Oxs_ImageAtlas*, *Oxs_MultiAtlas*, *Oxs_ScriptAtlas* e *Oxs_EllipsoidAtlas*. O *atlas* mais utilizado é o *Oxs_BoxAtlas* para o caso de geometrias simples. O *Oxs_ImageAtlas* se utiliza para dar entrada a geometrias por meio de imagens e está limitado ao caso de duas dimensões. Em *Oxs_ScriptAtlas* se define a geometria por meio do *scripts TCL*.
- *Malhas*: É definida a discretização que é utilizada na simulação. Deve haver exatamente uma malha declarada pelo arquivo MIF. A única malha padrão disponível é a *Oxs_RectangularMesh*.
- *Energias*: Nesta parte se definem os termos energéticos da simulação. Cada termo de energia deve ser declarado em um bloco específico, de forma independente, ou seja, não deve se declarar dentro de outro objeto *Oxs_Ext*. Não existe limitação no número de termos energéticos que se podem declarar dentro de um arquivo MIF. No OOMMF se encontram disponíveis os termos de Energia magnetocristalina, Energia de intercâmbio, Energia magnetostática e Energia *Zeeman*.
- *Evolvers*: São responsável por atualizar a configuração da magnetização de uma iteração para a seguinte. Há dois tipos de *Evolvers*; *Evolvers* de tempo, para estudar a dinâmica de LLG e *Evolvers* de minimização, que localizam os mínimos locais na superfície de energia através de técnicas direitas de minimização. Os *Evolvers* são controlados pelos *Drivers* e devem coincidir com o tipo de *Drivers* adequado, por exemplo, *Evolvers* de tempo devem estar vinculados com os *Drivers* de tempo.
- *Drivers*: Enquanto os *Evolvers* são responsáveis por mover a simulação para frente em passos individuais, os *Drivers* coordenam a ação do *Evolver* na simulação como um todo, mediante a agrupação das iterações em tarefas, etapas e corridas. As tarefas são pequenos grupos de iterações que se podem completar sem afetar a resposta da interface de usuário. As etapas são unidades mais grandes especificadas pela descrição do problema no MIF; em particular, não se espera que os parâmetros do problema mudem de forma descontínua dentro de uma etapa. A corrida é a sequência completa das etapas, em um problema de princípio até o fim. O *Drivers* deteta quando etapas e corridas terminam, tendo em conta os critérios especificados na descrição do problema no MIF. No *Oxs* existem dois tipos de *Drivers*, *Drivers* de tempo e *Drivers* de minimização.

- Os *Objetos de campo* devolvem valores (escalar ou vetorial) como uma função da posição. Estes se usam com frequência como objetos no interior de blocos específicos de outros objetos *Oxs_Ext*. São utilizados para inicializar espacialmente quantidades variáveis, tais como, parâmetros do material como as configurações iniciais de magnetização.
- *Classes de Suporte para MIF*: Existe o objeto *Oxs_LabelValue*. A cadeia para um bloco específico de objetos *Oxs_LabelValue* é uma lista arbitrária *TCL* de pares de elementos. O primeiro elemento de cada par se interpreta como uma etiqueta, o segundo como o valor. Pode-se utilizar, por exemplo, um objeto *Oxs_LabelValue* para manter valores comuns em qualquer bloco de uma *Oxs_Ext* em arquivos diferentes.

4.2.1 Pós-processamento

Para visualizar os resultados da simulação, os dados dos mapas vectoriais de magnetização se transformam do formato de OOMMF (OMF/OVF) ao formato *Visualisation Toolkit (VTK)* (76), que é um padrão aberto para a visualização. Para isso utilizamos a ferramenta *ovf2vtk* (77). Os resultados são visualizados com o *MayaVi* (78), que é uma ferramenta de visualização de dados desenvolvida inicialmente para ajudar à visualização de entornos computacionais da dinâmica de fluidos; *MayaVi* depende de *VTK*. Também se utiliza *OOMMFTools*, que é uma ferramenta desenhada para ajudar ao pós-processamento no OOMMF, com uma interface gráfica intuitiva (GUI) (79) e que contem um conjunto de utilitários para converter os formatos de saída de arquivos vectoriais e arquivos ODT. Além disso são utilizados o *Gnuplot* (80) e o *Qtplot* (81).

4.2.2 Código micromagnético da simulação

O código micromagnético da simulação foi gerado a partir do segundo nível, ou seja de um *script* baseado em *TCL/TK*. Foi feita a simulação dos ciclos de histerese com a utilização do *Evolver* e *Driver* de minimização (Figura 15). Também foi realizada a simulação da dinâmica da magnetização com a utilização dos *Evolver* e *Driver* de tempo.

A continuação se mostram fragmentos do código da simulação estática para obter os ciclos de histerese de um arranjo hexagonal de 100 nanocascas magnéticas de Ni.

Figura 14 – Fragmento do código micromagnético da simulação estática de um arranjo hexagonal de 100 nanocascas magnéticas de Ni. Mostram-se o *Atlas*, *Malhado* e os *termos de Energia* envolvidos.

```

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

Specify Oxs_MultiAtlas:atlas [subst {
  $regions_list $regions_list1
  xrange {0 $xmax}
  yrange {0 $ymax}
  zrange {0 $zmax}
}]

Specify Oxs_RectangularMesh:mesh [subst {
  cellsize {$cellsize $cellsize $cellsize}
  atlas :atlas
}]

Specify Oxs_AtlasVectorField:anisotropy_directions1 [subst {
  atlas :atlas
  norm 1.0
  default_value {0 1 0} comment {Dummy value for non-magnetic matrix}
  values { $anisaxis_value_list1 }
}]

Specify Oxs_AtlasVectorField:anisotropy_directions2 [subst {
  atlas :atlas
  norm 1.0
  default_value {1 0 0} comment {Dummy value for non-magnetic matrix}
  values { $anisaxis_value_list2 }
}]

# Energia de Anisotropia cúbica
Specify Oxs_CubicAnisotropy {
  K1 -5.7e3
  axis1 :anisotropy_directions1
  axis2 :anisotropy_directions2
}

# Energia de troca
Specify Oxs_UniformExchange {
  A 9e-12 comment {A here is a single scalar, not a scalar field}
}

Specify Oxs_UZeeman [subst {
  multiplier [expr {0.001/$mu0}]
  Hrange {
    { $Hx 0 $Hz -$Hx 0 -$Hz 150}
    { -$Hx 0 -$Hz $Hx 0 $Hz 150}
  }
}]

Specify Oxs_Demag {}

```

Definição da geometria da simulação.

Atlases. Neste caso foi utilizado o objeto Oxs_Multiatlas

Malhado.

Com o objeto Oxs_AtlasVectorField definem-se as direções da anisotropia.

Energia de anisotropia Cúbica.

Energia de Troca.

Energia Zeeman. Campo externo aplicado

Energia Magnetostática.

Figura 15 – Fragmento do código micromagnético da simulação estática de um arranjo hexagonal de 100 nanocascas magnéticas de Ni. Particularmente mostram-se a forma de definir o *Evolver* e o *Driver* de minimização, além dos parâmetros da simulação como a magnetização de saturação M_s e a magnetização inicial \vec{m}_0

```
Specify Oxs_CGEvolve:evolve {
  energy_precision 2e-10
}

# Com objeto Oxs_AtlasVectorField se pode definir magnetização inicial.

for {set i 0} {$i<$region_count} {incr i} {
  for {set j 0} {$j<$region_county} {incr j} {

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

Specify Oxs_MinDriver [subst {
  evolver :evolve
  stopping_mxHxm 0.1
  mesh :mesh
  Ms { Oxs_AtlasScalarField {
    atlas :atlas
    default_value 490e3
    values {
      universe 0.0
    }
  }
}
}
m0 :m0
}]

# Arquivo de saída

Destination archive mmArchive

Schedule DataTable archive Stage 1
Schedule Oxs_MinDriver::Magnetization archive Stage 1

# Schedule "evolver :evolve" archive Stage 1
```

Evolver de minimização.

Driver de minimização. Também contem alguns parâmetros do material. M_s e m_0

Aquí se especifica a saída.

Fonte: Produzido pelo autor

5 Resultados e discussão

5.1 Considerações iniciais da simulação

Considerando um arranjo hexagonal de 100 nanocascas magnéticas (Figuras 16 e 17), neste trabalho são simulados dois sistemas: um sistema formado por nanocascas de Ni e outro sistema formado por nanocascas de Co. As nanocascas têm um raio exterior fixo $R_e = 20\text{nm}$ e a espessura $R_e - R_i$ foi variada de acordo com a razão $\varepsilon = R_i/R_e$ onde R_i é raio interior, com $0 \leq \varepsilon \leq 0.8$, Figura 18. Para simular os ciclos de histerese e a reversão da magnetização assumimos que as esferas estão unidas. Além disso, se considerou ligação por interação de troca e contribuição magnetocristalina. No caso do Ni esta contribuição é cúbica com direções de anisotropia ao longo do eixo X, Y e Z e uniaxial no caso do Co com a direção fácil ao longo do eixo Z. Também incluímos interação *Zeeman* ao incidir um campo magnético externo e a contribuição magnetostática (desmagnetização). Não se consideram efeitos térmicos nas simulações. As propriedades intrínsecas dos materiais e parâmetros da simulação se mostram na Tabela 1. As dimensões do arranjo são $420 \times 351 \times 40\text{nm}^3$ e o malhado tem 110250 celas computacionais.

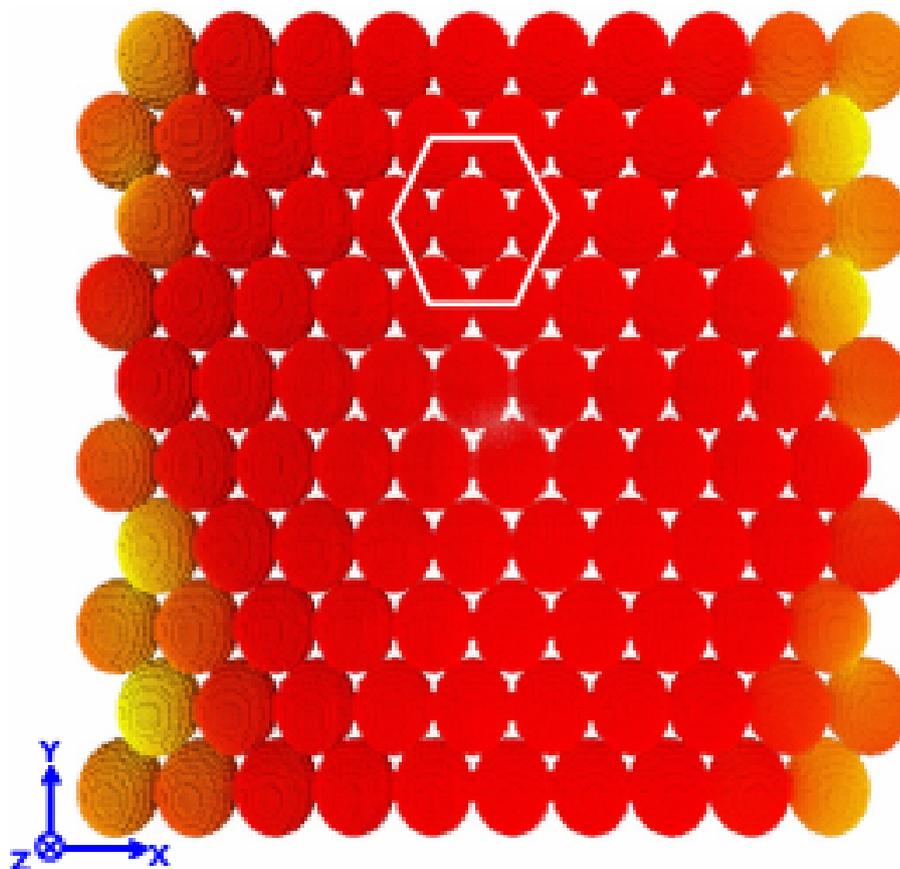
Tabela 1 – Propriedades intrínsecas dos materiais e parâmetros da simulação.

Materiais	$M_s(\text{A/m})$	$A(\text{J/m})$	$K_1(\text{J/m}^3)$	$l_{ex}(\text{nm})$	Malhado(nm)		
					ΔX	ΔY	ΔZ
Ni	490×10^3	9×10^{-12}	-5.7×10^3	7.72	4	3.35	4
Co	1400×10^3	30×10^{-12}	520×10^3	4.94	4	3.35	4

Fonte: Produzido pelo autor.

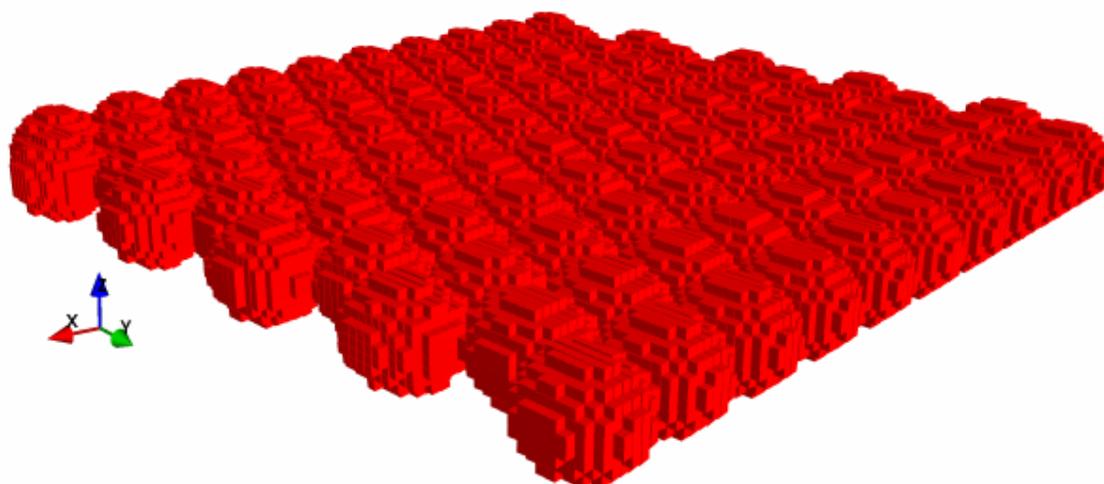
Na Figura 19 se mostra o efeito do malhado sobre a geometria da esfera oca ao utilizar o MDF implementado no OOMMF (46) por uma malha retangular. Apesar que o esquema computacional geral é robusto, um erro numérico é inevitavelmente introduzido pelo efeito da rugosidade da superfície, resultante da natureza discreta das celas da rede, como discutido em (82, 83). Ele torna-se mais significativo à medida que a espessura da casca reduz ao valor comparável ao tamanho da cela. A eleição do malhado na simulação (Tabela 1) é coerente com a capacidade de cálculo e com o *hardware* disponível. Os ciclos de histereses som obtidos por um algoritmo de minimização do gradiente conjugado que utiliza o método de *Fletcher-Reeves* implementado no *evolver* de minimização do OOMMF (46). A dinâmica da magnetização foi simulada pela solução das equações de LLG 2.17 por meio do *Evolver* de tempo implementado no OOMMF (46) que integra as equações pelo método de *Runge-Kutta-Fehlberg* (84, 85).

Figura 16 – Arranjo hexagonal de 100 nanocascas magnéticas.



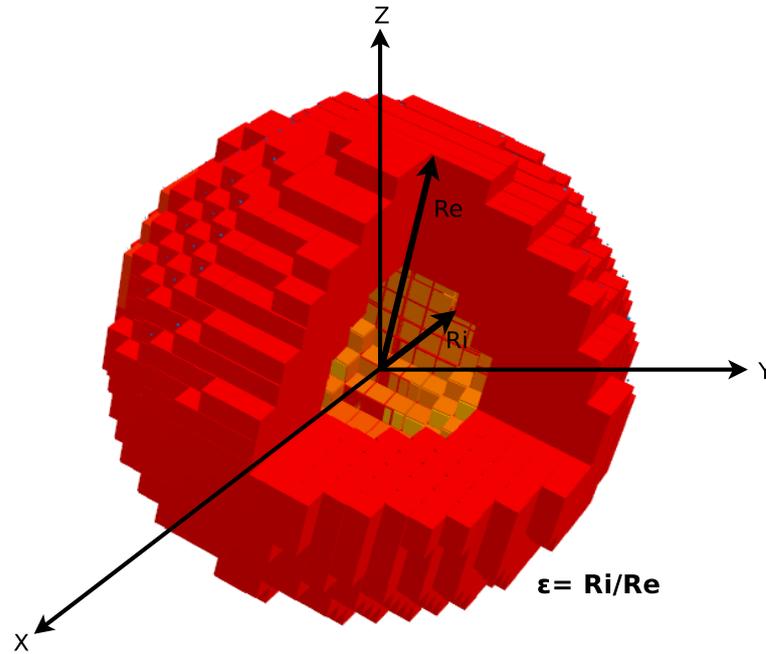
Fonte: Produzido pelo autor

Figura 17 – Arranjo hexagonal de 100 nanocascas magnéticas, depois de gerado o malhado pelo MDF.



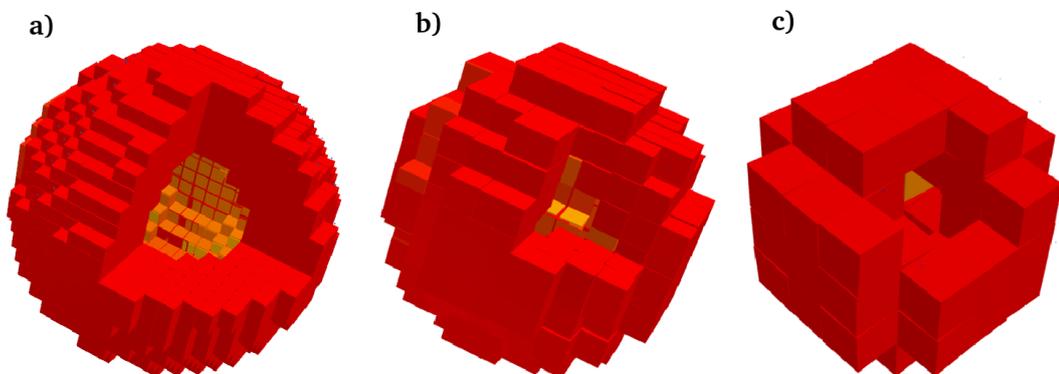
Fonte: Produzido pelo autor

Figura 18 – Geometria de uma nanocasca magnética, mostrando os raios interno e externo.



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 19 – Efeito do tamanho da malha na geometria da casca esférica. a) Malha de 2 nm, b) Malha de 4 nm, c) Malha de 8 nm.



Fonte: Produzido pelo autor

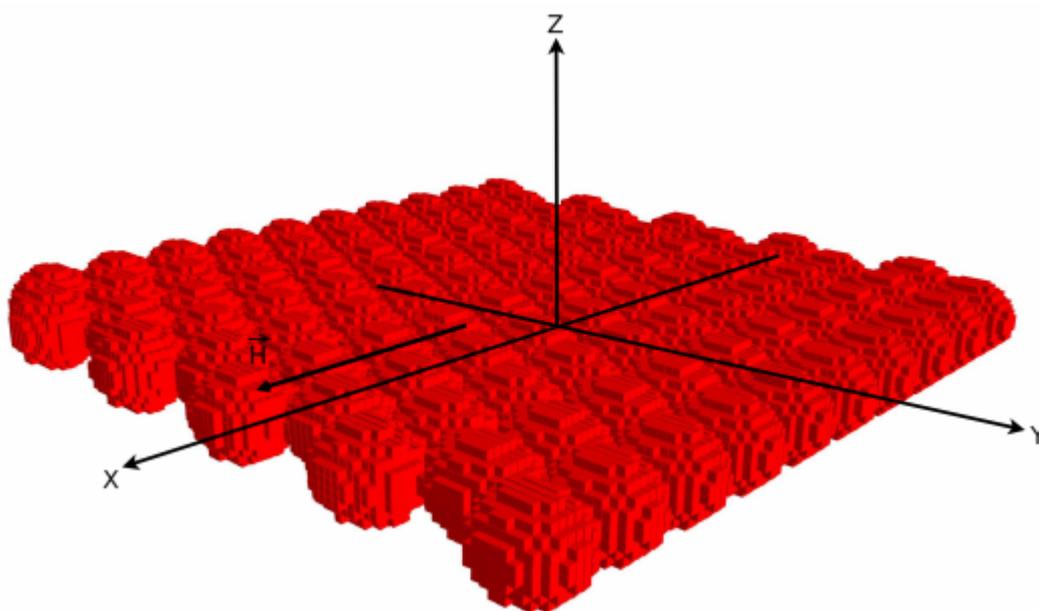
5.2 Resultados da simulação do sistema de 100 nanocascas magnéticas de Ni

5.2.1 Simulação estática

Foram simulados os ciclos de histerese tendo em conta o campo externo aplicado paralelo ao plano do arranjo (na direção do eixo X) Figura 20. Também se simularam os ciclos de histerese variando o ângulo de aplicação do campo no plano XZ como se mostra na Figura 21. A intenção inicial deste estudo é devido ao fato de que esperamos que com a variação da espessura da casca de Ni, os efeitos dipolares começam gerar efeitos consideráveis. Em muitos experimentos são fabricados nanocascas que dependendo da espessura podem apresentar valores elevados da coercividade e do produto BH_{max} .

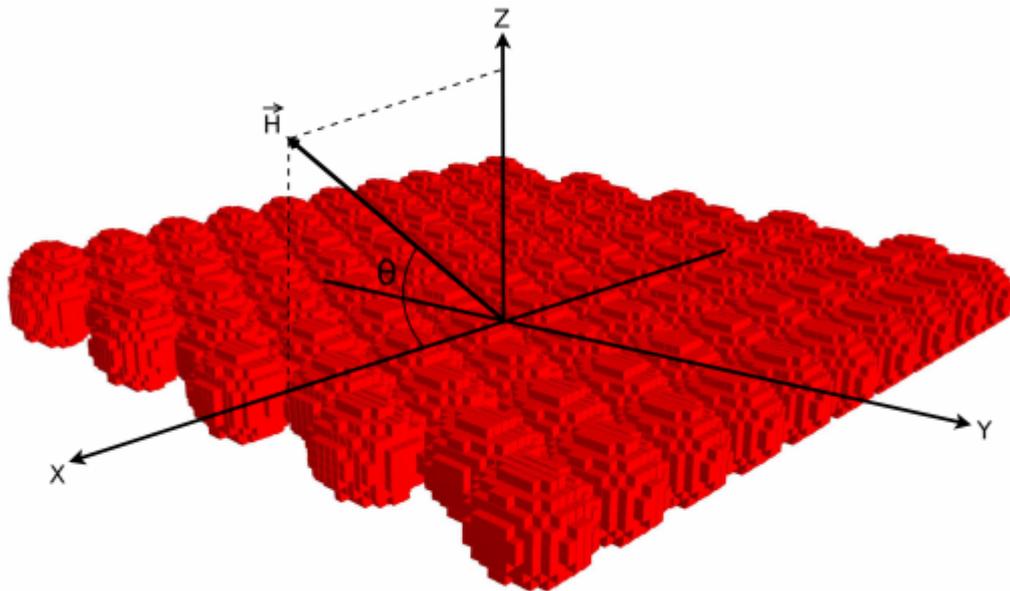
O primeiro estudo é feito com o campo no plano do arranjo porque na maioria dos experimentos esta configuração é favorável nas aplicações. Mesmo assim fizemos um estudo da dependência da coercividade com o ângulo. A intenção desde estudo é mais por motivos acadêmicos. Isso porque a dependência da espessura da casca e do ângulo do campo aplicado é muito comum esperar as diversas formas de reversão da magnetização já previstas. Tentamos com este estudo, fazer uma análise do formato de curva de magnetização, que é um verdadeiro sinal do tipo de solução na inversão dos momentos. Nas seções seguintes apresentamos os resultados de cada estudo.

Figura 20 – Esquema do campo magnético aplicado atuando paralelo ao eixo X.



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 21 – Esquema do campo magnético aplicado no plano XZ formando um ângulo θ com o eixo X.



Fonte: Produzido pelo autor

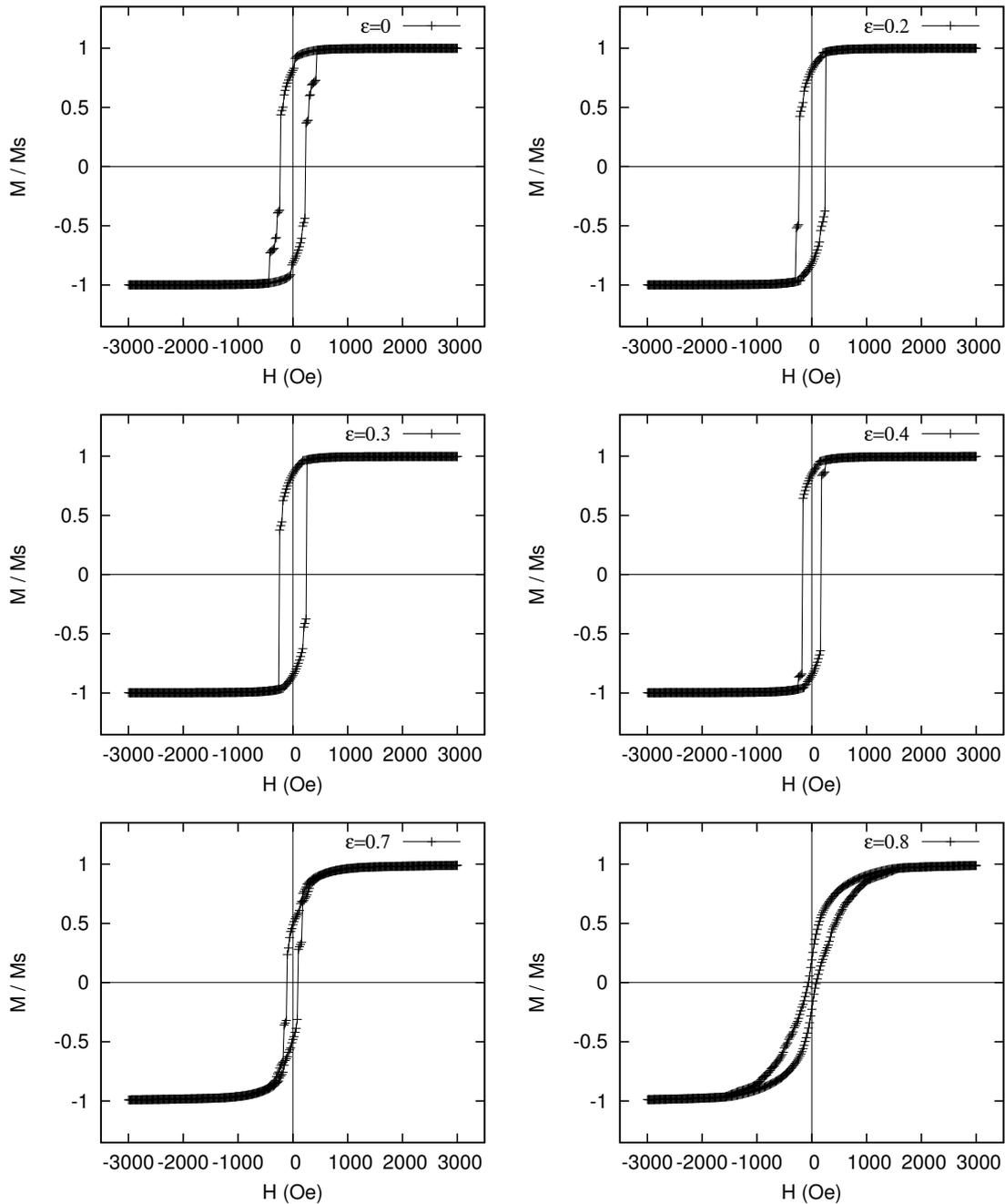
5.2.1.1 Simulação para o campo aplicado paralelo ao plano do arranjo

Na Figura 22, mostram-se os ciclos de histerese simulados com o campo aplicado paralelo ao arranjo de 100 nanocascas magnéticas de Ni, para diferentes valores da espessura, ε . Pode-se observar que com a diminuição da espessura a coercividade diminui também (Figura 23). O arranjo apresenta uma elevada remanência $M_r/M_s = 0.8$, para $0 \leq \varepsilon \leq 0.6$, que diminui drasticamente em $\varepsilon = 0.7$ e $\varepsilon = 0.8$ a 0.48 e 0.19 respectivamente (Figura 24).

Os valores da coercividade obtidos, na faixa 61.9 – 230.8 Oe, são muito maiores do que o valor do Ni *bulk* ($H_c = 0.7$ Oe) (86) e que o pó de cascas de Ni de tamanho sub micrométrico ($H_c = 32.3$ Oe) (25). Estes valores estão no intervalo dos valores reportados para o pó de esferas ocas de Ni (102 Oe) (27) e para arranjos de esferas ocas de tamanho nanométrico (104 Oe) (29). O aumento da coercividade para o arranjo de esferas ocas pode ser associado à sua estrutura. Este comportamento foi reportado para estruturas de rede ferromagnéticas 2D, e réplicas ordenadas 3D de Ni, o que foi atribuído ao *pinning* da parede de domínio pela estrutura da rede (87). No nosso caso, pela semelhança da estrutura da rede ao arranjo das nanocascas esféricas ocas, para os valores da espessura, pode facilmente levar ao *pinning* da parede de domínio (87) e, portanto, o que tem um aumento da coercividade. Na simulação foi considerada a anisotropia magnetocristalina, no entanto foi reportado em (87) que o Ni apenas apresenta uma pequena anisotropia magnetocristalina. Assim, a resposta magnética deve ser dominada pela anisotropia de forma. O que foi comprovado pela elevada remanência obtida ($M_r/M_s = 0.8$), característica

do eixo de fácil magnetização com o campo aplicado paralelo ao arranjo de nanocascas.

Figura 22 – Ciclos de histerese simulados para diferentes valores da espessura, ε

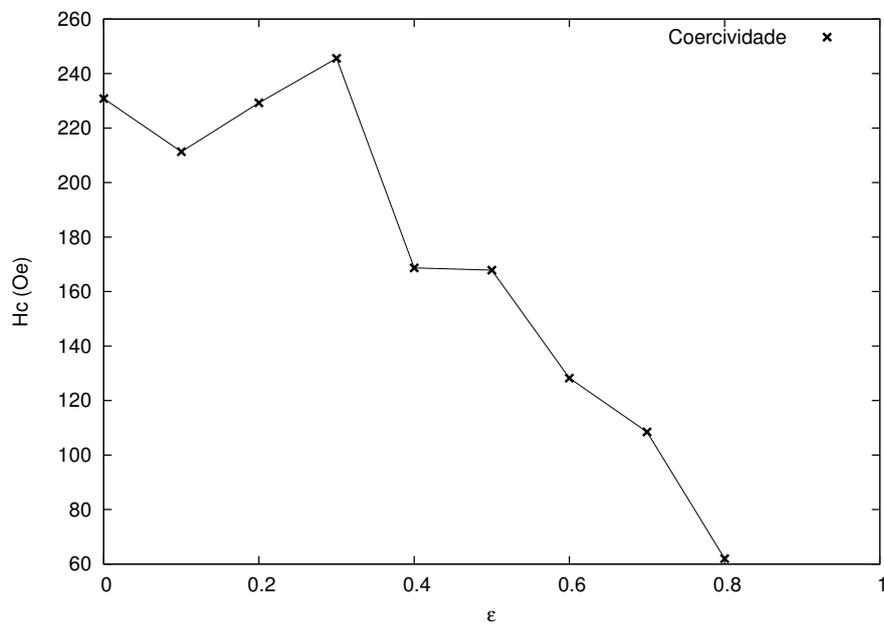


Fonte: Produzido pelo autor

Ainda observando as curvas de magnetização na Figura 22, vemos uma mudança de formato que é muito sensível à espessura da casca. Para $\varepsilon = 0, 0.2, 0.3$ e 0.4 , podemos ver uma curva que se assemelha a um sistema de dois estados. Este comportamento se faz mais típico em $\varepsilon = 0.4$, onde H_c é menor entre as quatro amostras. Ainda para $\varepsilon = 0$ observamos

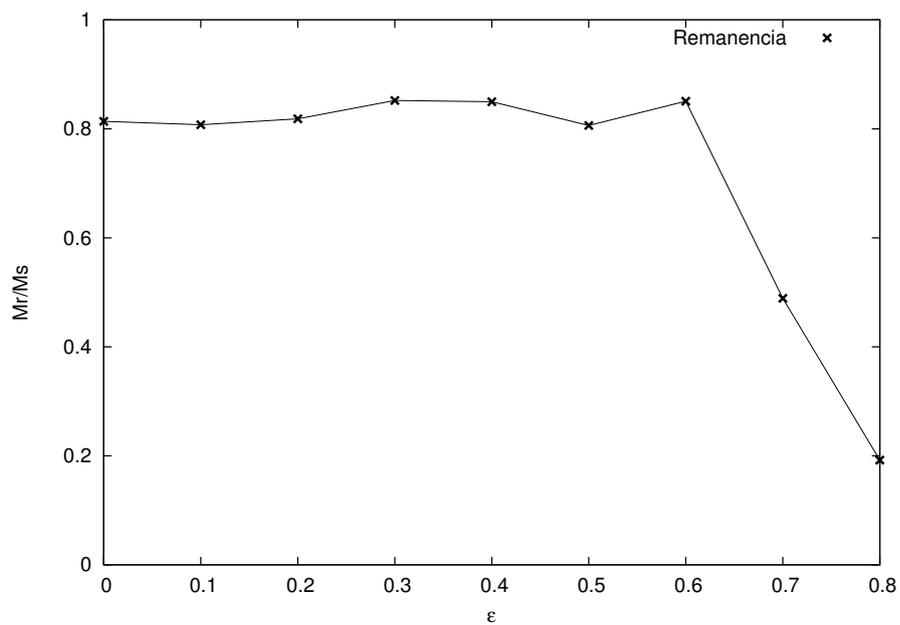
um comportamento perto de campo zero que lembra um sistema com duas fases magnéticas fortemente acopladas.

Figura 23 – Coercividade em função da espessura da casca, ϵ



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 24 – Remanência em função da espessura da casca, ϵ



Fonte: Produzido pelo autor

Na amostra com $\epsilon = 0.7$ vemos novamente o salto perto do campo zero, mas desta vez

temos uma coercividade menor que em $\varepsilon = 0$. A curva para $\varepsilon = 0.8$ apresenta um formato misto que caracteriza um sistema mais difícil de ser saturado e ainda tem estreitamento que faz diminuir H_c . O maior causador deste tipo de efeito para este caso pode ser a forte interação dipolar que há nestas cascas finas.

A forte queda na remanência para $\varepsilon > 0.4$ é um bom resultado que permite prever que para $\varepsilon < 0.4$ os arranjos de nanocascas de Ni podem ser utilizados em hipertermia.

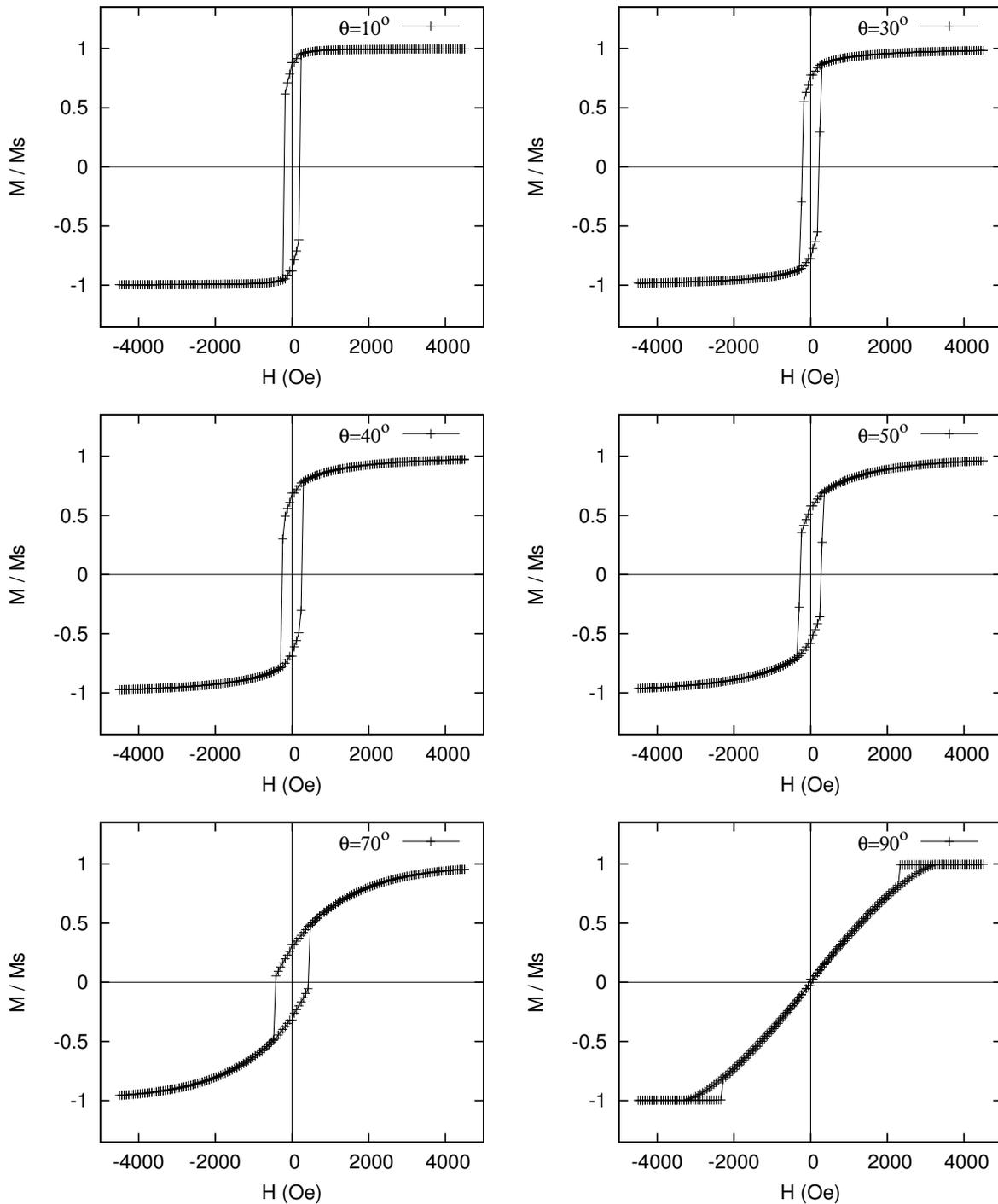
Na próxima seção apresentamos os efeitos ao inclinar a amostra em relação ao campo.

5.2.1.2 Simulação para o campo aplicado formando ângulo θ com o eixo X

Foi feito um estudo anisotrópico da magnetização, variando o ângulo de aplicação do campo magnético no plano XZ, formando um ângulo $0 \leq \theta \leq 90$ com o eixo X. Figura 21. Observe-se que o ângulo é medido em relação ao plano do arranjo. Foram obtidos aqui os ciclos de histerese para diferentes valores da espessura ε , Figuras 25, 28 e 31. Em geral para todos os valores de ε , com o aumento do ângulo até 70 graus, a tendência dos valores da coercividade é aumentar. Para os ângulos de 80 e 90 graus, os valores diminuem grandemente (ver Figuras 26, 29 e 32). Para o caso da remanência, com o aumento do ângulo, a tendência é a diminuir (Figuras 27, 30 e 33).

O contraste da M_r/M_s para diferentes orientações de campos aplicados tende a diminuir com o aumento da razão ε (diminuição da espessura) Figura 35. Assim para a espessura $\varepsilon = 0.8$ (casca fina) a remanência a ângulo pequeno (10 graus) é 0.36, e para a direção perpendicular ao arranjo (90 graus) 0.12 o que está próximo aos valores reportados para as estruturas de redes ferromagnéticas 2D, e réplicas ordenadas 3D de Ni, de 0.35 para ângulo paralelo (zero graus) e 0.10 para ângulo perpendicular (90 graus) (87) e o arranjo de nanocascas de Ni, 0.46 e 0.19 respectivamente (29) e muito menor do que reportado para o filme de Ni obtido por eletrodeposição, 0.67 e 0.02 (87). A diminuição da remanência com o aumento do ângulo, até um baixo valor para direção perpendicular para todos os valores de ε , pode indicar um eixo de difícil magnetização nesta direção para o arranjo. Comparativamente, o arranjo de esferas ocas de Ni, apresenta um menor contraste da remanência do que o filme de Ni, indicando que o arranjo de esferas ocas é muito mais isotrópico em resposta magnética do que o filme. Isto pode ser atribuído à estrutura esférica isotrópica das celas individuais dos arranjos (29). Ambas remanências, são maiores do que os valores correspondentes das réplicas ordenadas 3D de Ni, mostrando que a estrutura do arranjo de esferas ocas é mais facilmente magnetizada.

Observando a Figura 25 podemos ver um comportamento que lembra os resultados obtidos no modelo de Stoner para elipsoides com rotação coerente dos momentos. No caso de 90 graus estamos em uma situação de campo aplicado normal ao arranjo e por ser uma casca grossa ($\varepsilon = 0.3$) os efeitos desmagnetizantes são mais por conta do arranjo de modo global como no caso de um filme.

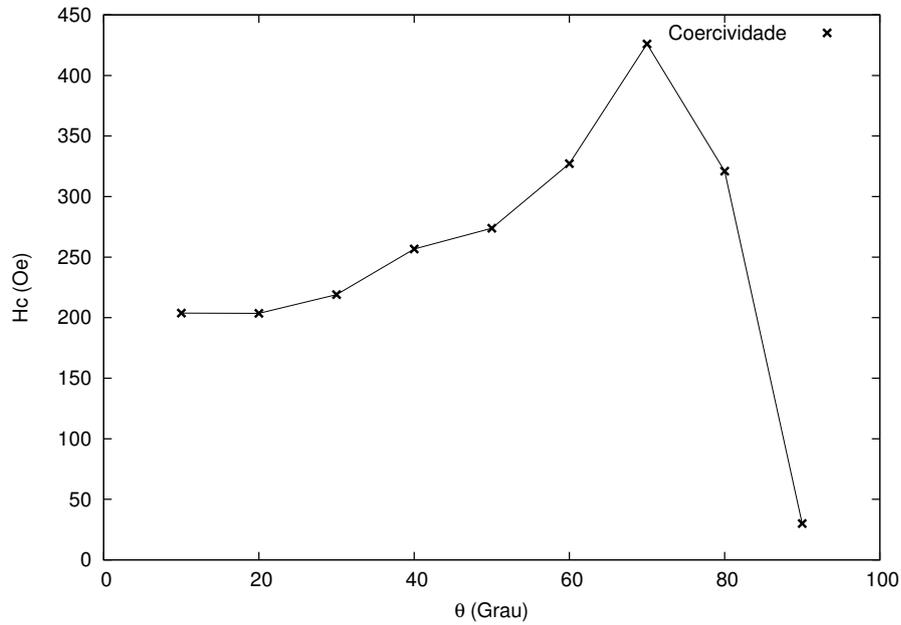
Figura 25 – Ciclos de histerese simulados para a espessura $\varepsilon = 0.3$ variando o ângulo de aplicação do campo

Fonte: Produzido pelo autor

A análise das Figuras 26 e 27 em conjunto, oferece uma via de calibrar o produto BH_{max} apenas com a inclinação do arranjo. Observe que H_c consegue um aumento rápido com o aumento da inclinação do campo. Por outra parte M_r/M_s apresenta uma queda sempre. O pico

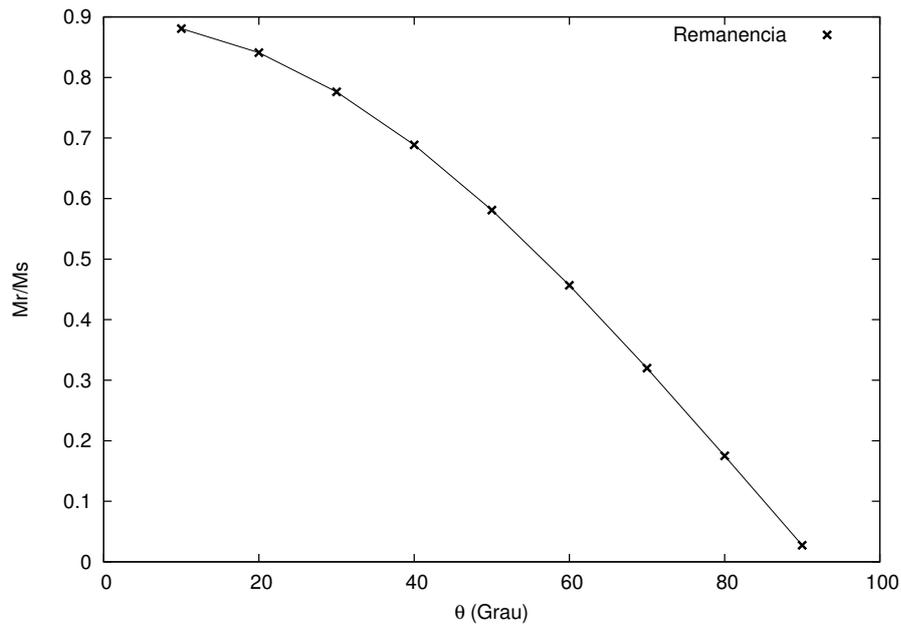
na Figura 26, pode ser sinal de câmbio de regime na inversão dos momentos. É muito provável que a competição energética entre interação dipolar global do arranjo (entre as faces do “filme”) e as devidas aos dipolos dentro e fora de cada casca, seja a maior causa do pico da Figura 26.

Figura 26 – Coercividade em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.3$



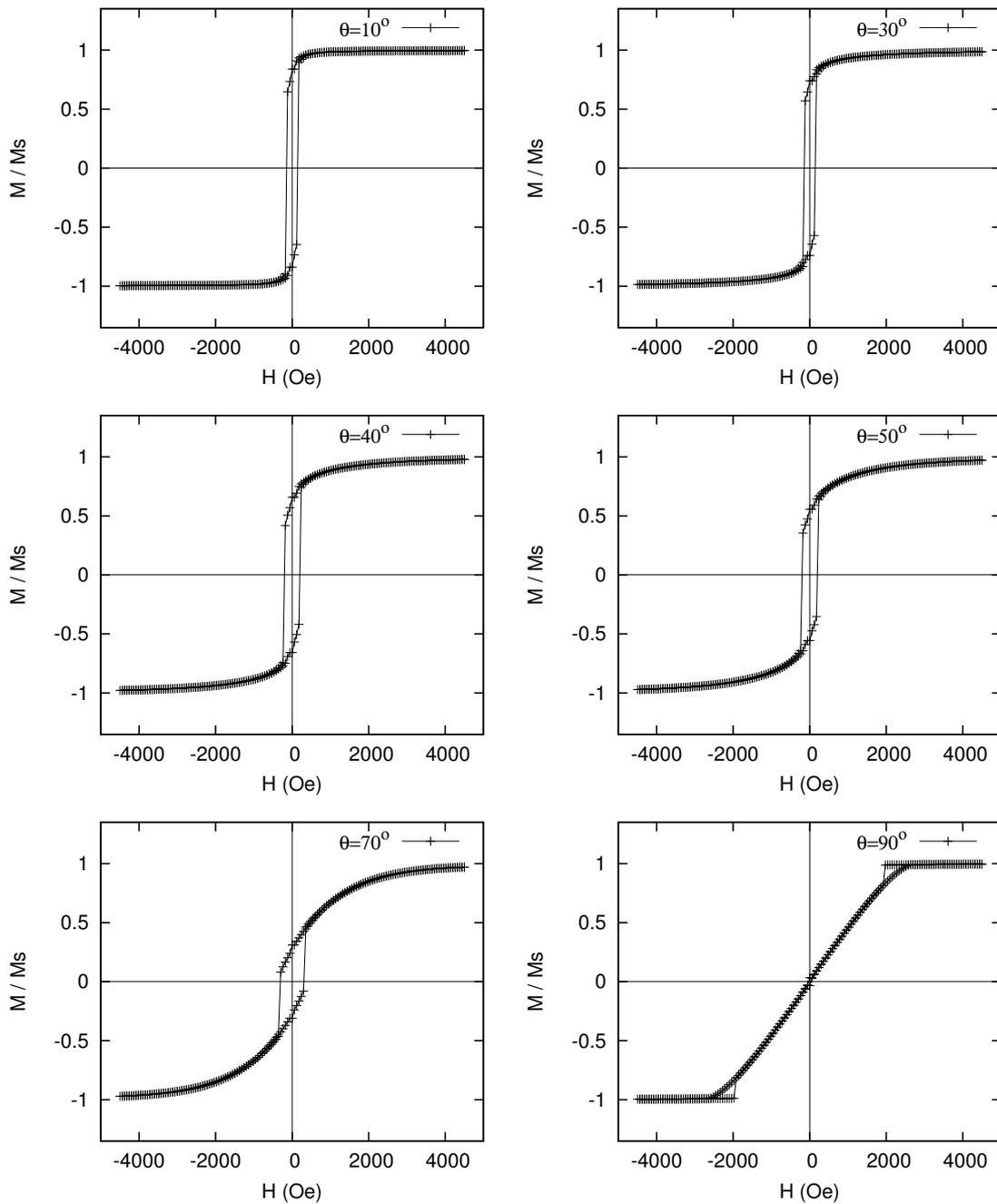
Fonte: Produzido pelo autor

Figura 27 – Remanência em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.3$



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 28 – Ciclos de histerese simulados para a espessura $\varepsilon = 0.5$ variando o ângulo de aplicação do campo

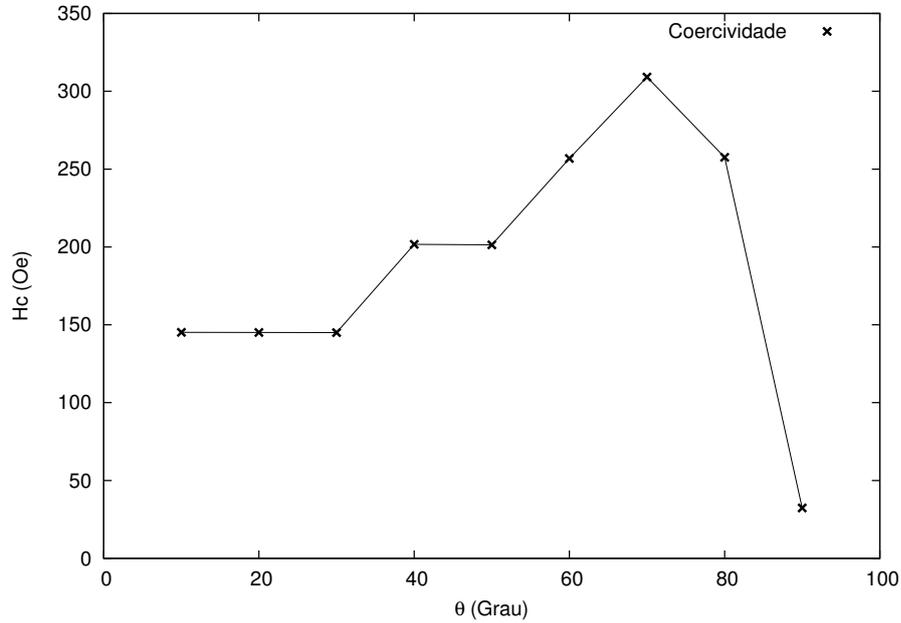


Fonte: Produzido pelo autor

O mesmo estudo no arranjo com casca de $\varepsilon = 0.5$ apresenta um comportamento semelhante à $\varepsilon = 0.3$ mas com valores de H_c menores de forma geral. Observe que comparando as Figuras 26 e 29 o pico em $\varepsilon = 0.5$ é menos pronunciado que em $\varepsilon = 0.3$ e M_r/M_s inicia de um valor menor em $\varepsilon = 0.5$ Figura 27 e 30. O máximo neste caso se apresenta ainda em 70 graus. É possível que um estudo com mais ângulos possa ser sensível a algum deslocamento leve do pico,

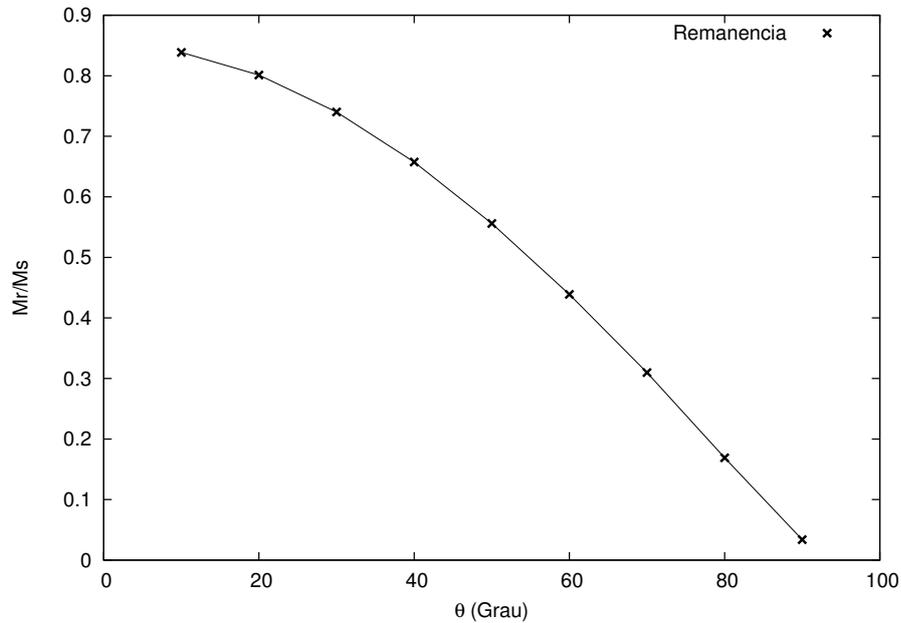
mas este estudo poderá ser feito em trabalhos futuros.

Figura 29 – Coercividade em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.5$



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 30 – Remanência em função do ângulo de aplicação do campo para $\epsilon = 0.5$

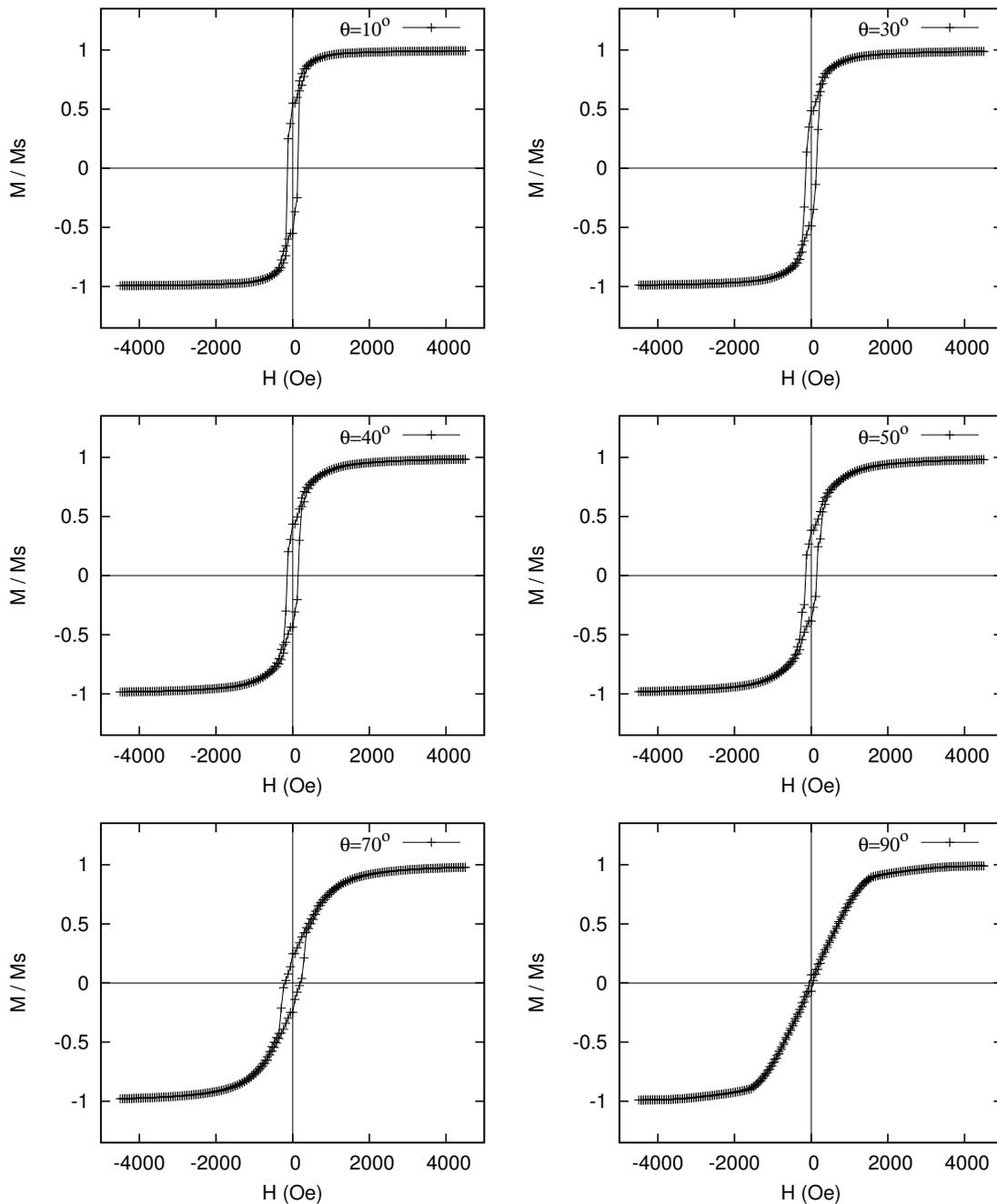


Fonte: Produzido pelo autor

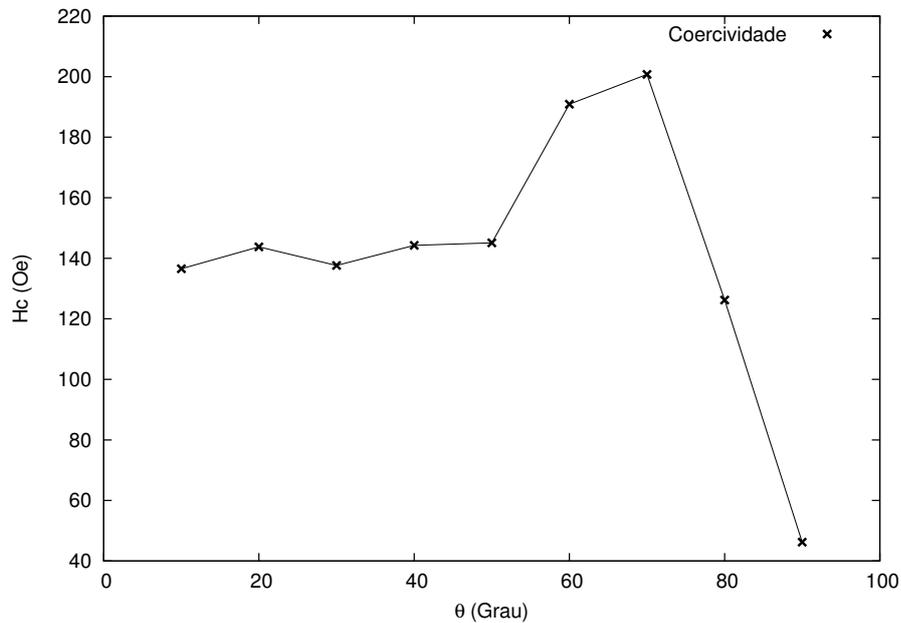
O arranjo com cascas de $\epsilon = 0.7$ já começa um comportamento mais pronunciado quando observamos a Figura 31. Observe-se que em $\theta = 90$ graus a saturação se faz mais difícil e apenas

em campo $H = 3500 \text{ Oe}$ é que se consegue alinhamento total dos momentos. O mesmo pico em H_c se observa e todo indica que quanto mais fina a casca, menores são os valores de H_c . O mesmo efeito é observado em remanência onde temos um valor máximo na Figura 33 de 0.55.

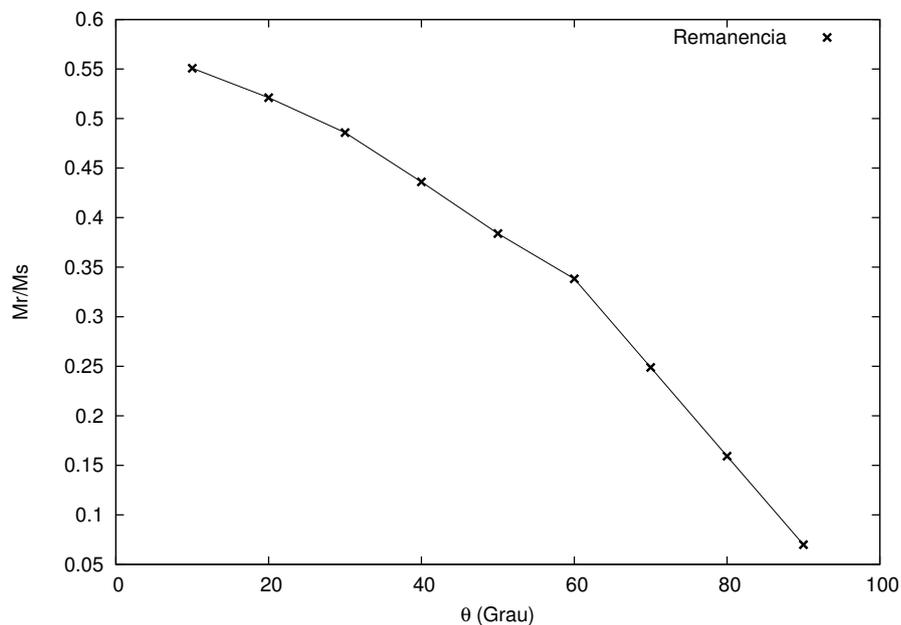
Figura 31 – Ciclos de histerese simulados para a espessura $\varepsilon = 0.7$ variando o ângulo de aplicação do campo



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 32 – Coercividade em função do ângulo de aplicação do campo para $\varepsilon = 0.7$ 

Fonte: Produzido pelo autor

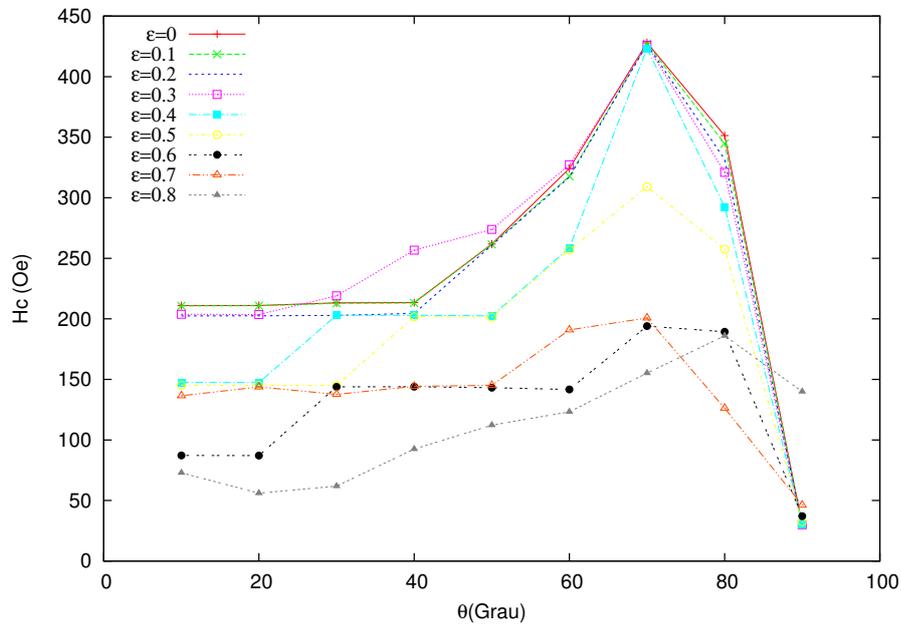
Figura 33 – Remanência em função do ângulo de aplicação do campo para $\varepsilon = 0.7$ 

Fonte: Produzido pelo autor

As Figuras 34 e 35 apresentam um estudo comparativo da dependência de H_c e M_r com o ângulo θ , para cada uma das amostras estudadas. É fácil ver que o pico mencionado em H_c para 70 graus é cada vez menos pronunciado à medida que ε aumenta. No caso de $\varepsilon = 0.4$ vemos um pico mais pronunciado que no resto das amostras. Para $\varepsilon \geq 0.6$ o pico desaparece e podemos

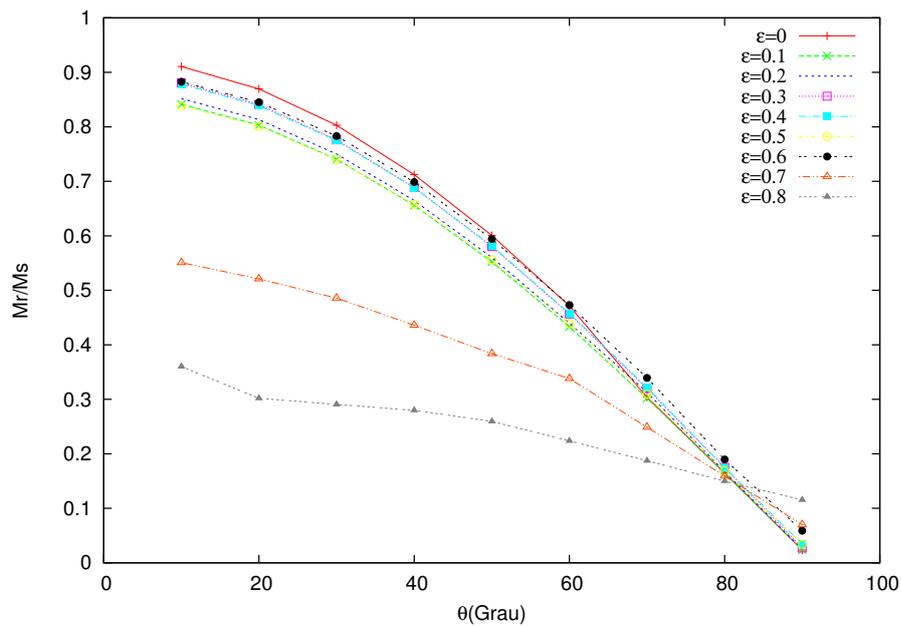
atribuir ao fato de que as interações dipolares entre a superfície interna e externa da casca se faz cada vez mais forte e os efeitos de inclinação do arranjo começam ser desprezáveis.

Figura 34 – Coercividade em função do ângulo para diferentes espessuras, ϵ da casca



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 35 – Remanência em função do ângulo para diferentes espessuras, ϵ da casca



Fonte: Produzido pelo autor

A remanência também diminui seu valor, o que pode ser uma sinal de que efeitos do

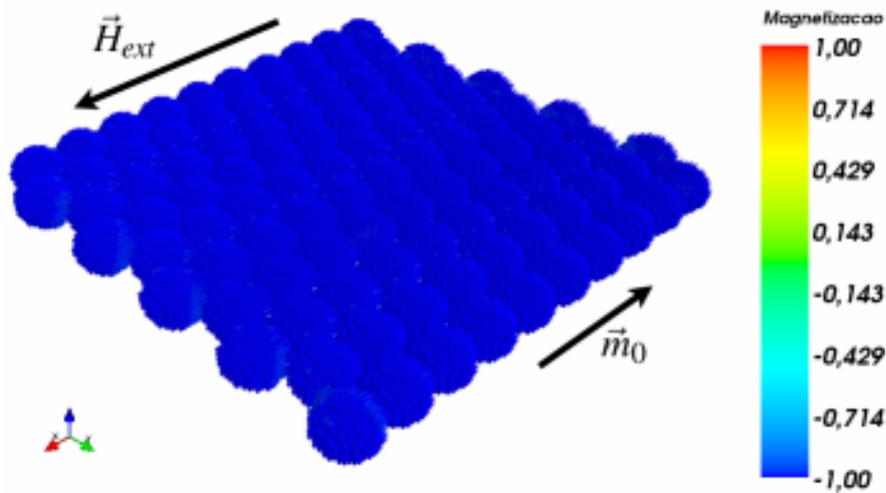
filme de forma global começam ser importantes quando a casca é grossa.

Uma forma de entender como ocorre o processo de inversão dos momentos, é fazendo análise da dinâmica dos momentos diante da inversão do campo. A seção 5.2.2 apresenta o mencionado estudo em arranjos de Ni para diferentes espessuras da casca escolhidas neste trabalho.

5.2.2 Estudo da dinâmica em arranjos de cascas de Ni

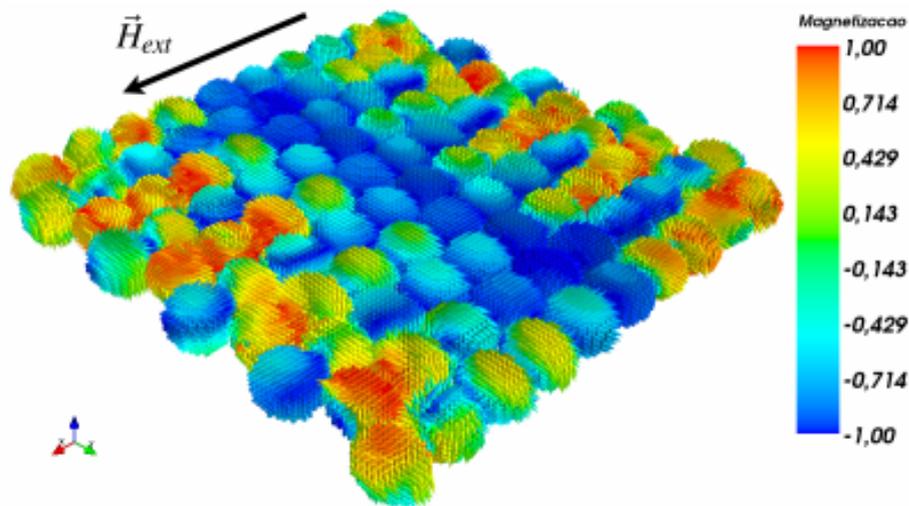
A evolução temporal da magnetização $\vec{M}(\vec{r}, t)$ do arranjo foi obtida pela integração da equação de LLG 2.17 com a constante de amortecimento de 0.013. O arranjo inicialmente tem uma magnetização \vec{m}_0 na direção negativa do eixo X (Figura 36) e a reversão foi simulada aplicando um campo externo \vec{H}_{ext} , maior do que o campo coercitivo, na direção positiva de X por um intervalo de tempo, onde tem lugar a reversão, Figura 37, ate que os momentos ficaram alinhados com o campo (Figura 38).

Figura 36 – Esquema da simulação da reversão da magnetização. Inicialmente o arranjo tem uma magnetização na direção negativa do eixo X



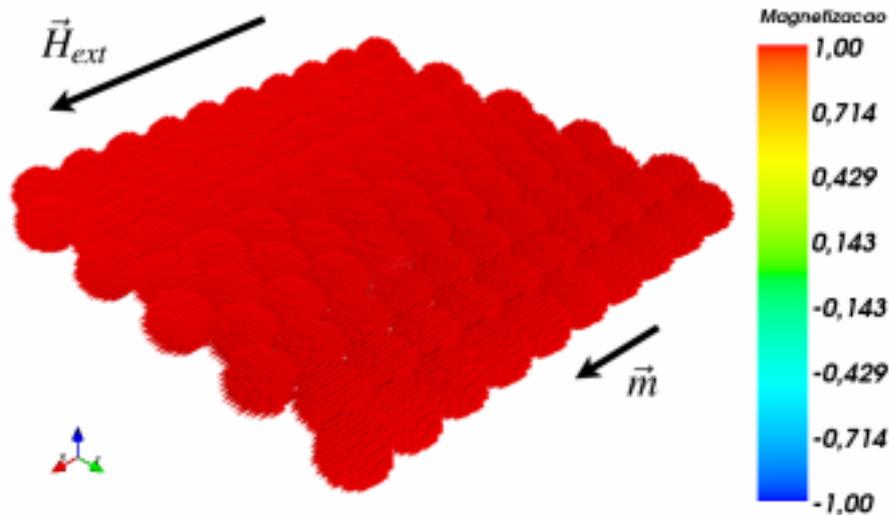
Fonte: Produzido pelo autor

Figura 37 – Esquema da simulação da reversão da magnetização. Durante a reversão os momentos começam a girar



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 38 – Esquema da simulação da reversão da magnetização. Depois de um tempo o campo magnético externo reverteu a magnetização



Fonte: Produzido pelo autor

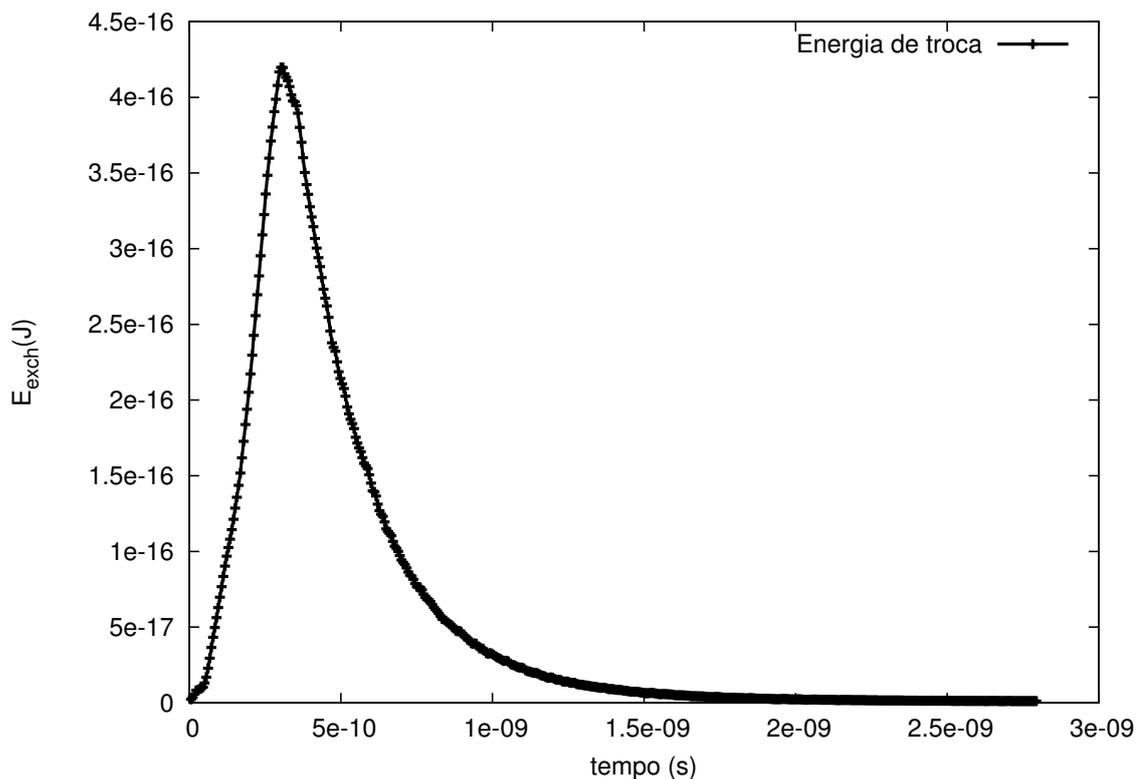
Este estudo tem grande utilidade já que por um lado é possível ver nele a evolução dos momentos em cada ponto da amostra logo depois de geradas as condições de inversão total dos momentos. Como podemos observar mais na frente cada componente evolui gerando um padrão de oscilações que depende fortemente das configurações globais da amostra. A formação de estruturas diferentes pode ser vista ou simplesmente detectada na evolução da energia em cada instante de tempo.

A seguir mostraremos uma breve seleção de todos os nossos resultados onde se destacam os principais eventos durante a reversão nas cascas com $\varepsilon = 0.1, 0.5, 0.8$. Decidimos apresentar os resultados destas amostras porque há grandes mudanças de uma para outra. Na sequência se apresentam a evolução temporal da energia de troca e das componentes Y e Z da magnetização, assim como um corte do mapa vetorial de \vec{m} no plano XY, para diferentes instantes.

5.2.2.1 Simulação para casca de espessura $\varepsilon = 0.1$

O gráfico da Figura 39 apresenta a evolução no tempo da energia de troca para o arranjo de cascas com $\varepsilon = 0.1$. Observamos que no início da inversão a energia de troca tem uma mudança de comportamento em 0.1 ns e que cresce rapidamente até aproximadamente 0.5 ns , onde se observa o pico no gráfico. Logo depois há um relaxamento típico que leva a uma condição de saturação depois de 2 ns .

Figura 39 – Energia de troca durante a reversão da magnetização



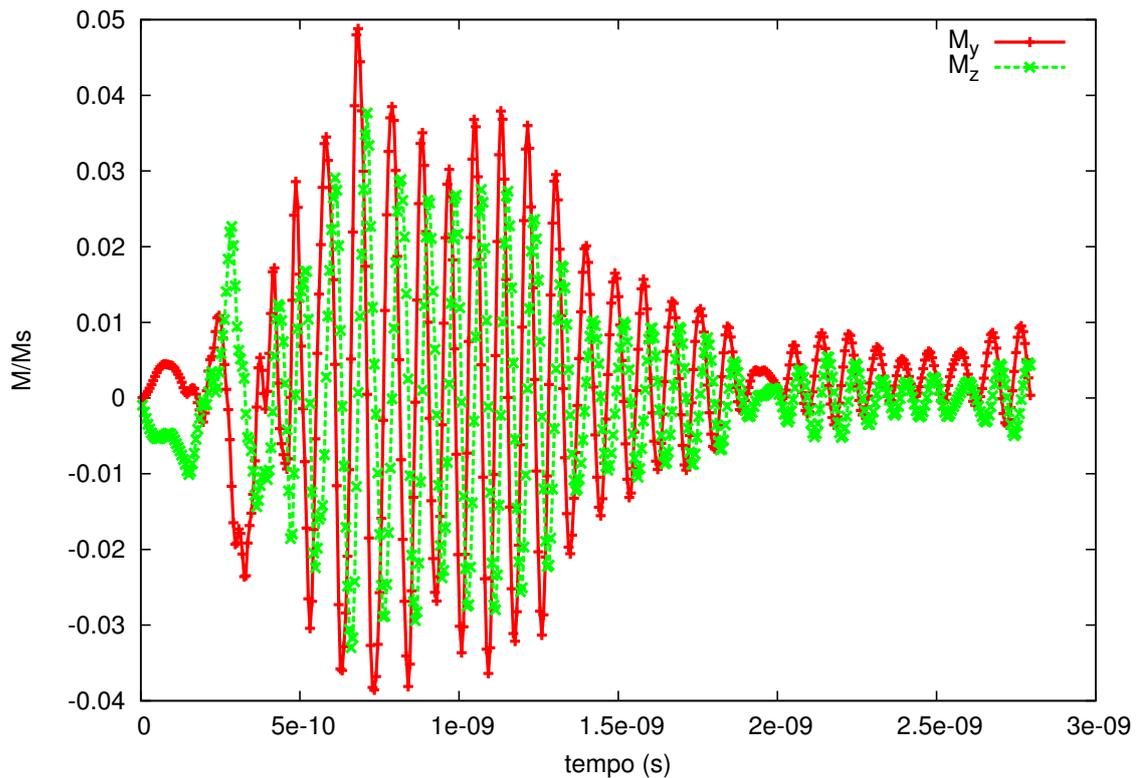
Fonte: Produzido pelo autor

Observando os gráficos da Figura 40, onde se mostra a evolução temporal das componentes da magnetização, que são perpendiculares ao campo, podemos apreciar que logo no início do processo há um comportamento que revela a ação das interações autodesmagnetizantes. Este tipo de efeito é fácil de destacar pelo fato das componentes mencionadas não crescem apreciavelmente antes de 0.1 ns . Já em 0.5 ns podemos ver claramente um comportamento periódico

que se estabelece no ato de inversão dos momentos. O mesmo movimento oscilatório se mantém durante toda a inversão caracterizado por mudanças de periodicidade em diferentes instantes mostrados na Figura 40.

Ainda neste gráfico é possível ver uma envoltória que é típica do processo exponencial de relaxação. Como mencionamos já, a amplitude desta oscilação diminui fortemente depois de 2 ns , mantendo-se o sistema perto da saturação e com pequenas oscilações dos momentos em torno da direção de campo aplicado como previsto na equação de LLG.

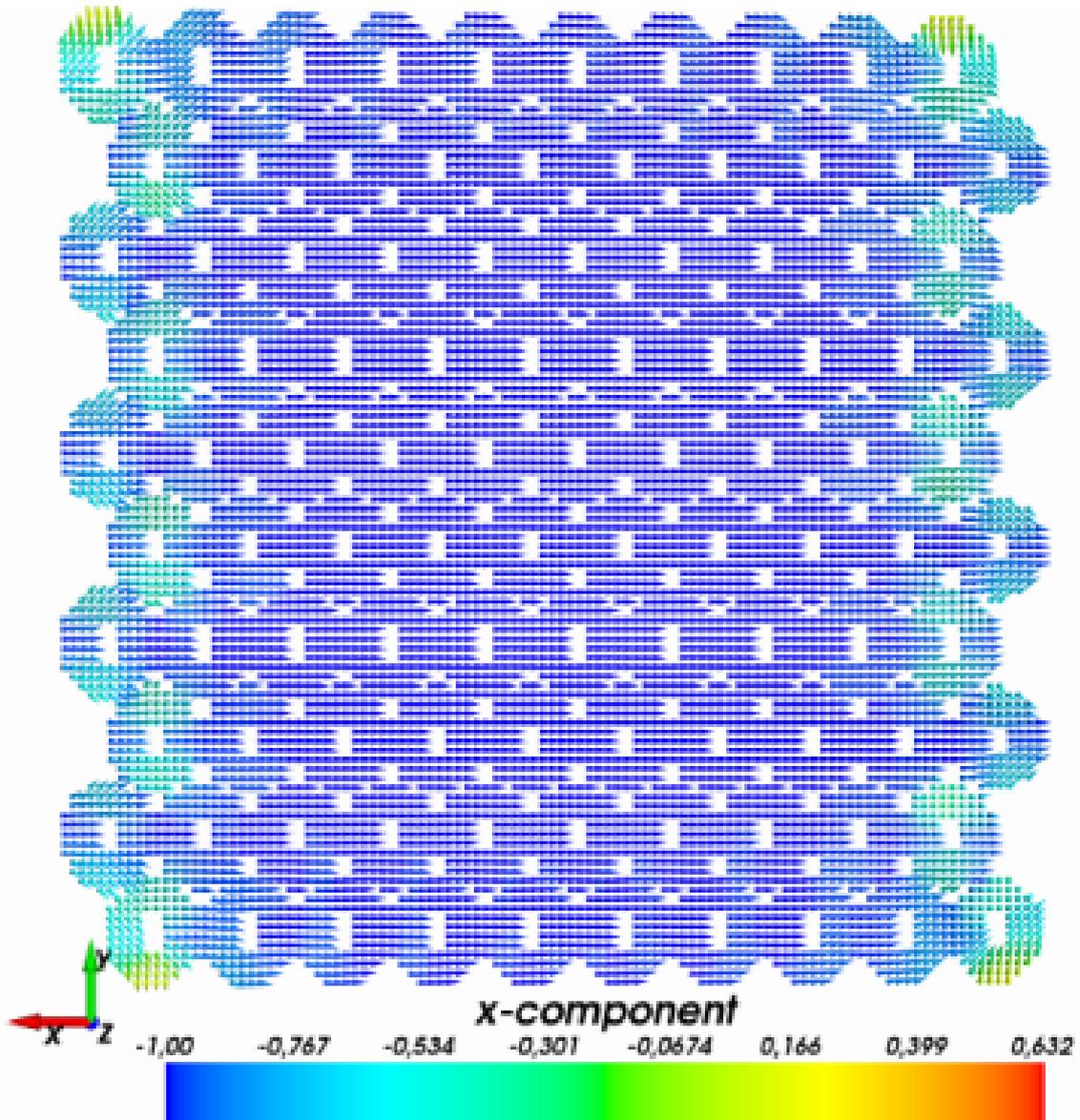
Figura 40 – Evolução temporal das componentes m_y e m_z da magnetização



Fonte: Produzido pelo autor

Para entender melhor os resultados no arranjo com $\varepsilon = 0.1$ realizamos um corte transversal no mapa 3D dos momentos. O mencionado corte foi feito no plano XY ($Z=0$), que incluem os centros de todas as cascas e foi tomado em diferentes instantes, 0.09 ns , 0.16 ns , 0.2576 ns , 0.3 ns , 0.42 ns , 0.6608 ns . Os mencionados cortes são apresentados nas Figuras 41 - 46.

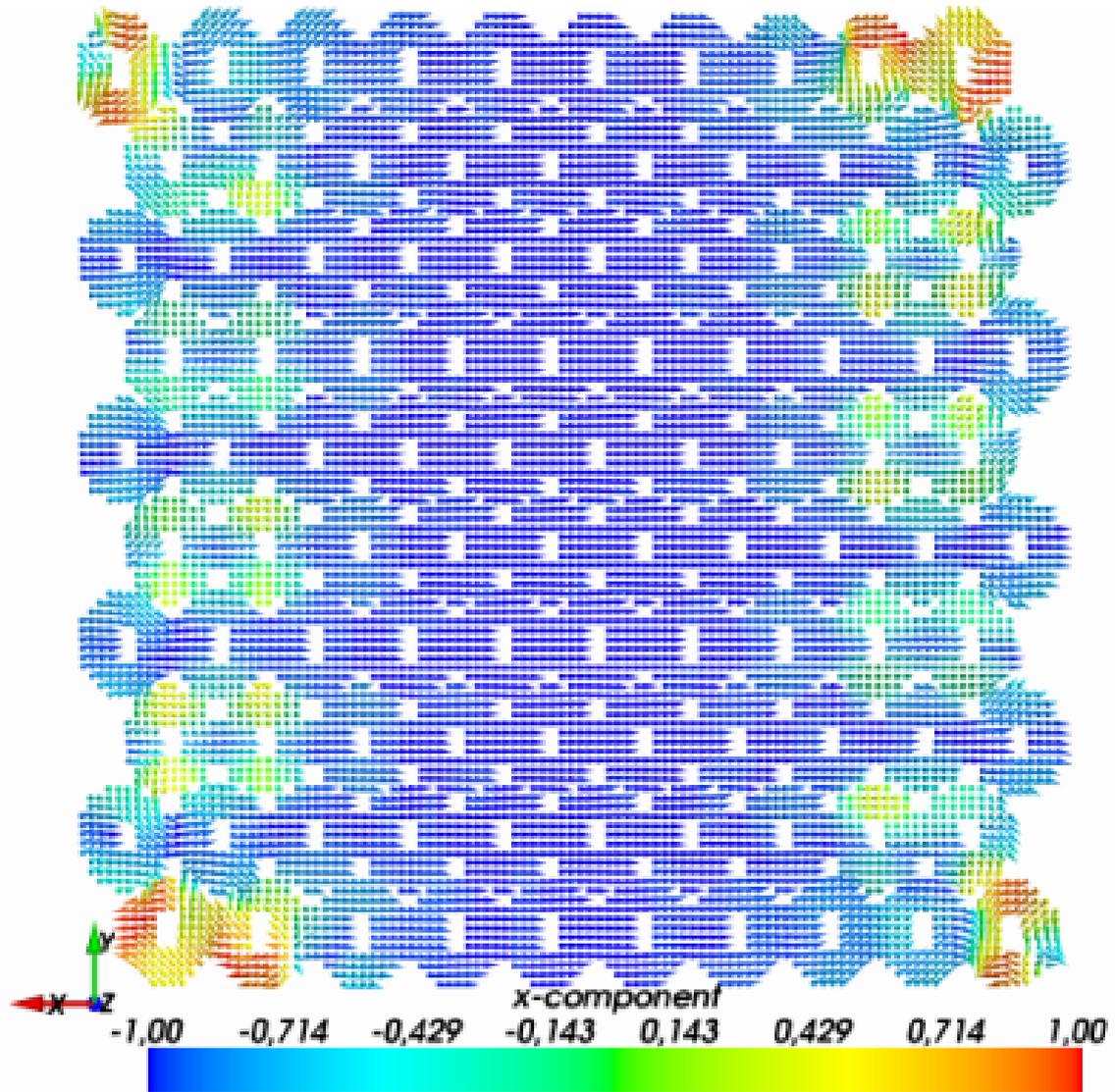
Figura 41 – Distribuição da magnetização no instante $9.52 \cdot 10^{-11} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.1$



Fonte: Produzido pelo autor

A Figura 41 mostra uma seção transversal da configuração de \vec{m} em $t = 0.0952 ns$. Observe que nesse instante a maior parte dos momentos ainda está na direção negativa dos eixo X. É curioso verificar que a inversão inicia pelas bordas do arranjo o que leva a pensar que há uma competição entre energia autodesmagnetizante global da amostra e o resto das energias. Falamos isto porque como mencionamos, a inversão está destacada naquelas bordas do arranjo que são adjacentes ao campo externo.

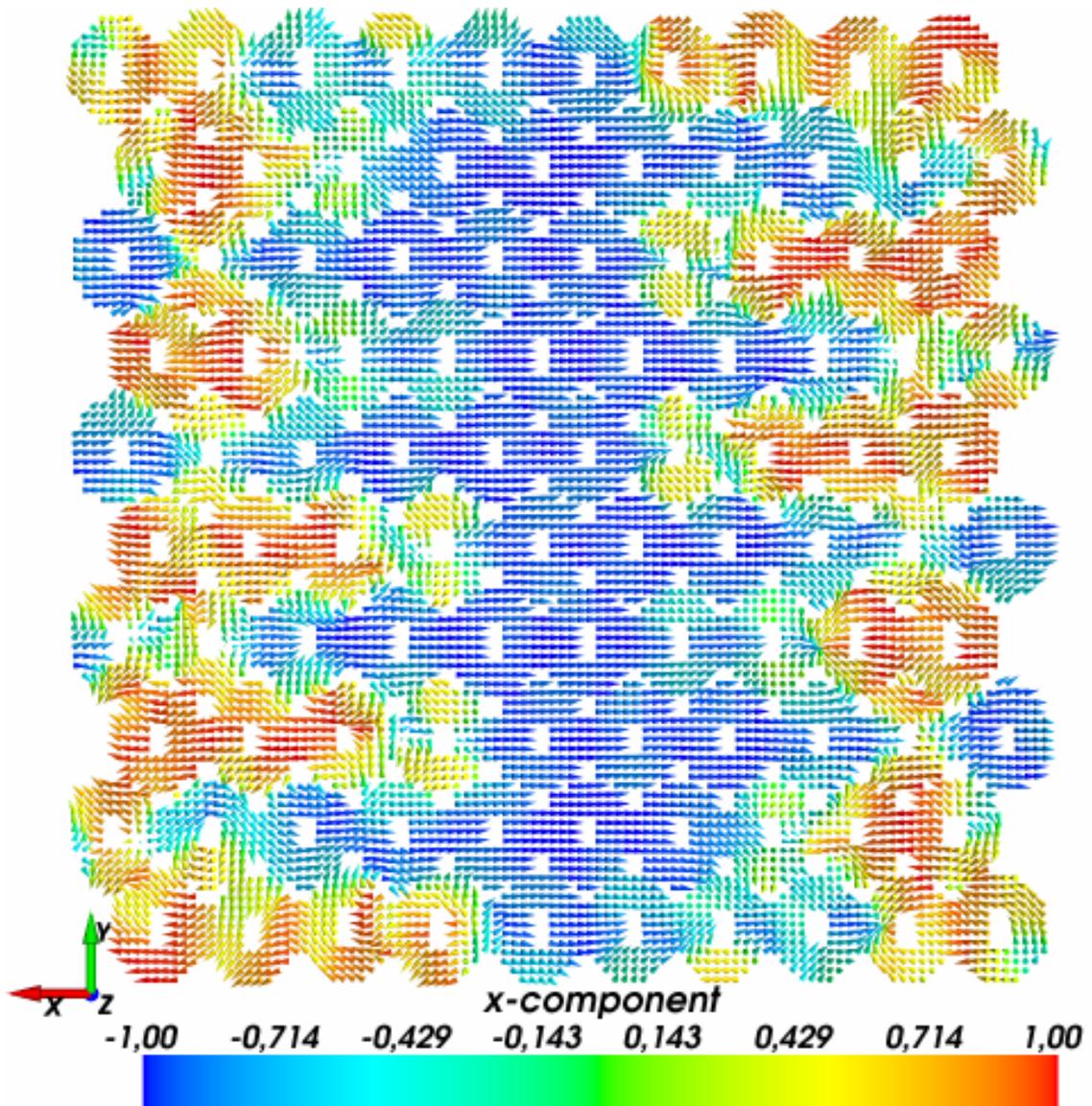
Figura 42 – Distribuição da magnetização no instante $1.68 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.1$



Fonte: Produzido pelo autor

Observando o mesmo mapa mas em $t = 0.168 ns$, podemos verificar que a inversão dos momentos se propaga desde ambos lados do arranjo e vão a o encontro no centro da amostra. É possível observar também que há estruturas de fechamento de fluxo que surgem em filas alternadas do arranjo. Estas estruturas se observam nos locais onde há alternância dos cores no mapa. Nas filas adjacentes há uma configuração que lembra o estado *onion* (44), já mencionado na Introdução (ver Figura 2) e que ocorre apenas nos extremos onde começa a reversão.

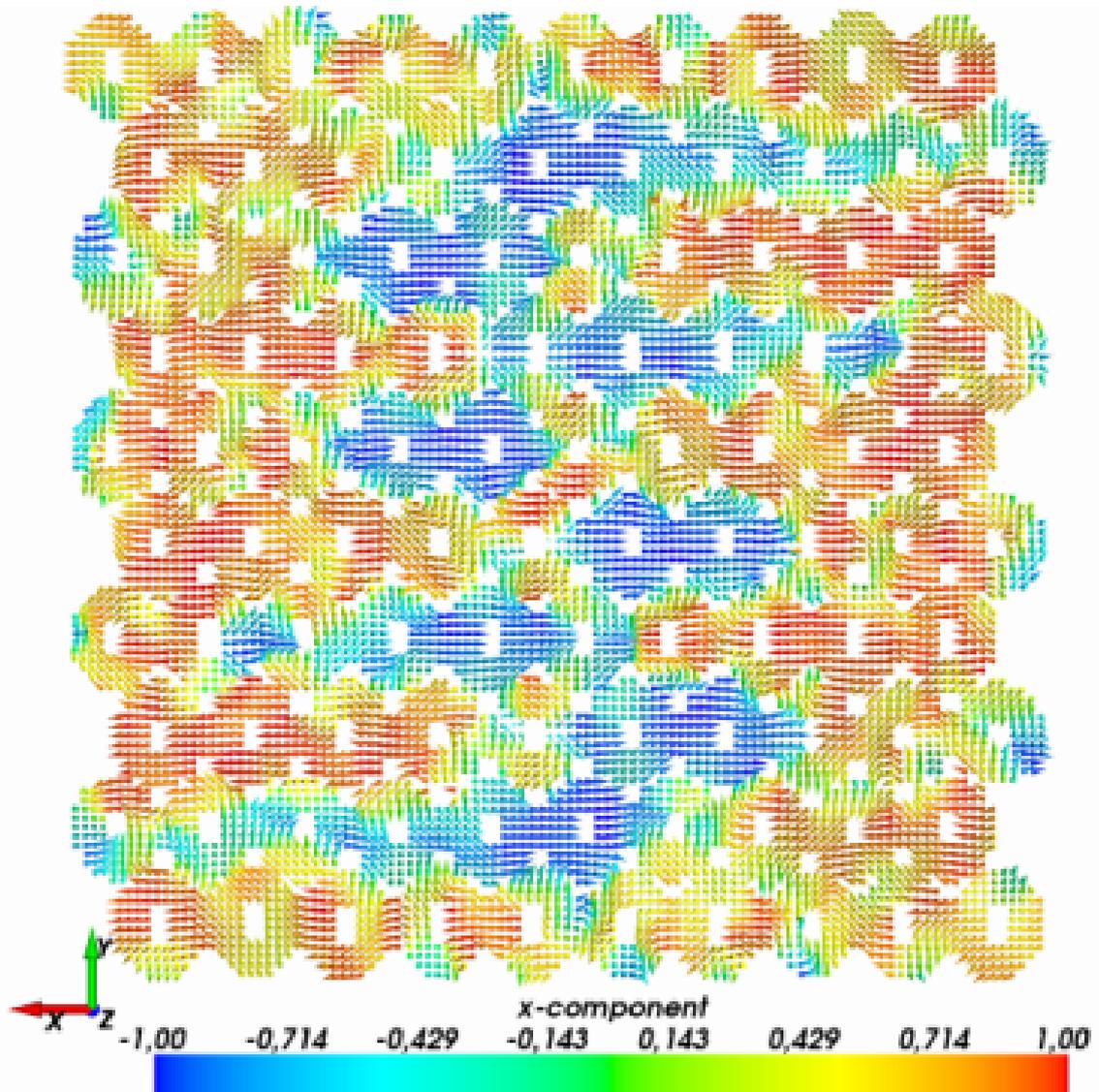
Figura 43 – Distribuição da magnetização no instante $2.576 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.1$



Fonte: Produzido pelo autor

Na Figura 43 no instante $0.2576 ns$ há um comportamento semelhante ao da Figura 42, sendo agora observadas estruturas melhor definidas. Por outro lado não vemos avanço no frente de inversão, que neste momento está na terceira coluna de nanocascas, o mesmo local que na Figura 42. Ao comparar as Figuras 42 e 43 podemos observar uma suavidade na mudança de cores que representa saltos menos bruscos na energia de troca de um ponto a outro.

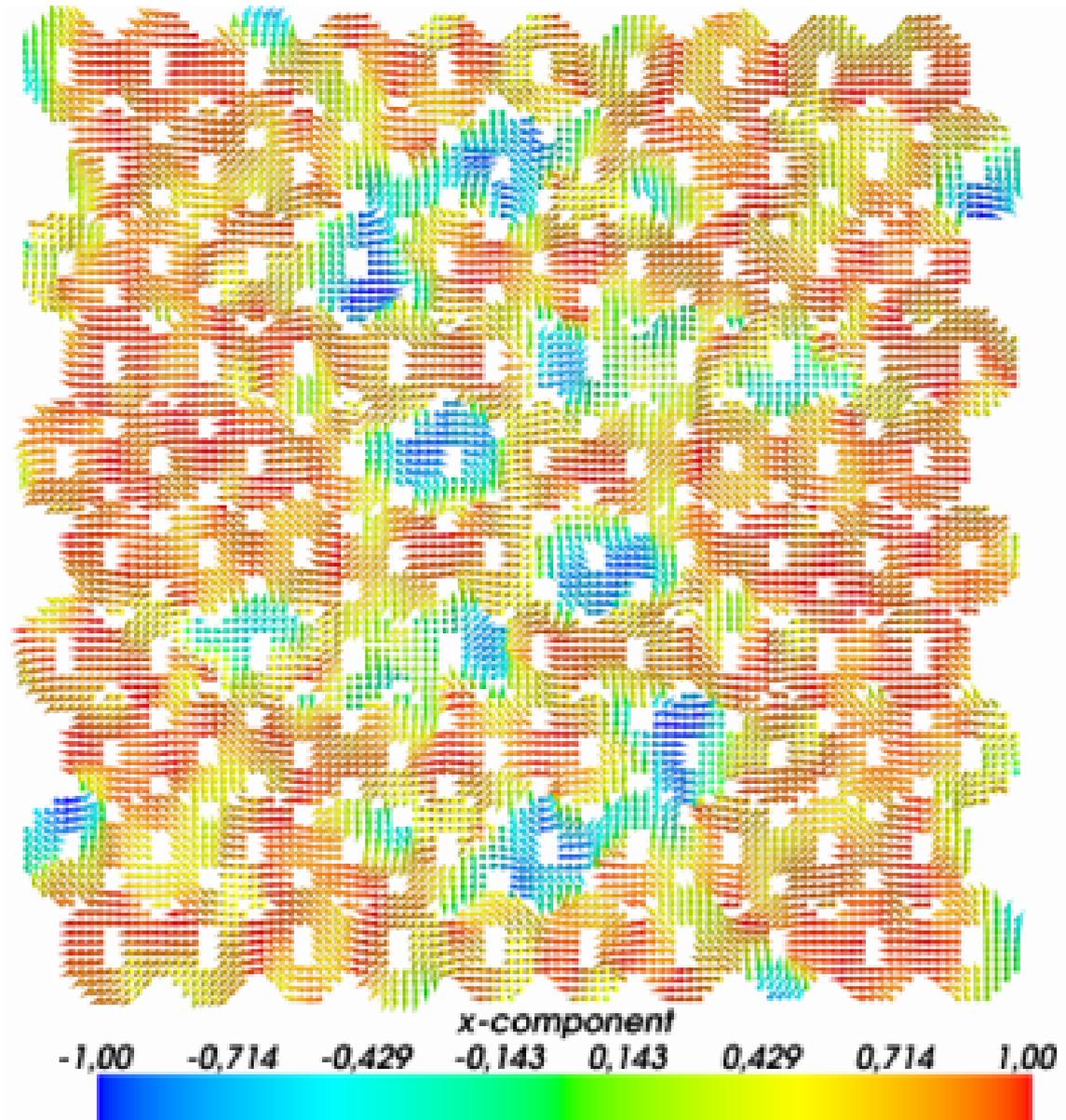
Figura 44 – Distribuição da magnetização no instante $3.08 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.1$



Fonte: Produzido pelo autor

O mapa apresentado na Figura 44 descreve a configuração dos momentos no instante $0.308 ns$ que ocorre na metade da subida que observamos na evolução da energia de troca. Este instante revela uma mistura muito grande de configurações locais que são as responsáveis por levar os momentos à direção positiva do eixo X. No referido mapa podemos ver estruturas de vórtices que ocorrem entre cascas, comportamentos ondulatórios na banda superior e inferior do arranjo, estruturas de fechamento e outras configurações coletivas. Observe que este mapa é um corte do mapa 3D que compreende os pontos que incluem os centros de cada nanocasca. Podemos ver também que a estrutura observada nas figuras anteriores, donde é possível ver uma fonte de inversão, não existe mais.

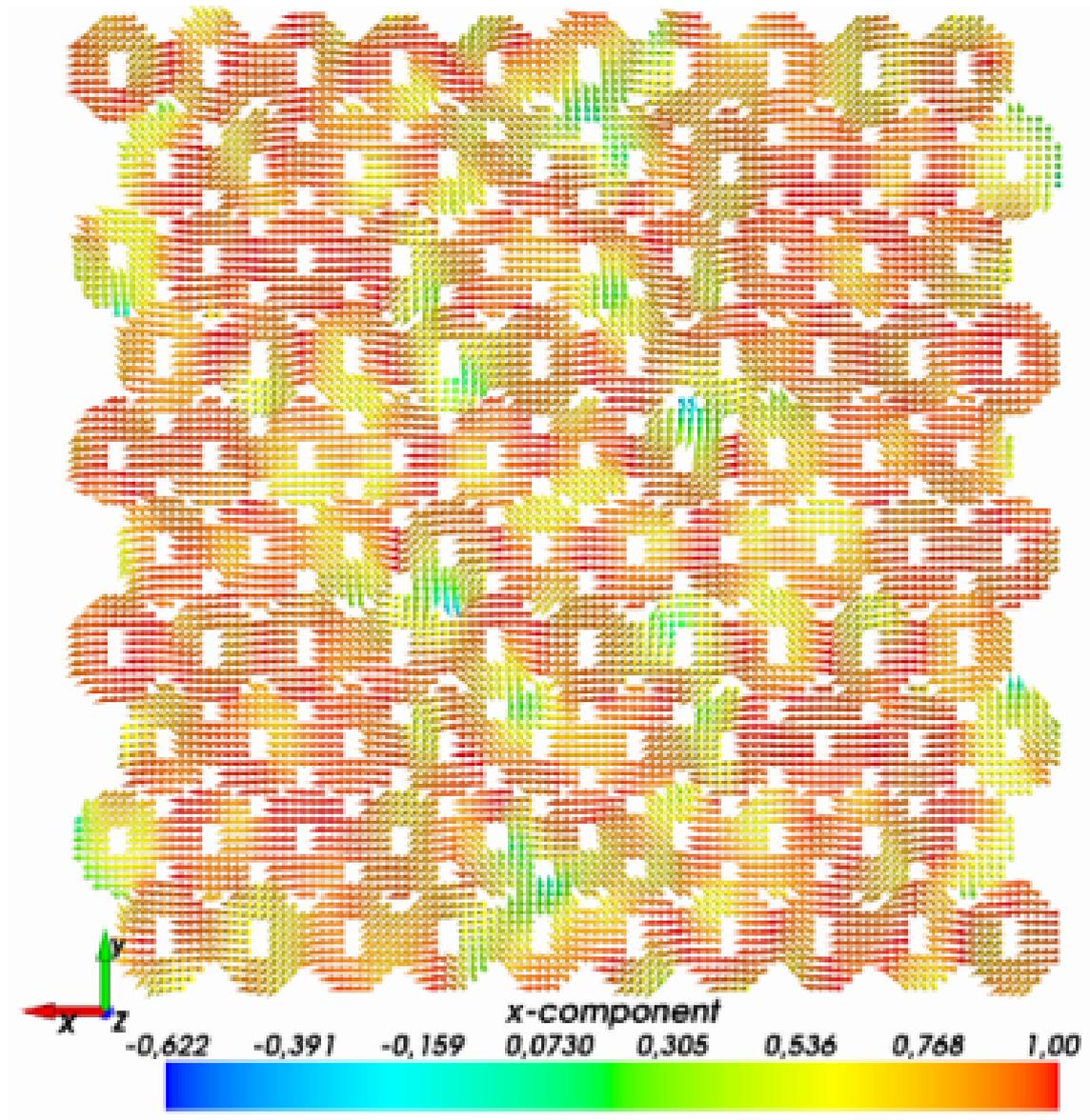
Figura 45 – Distribuição da magnetização no instante $4.2 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.1$



Fonte: Produzido pelo autor

A Figura 45 apresenta o mapa em $t = 0.42 ns$, onde podemos ver ainda aquela estrutura complicada de momentos da Figura 44. Por outro lado, vemos que há *onions* melhor definidos assim como alguns vórtices que se forma ao longo do arranjo. Observe que neste momento há já grande parte dos momentos na direção positiva do eixo X em busca do equilíbrio termodinâmico do sistema.

Figura 46 – Distribuição da magnetização no instante $6.608 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.1$



Fonte: Produzido pelo autor

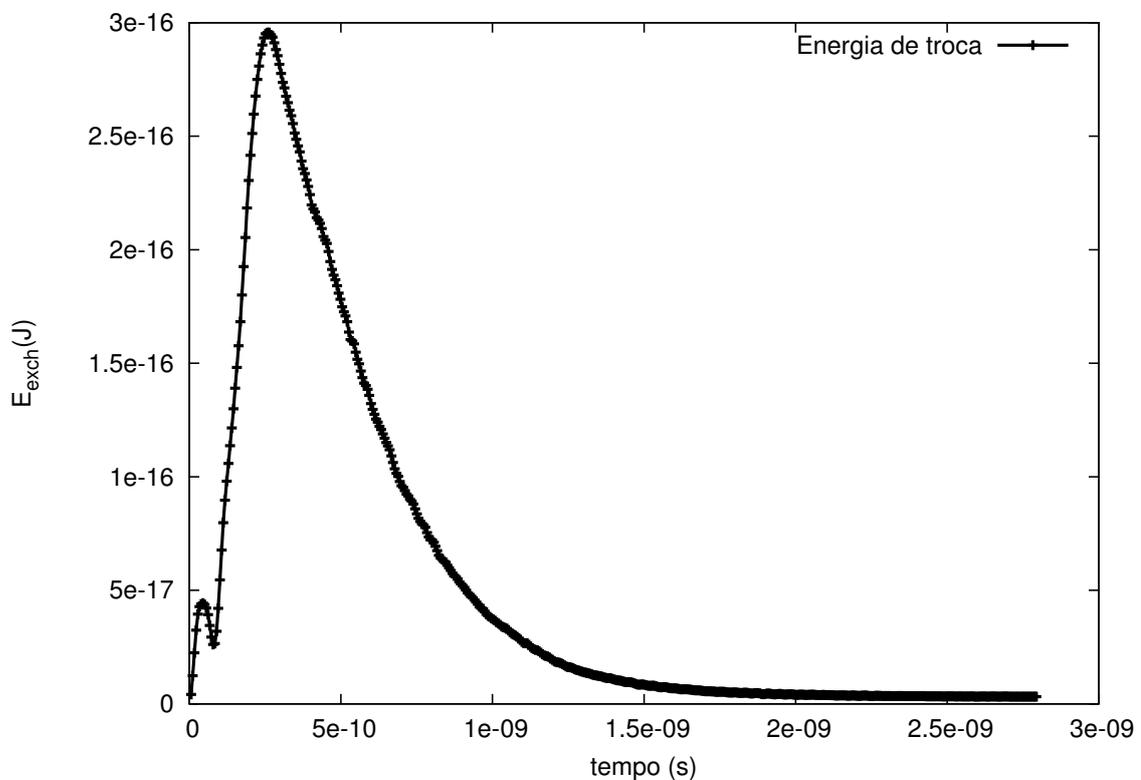
Na Figura 46 observamos que em $t = 0.608 ns$ os momentos no plano aqui escolhido se encontram mais orientados com o campo externo. Observemos que em este instante há ainda muito fechamento do fluxo dentro das cascas individuais e que a maior parte da energia de troca se encontra concentrada no centro do arranjo. É importante destacar que aparentemente, seguem sendo as interações dipolares as responsáveis pela inversão dos momentos. O próximo tópico mostra como a espessura modifica este quadro.

5.2.2.2 Simulação para casca de espessura $\varepsilon = 0.5$

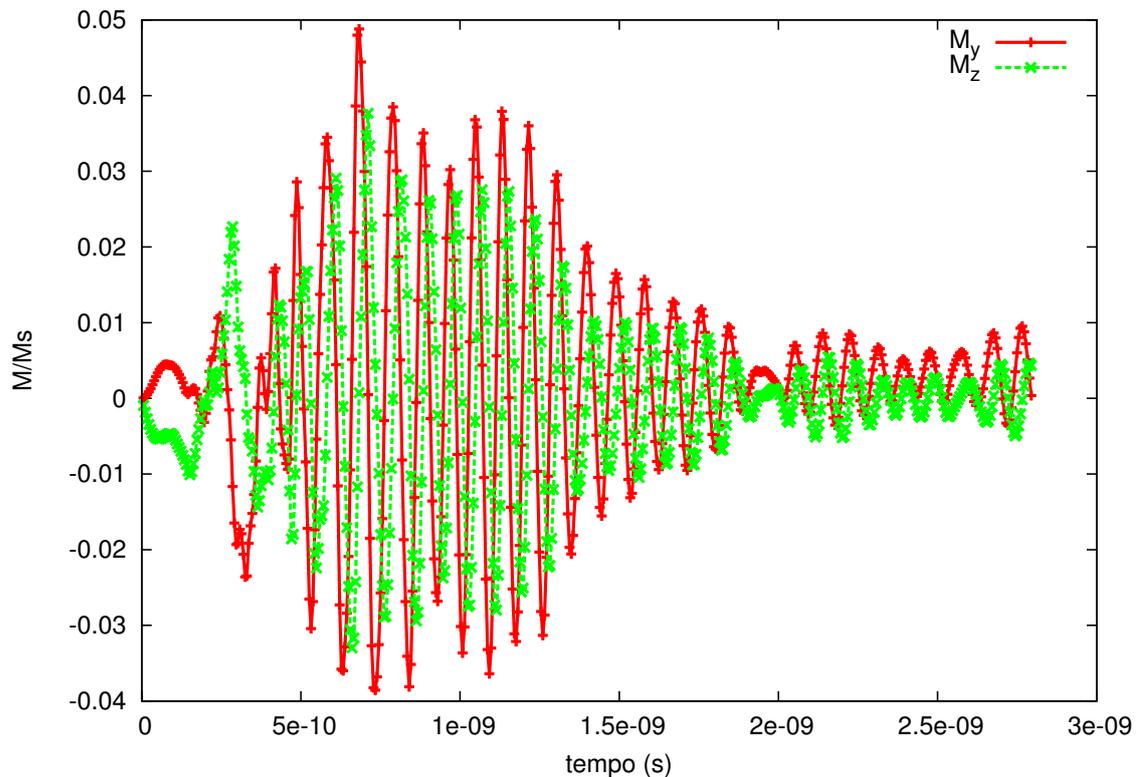
Neste sub sub-tópico apresentamos os resultados obtidos em arranjos com nanocascas de $\varepsilon = 0.5$. Como no caso de $\varepsilon = 0.1$ mostramos os gráficos da evolução temporal da energia de troca e das componentes Y e Z da magnetização. Logo depois são apresentados mapas vetoriais em instantes significativos para esta amostra: 0.1624 ns , 0.2576 ns , 0.3024 ns , 0.6048 ns , 0.7728 ns . A escolha de momentos diferentes à amostra com $\varepsilon = 0.1$ se deve ao fato de que os processos ocorrem em instantes diferentes de uma amostra para outra.

A figura 47 apresenta a evolução da energia de troca no tempo. No gráfico podemos observar dois picos; um logo no início da inversão e outro que ocorre no momento crítico da mudança de direção dos momentos. O primeiro pico, de fato tinha sido observado na amostra com casca mais grossa ($\varepsilon = 0.1$). No caso de $\varepsilon = 0.5$ as superfícies interna e externa das cascas são mais próxima. Isto pode favorecer um aumento de interações dipolares que podem ser responsáveis por todas as mudanças de comportamento vistas nesta amostra. Logo no início do processo muitos momentos rotacionam junto com o campo que é invertido. Por outra parte, as fortes interações dipolares podem agora competir com as de intercâmbio e provocam uma diminuição, que é o valor entre os dois picos da Figura 47.

Figura 47 – Energia de troca durante a reversão da magnetização



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 48 – Evolução temporal das componentes m_y e m_z da magnetização

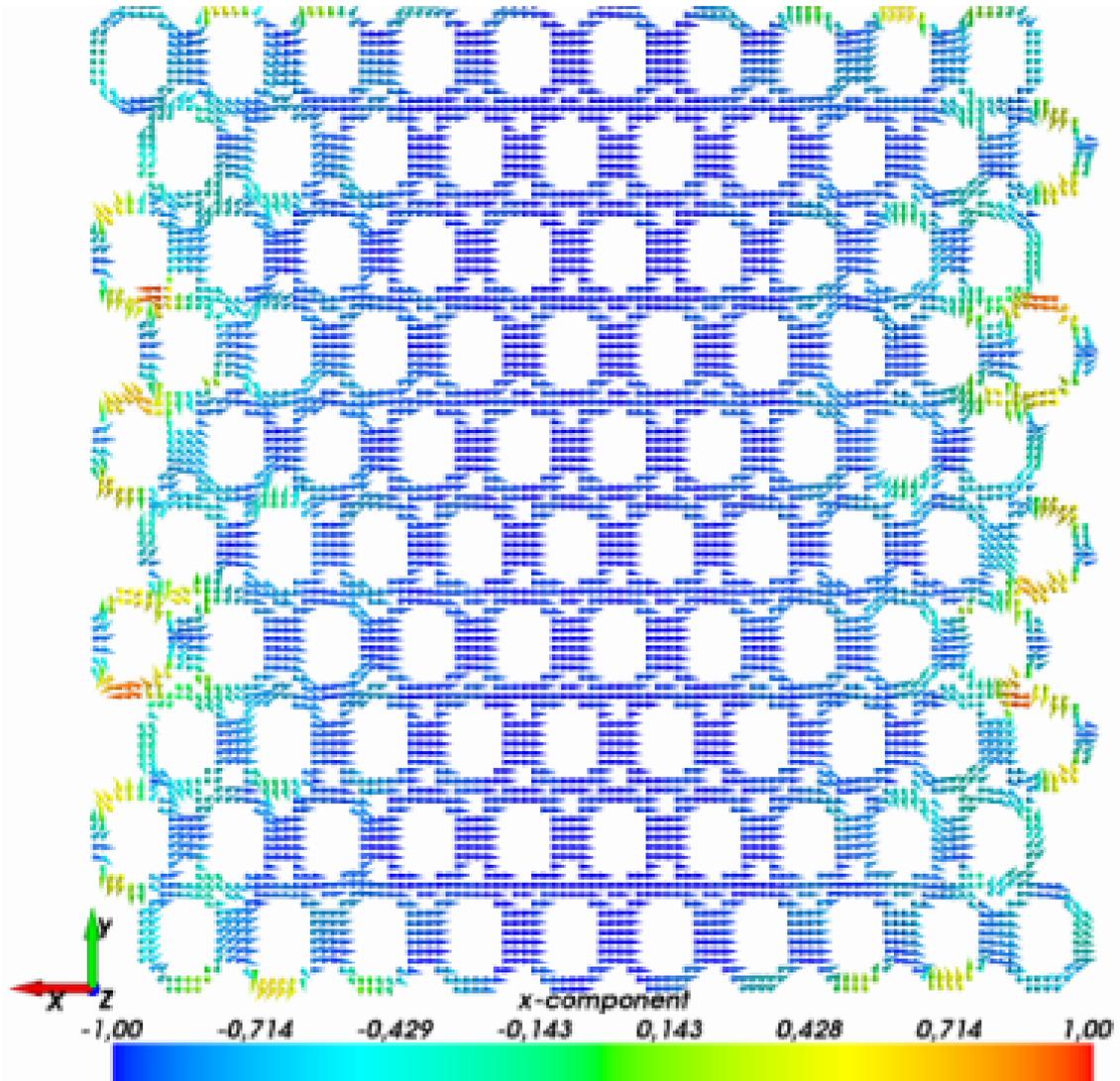
Fonte: Produzido pelo autor

Na Figura 48 podemos ver o comportamento das componentes da magnetização, que são perpendiculares ao campo. De forma geral, podemos verificar um comportamento semelhante ao apresentado no arranjo com $\varepsilon = 0.1$, por outra parte vemos algumas diferenças.

Especificamente, no início, antes de se estabelecer o comportamento oscilatório, há um sinal forte que está associado ao primeiro pico da Figura 48. Isto se deve ao fato que aumentando as componentes perpendiculares, o ângulo entre os momentos aumenta e com isso há um aumento na energia de troca. Entre o mencionado aumento de m_y e m_z e o início do processo oscilatório destas componentes há uma diminuição que ocorre no vale entre os dois picos da Figura 48.

A seguir apresentamos a sequência de mapas que nos oferecem mais detalhe do processo de inversão.

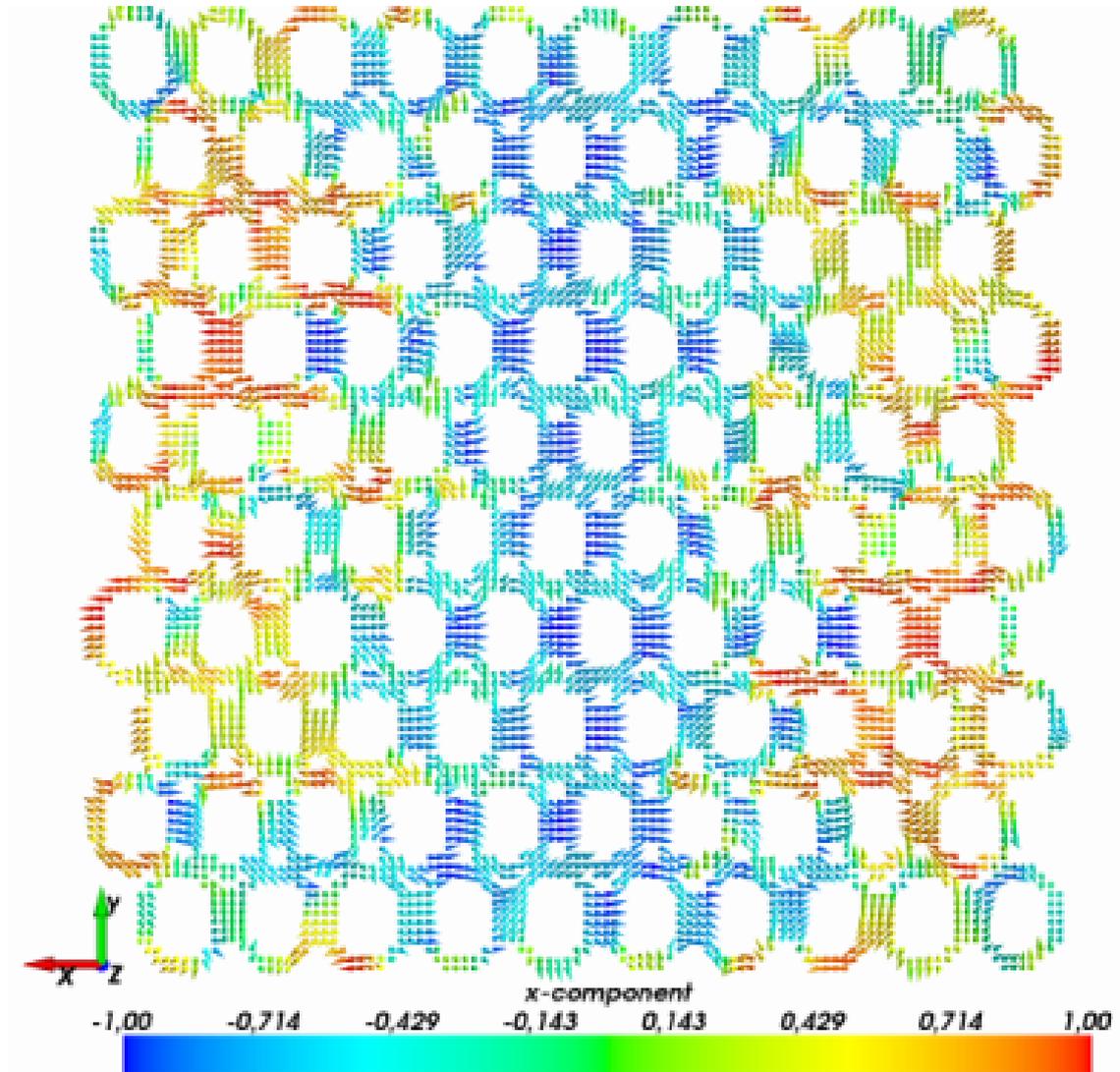
Figura 49 – Distribuição da magnetização no instante $1.624 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.5$



Fonte: Produzido pelo autor

A Figura 49 apresenta o mapa em $t = 0.1624 ns$. Podemos observar que já nesse instante a reversão estava em estado avançado pois observamos momentos invertendo na quinta coluna. Lembrando que para esse instante a amostra com $\varepsilon = 0.1$ tinha um ponto de inversão na terceira coluna de cascas. Já neste momento para $\varepsilon = 0.5$ podemos observar estruturas de fechamento de fluxo e algumas cascas na quarta coluna em estado *onion*. Alguns vórtices são observados nas cascas dos extremos e momentos que saim do plano da figura.

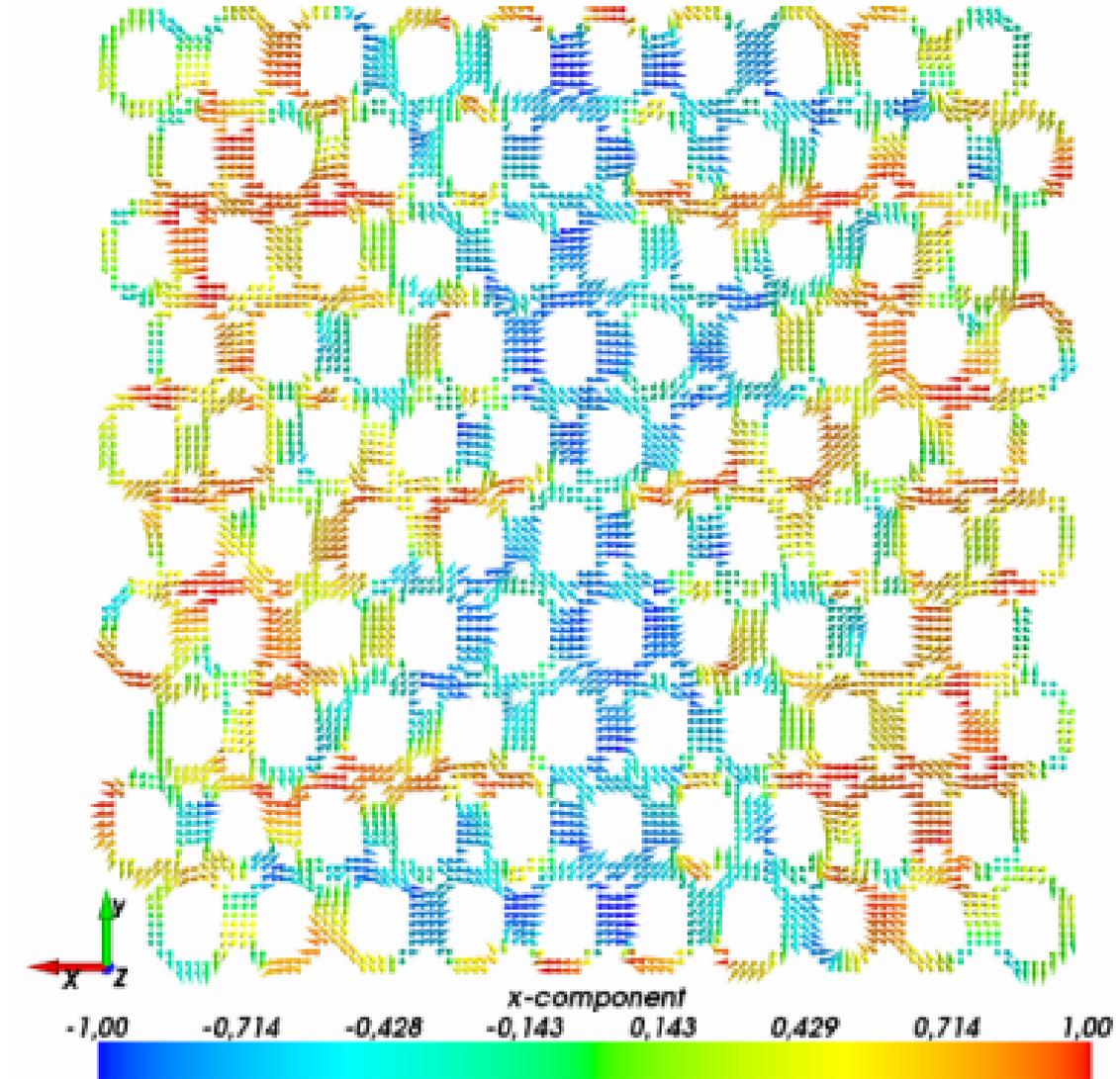
Figura 50 – Distribuição da magnetização no instante $2.576 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.5$



Fonte: Produzido pelo autor

Da mesma forma que em $\varepsilon = 0.1$ na amostra com $\varepsilon = 0.5$ vemos que em $0.2576 ns$ os momentos de todos o arranjo conseguiram entrar no processo de reversão. Na Figura 50 podemos observar um estado que inclui muitas estruturas reportadas na literatura.(42–44). Podemos ver, que ainda neste instante há alguns momentos que se encontram na direção negativa do eixo X.

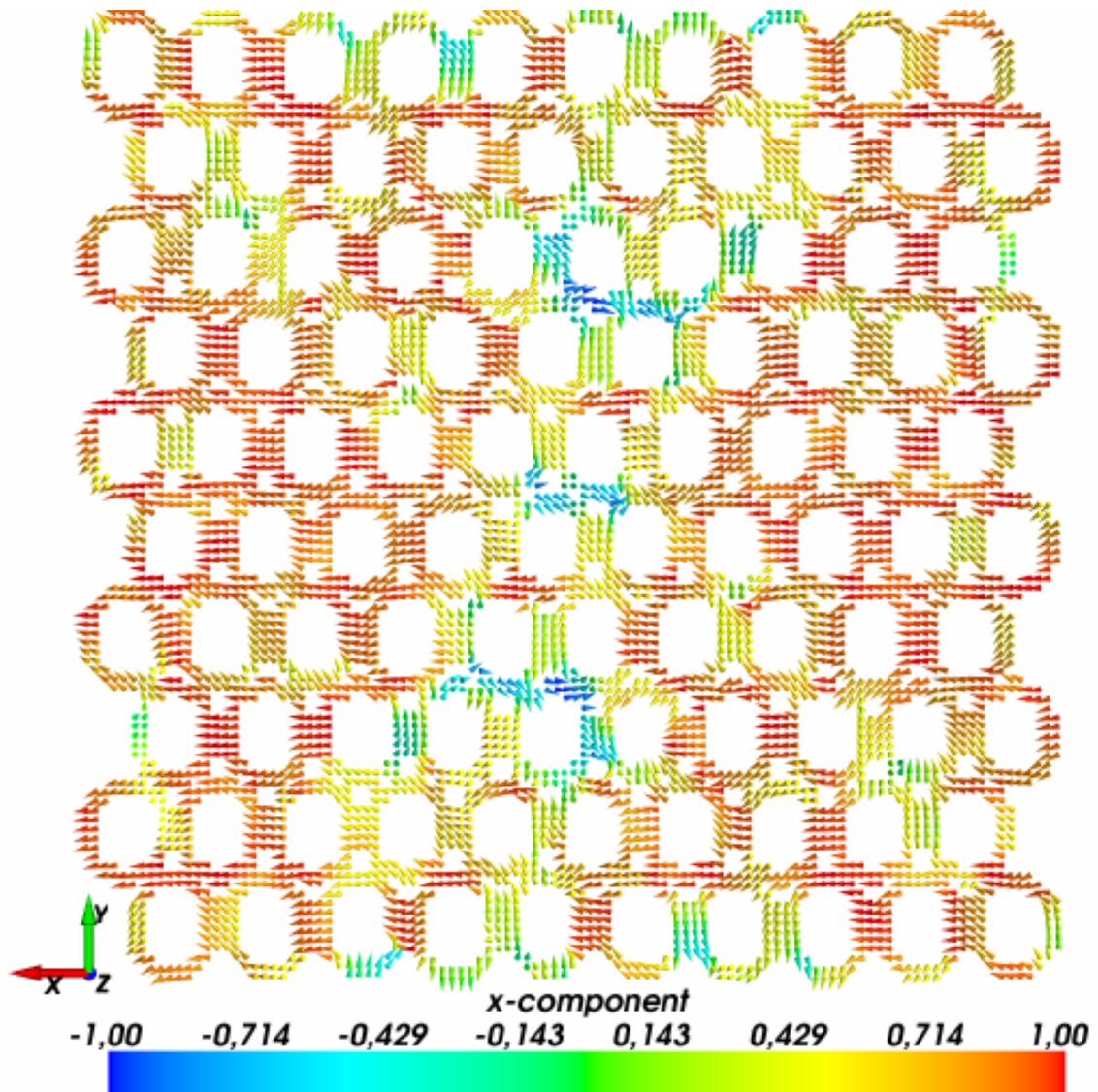
Figura 51 – Distribuição da magnetização no instante $3.024 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.5$



Fonte: Produzido pelo autor

Quando comparamos as Figuras 50 e 51 podemos observar que a evolução para o instante $t = 0.3024 ns$ compreende um conjunto de momentos que conseguiram se orientar com o campo externo. Por outra parte existem ainda muitos no estado inicial, causa esta do aumento da energia de troca no arranjo. Em todo o mapa podemos observar uma estrutura de padrões que pode levar a estudos com vista a análises estatísticos de regiões em uma e outra direção de eixo X.

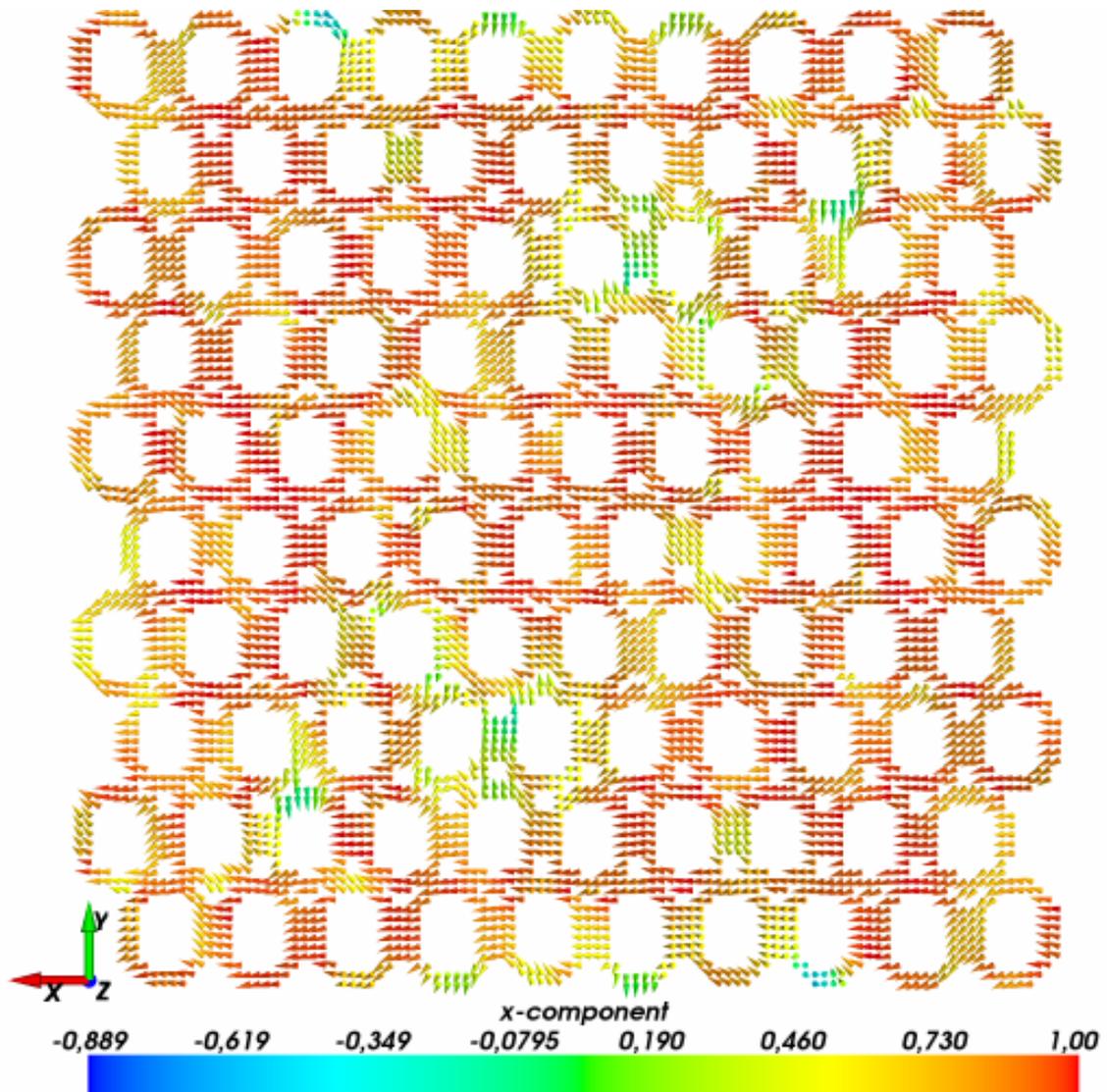
Figura 52 – Distribuição da magnetização no instante $6.048 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.5$



Fonte: Produzido pelo autor

A Figura 52, que mostra o mapa em $t = 0.6048 ns$, apresenta uma estrutura de cores mais suave que a Figura 51. Isto certamente está vinculado ao fato de que neste instante a energia de troca começou diminuindo depois do pico. Por outro lado há muitos momentos fora da direção de saturação. Como mencionamos no início deste sub-tópico, o fato destas cascas serem finas, origina a condição de fechamento do fluxo dentro da própria casca. É por isso que observando a Figura 52 cada casca tem as duas cores e ainda se apresentam vórtices no arranjo.

Figura 53 – Distribuição da magnetização no instante $7.728 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.5$



Fonte: Produzido pelo autor

Por último, na Figura 53 podemos analisar o mapa em $t = 0.7728 ns$. Neste instante vemos já momentos orientados definitivamente com o campo e ainda se observam estruturas de vórtice e fechamento que deixam a energia de troca com um valor ainda alto. Observamos de forma geral que a inversão dos momentos em $\varepsilon = 0.5$ ocorre de uma forma menos brusca que em $\varepsilon = 0.1$. Já que as diferenças são tantas de uma amostra para outra, vale a pena apresentar os resultados para a casca mais fina estudada neste trabalho.

5.2.2.3 Simulação para casca de espessura $\varepsilon = 0.8$

Como antes mencionamos, apresentamos a continuação os resultados para cascas de Ni com espessura $\varepsilon = 0.8$. De acordo com a comparação entre as amostras com $\varepsilon = 0.1$ e $\varepsilon = 0.5$

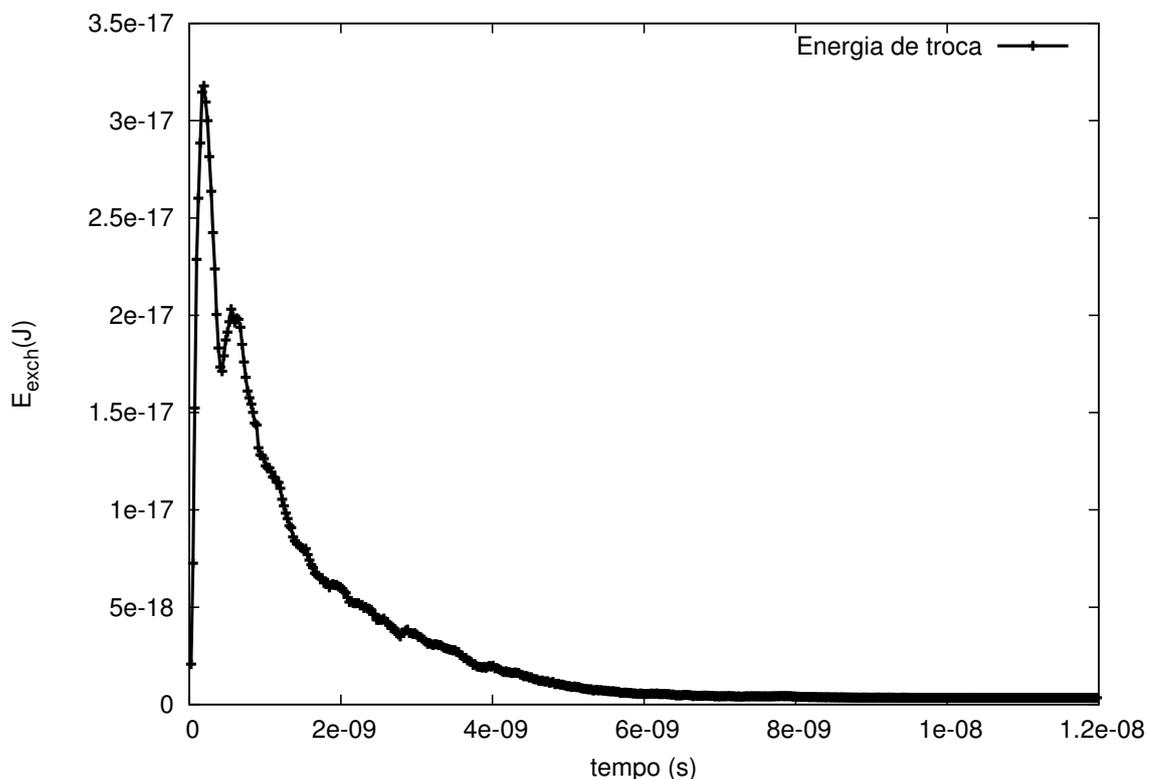
esperamos que os efeitos das interações dipolares sejam muito fortes na amostra apresentada a seguir.

Mais uma vez apresentamos a dependência temporal da energia de troca e das componentes Y e Z da magnetização. Além disso mostramos aqui os mapas para $t = 0.192, 0.432, 0.552, 2.808$ e $4.056 ns$. Mais uma vez os efeitos de espessura modificam os tempos característicos da evolução temporal já mencionada.

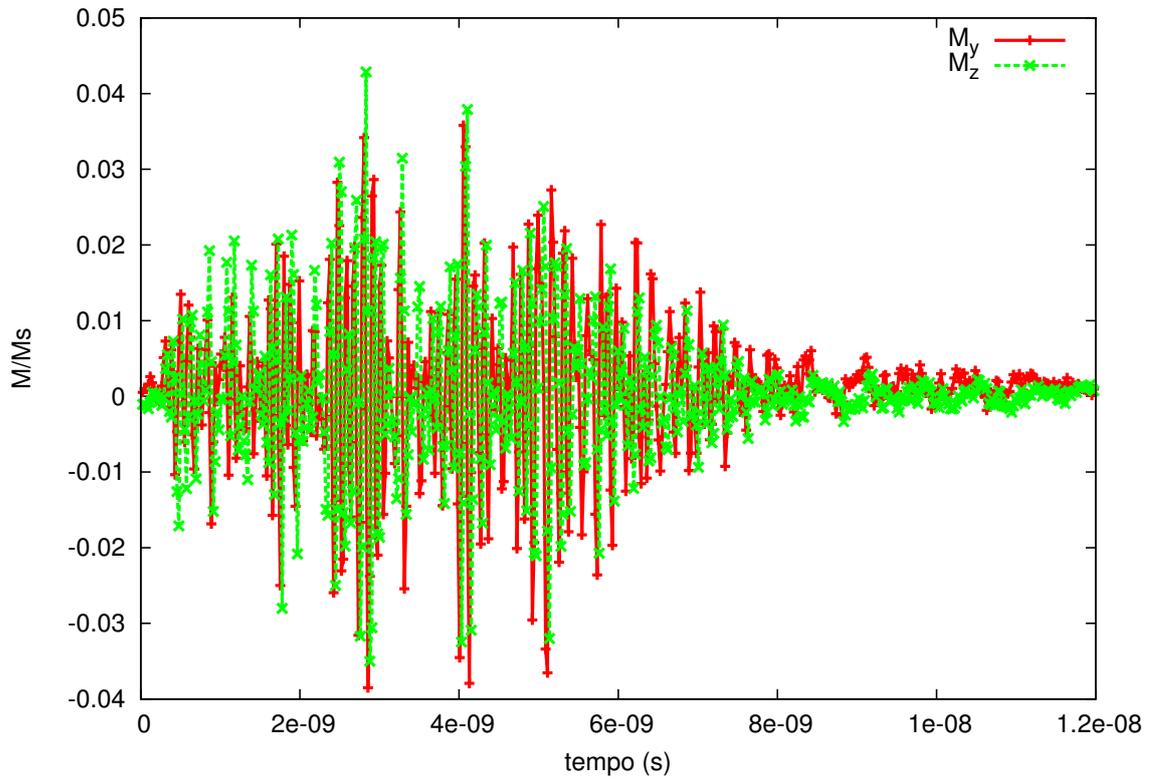
A Figura 54 apresenta a dependência da energia de troca com o tempo, durante a reversão dos momentos, na amostra com $\varepsilon = 0.8$. Dois aspectos tornam este gráfico bem diferentes daqueles apresentados até o momento. Primeiro que tudo, na estrutura de dois picos já observado em outros arranjos, o primeiro é bem pequeno em relação ao segundo. Para $\varepsilon = 0.8$ o primeiro pico na energia de troca mostra uma tendência rápida do sistema a mudar a direção dos momentos. Por outra parte os efeitos de autodesmagnetização dentro da casca devem ser bem fortes. Dessa forma há uma tendência a voltar os momentos ao estado inicial, por isso a energia de troca começa diminuir. Por outro lado, o campo para reverter todos os momentos, não precisa tanta energia como no caso de $\varepsilon = 0.1$, já que agora temos menos momentos. Sendo assim, o segundo pico é menor e termina indo o sistema para o estado de saturação.

A segunda característica que chama atenção na curva da Figura 54, é que o tempo de inversão total é bem maior do que nas outras amostras aqui apresentadas.

Figura 54 – Energia de troca durante a reversão da magnetização



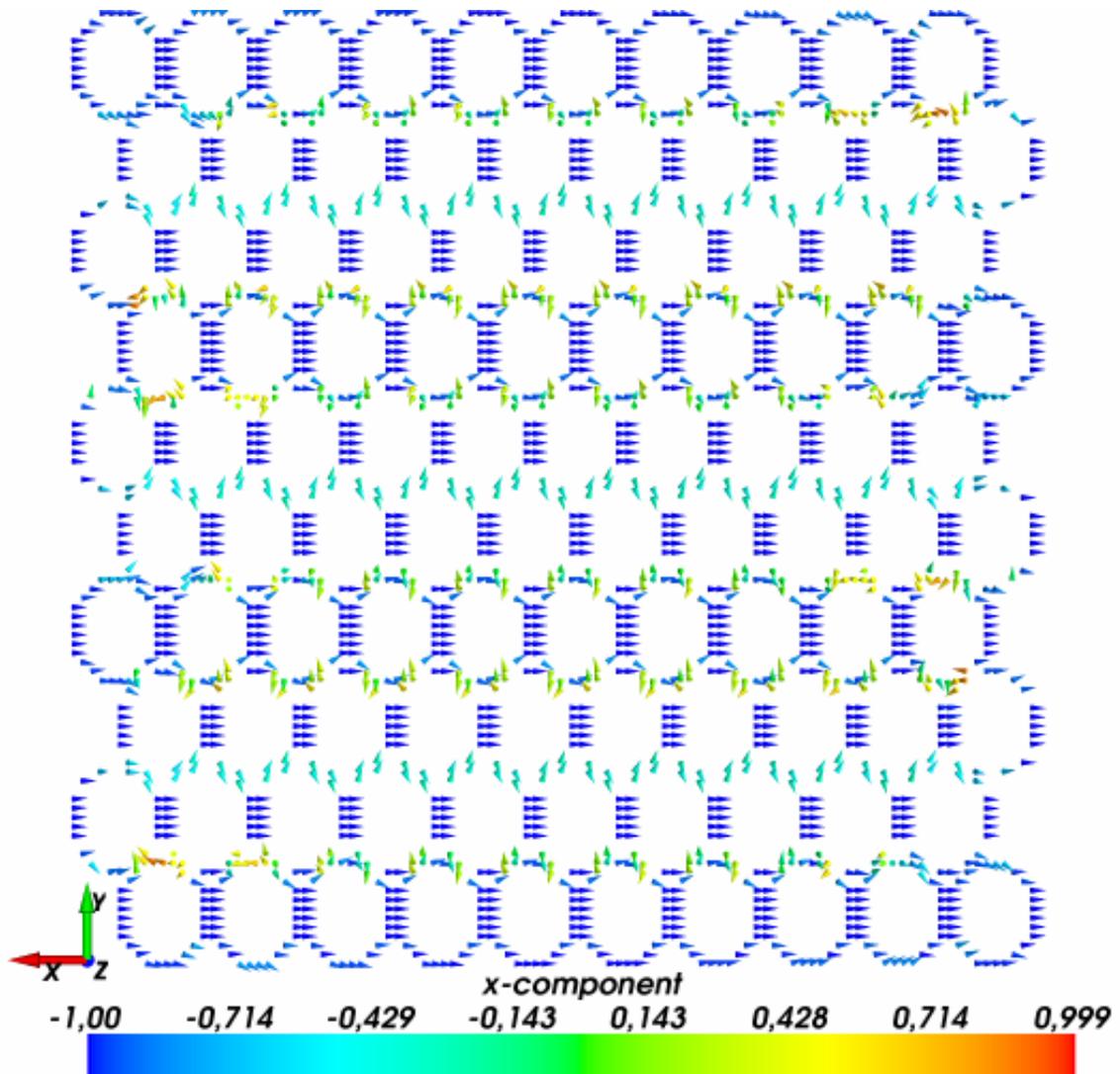
Fonte: Produzido pelo autor

Figura 55 – Evolução temporal das componentes m_y e m_z da magnetização

Fonte: Produzido pelo autor

Observando a Figura 55 podemos ver a dinâmica das componentes da magnetização, que são perpendiculares ao campo aplicado. Podemos presenciar uma curva com oscilações de frequência muito maior que em $\varepsilon = 0.1$ e $\varepsilon = 0.5$. Além disso é difícil separar os dois picos que dão origem à evolução da energia de troca. É Bem chamativo que a relaxação neste arranjo ocorre depois de 8 ns , o que se refere a um tempo muito alto.

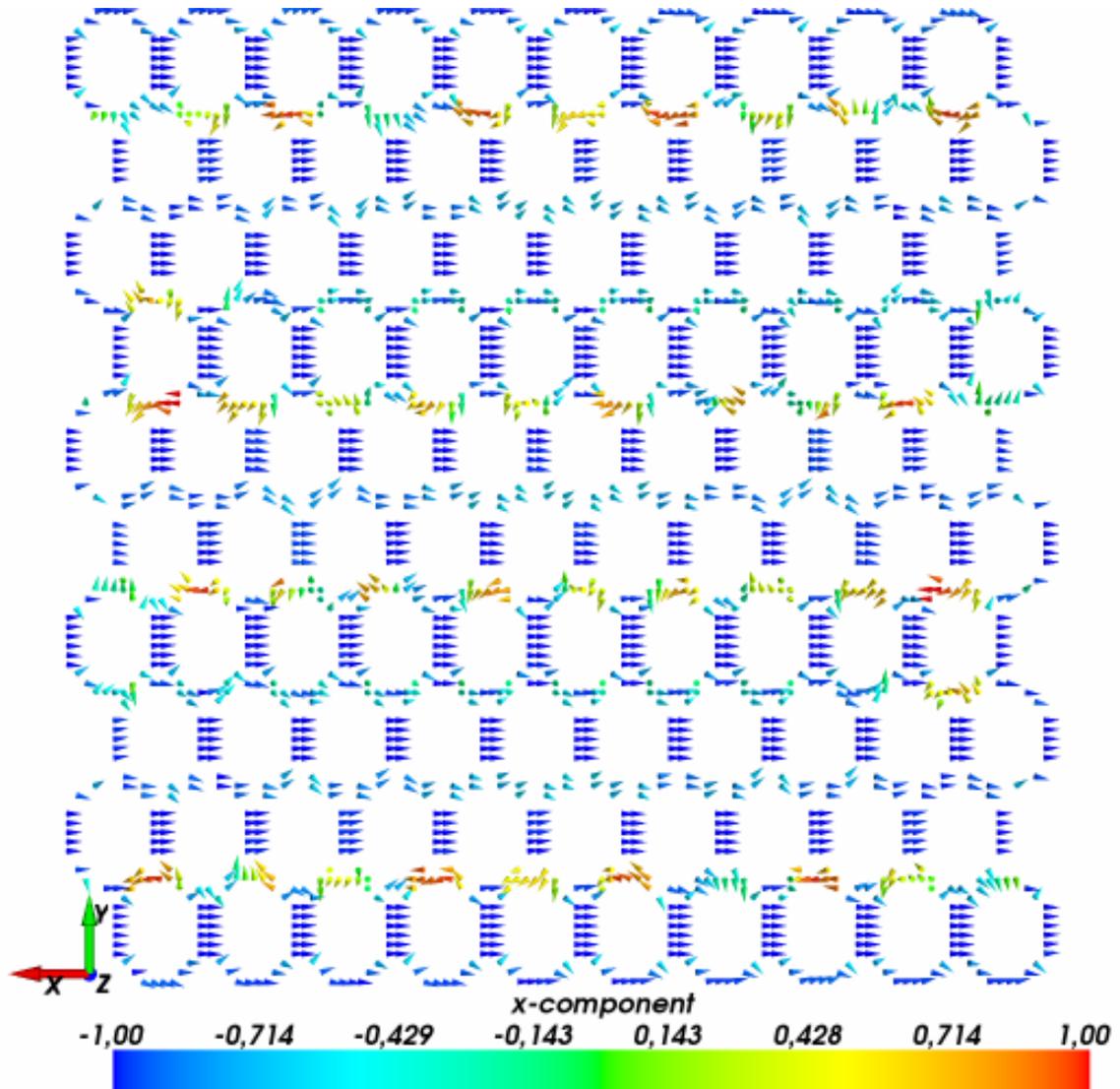
Figura 56 – Distribuição da magnetização no instante $1.92 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.8$



Fonte: Produzido pelo autor

Na Figura 56 podemos observar o mapa em $0.192 ns$ que apresenta uma estrutura de momentos bem comportada apresentando na união das cascas, filas ordenadas de momentos que alternam em forma oscilatória, sua direção. Para esta casca é difícil apresentar estrutura de fechamento de fluxo, já que as paredes são muito finas. Por outra parte, sempre é possível encontrar comportamento *onion* não bem definido.

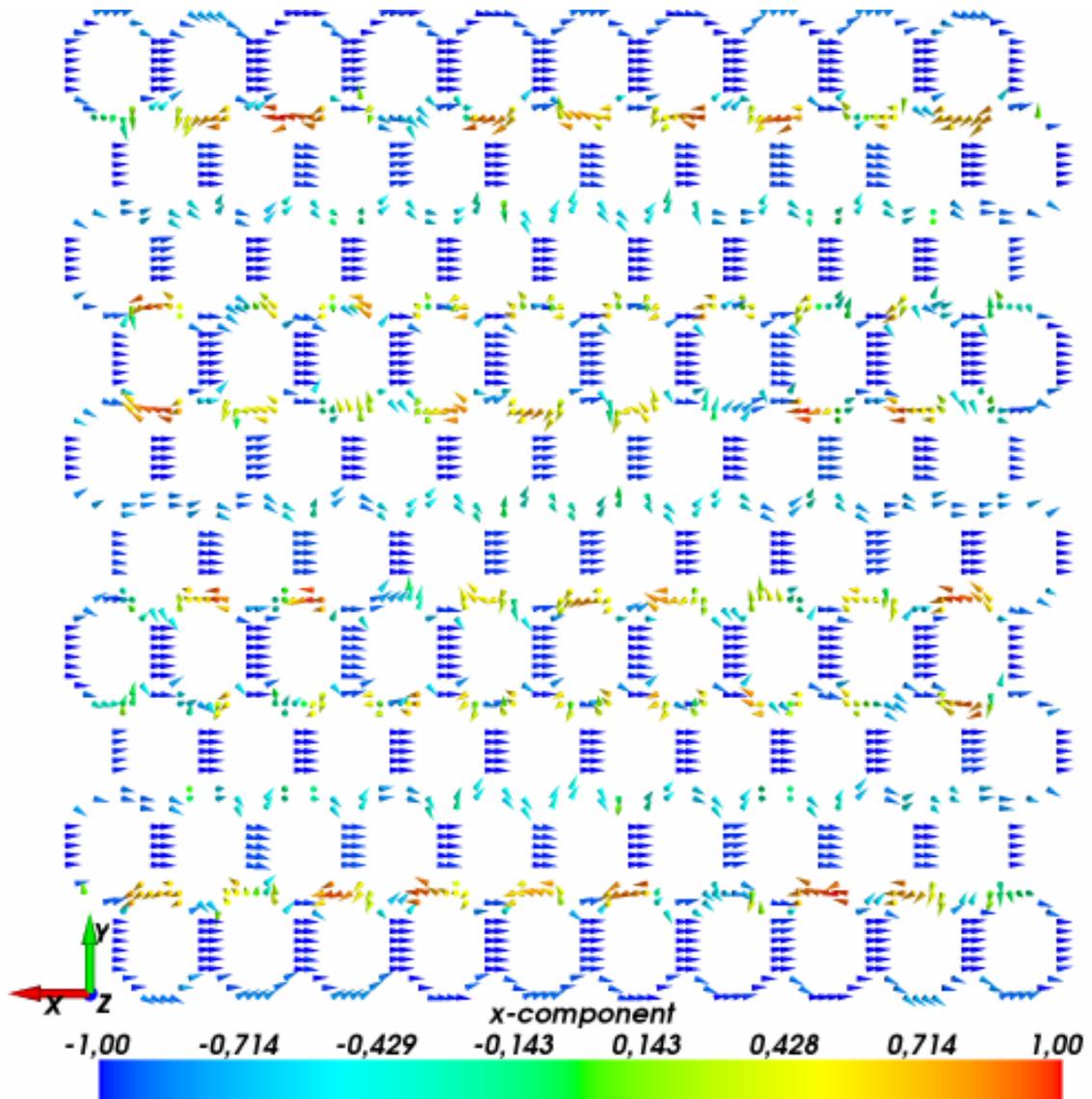
Figura 57 – Distribuição da magnetização no instante $4.32 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.8$



Fonte: Produzido pelo autor

Em $0.432 ns$, apresentado na Figura 57, o comportamento é bem semelhante ao anterior, com a diferença marcante de ter momentos fora do plano do mapa que podem contribuir fortemente com aumento da energia de troca do sistema.

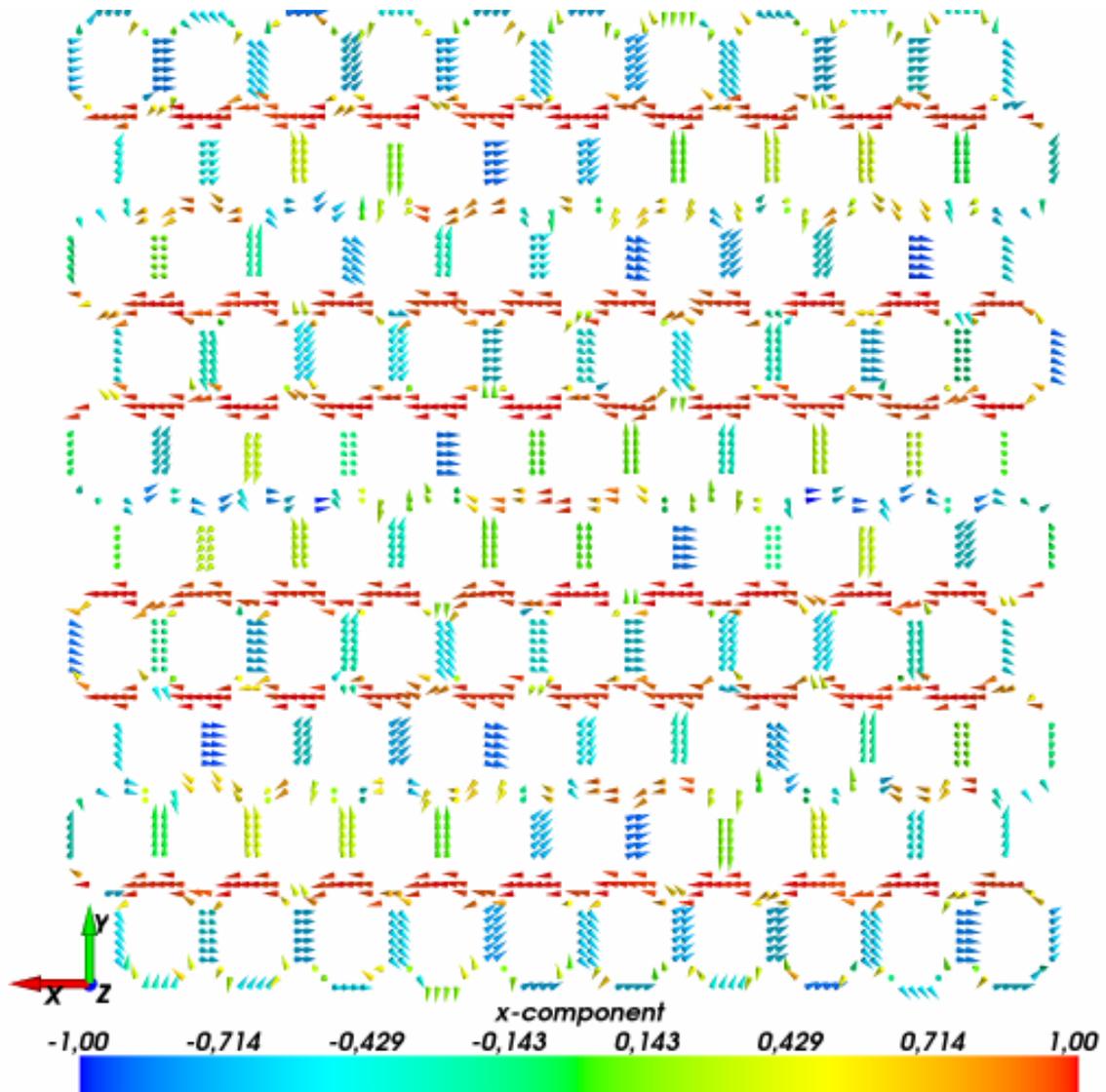
Figura 58 – Distribuição da magnetização no instante $5.52 \cdot 10^{-10} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.8$



Fonte: Produzido pelo autor

Na Figura 58, os efeitos observados em instante anterior, são mais pronunciados e os efeitos de oscilação com frequência tão elevada devem estar associados com *flipping* do momento em cada ponto da amostra onde há contato entre as cascas no arranjo. Isto se observa nas linhas horizontais apresentadas na Figura.

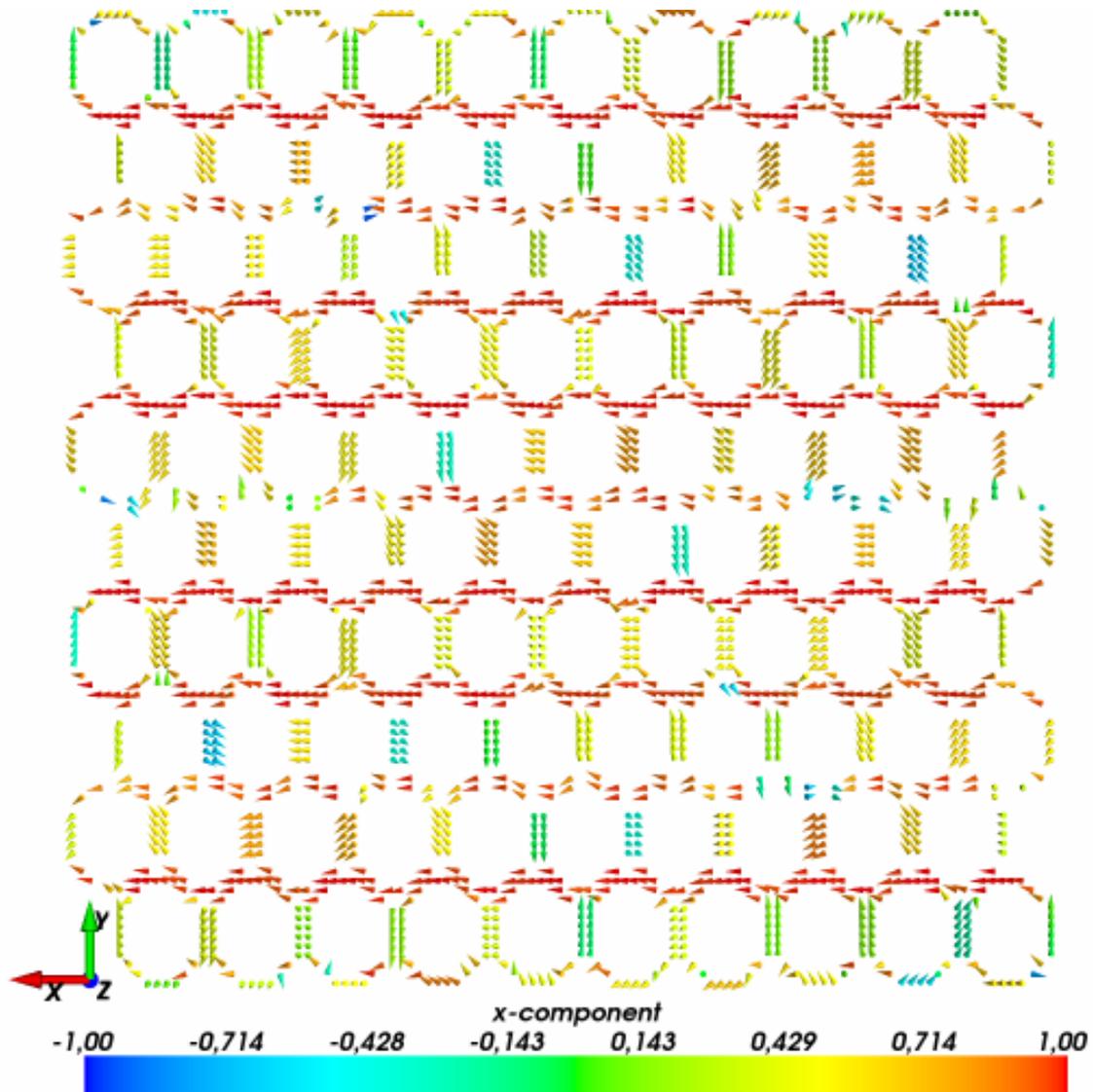
Figura 59 – Distribuição da magnetização no instante $2.808 \cdot 10^{-09} s$ para arranjos de Ni com $\epsilon = 0.8$



Fonte: Produzido pelo autor

Na Figura 59, aos $2.808 ns$, podemos ver de fato os momentos sendo orientados na direção do campo. Observe que as estruturas de linha no contato entre cascas é mantida e aqueles momentos que na Figura 58 permaneciam orientados para a parte negativa do eixo X, agora começam inverter.

Figura 60 – Distribuição da magnetização no instante $4.056 \cdot 10^{-09} s$ para arranjos de Ni com $\varepsilon = 0.8$



Fonte: Produzido pelo autor

A estrutura é repetida na Figura 60 depois de $4.056 ns$. Podemos verificar no conjunto, uma estrutura ondulada que se estende ao longo da linha horizontal no contato entre as cascas na direção diagonal, também vemos comportamento ondulatório. No contato entre as cascas na linha vertical, também vemos formato ondulatório, que também é observado na banda do arranjo. É muito provável que seja este o motivo da oscilação na solução da magnetização aqui apresentada, e também do longo tempo de relaxação.

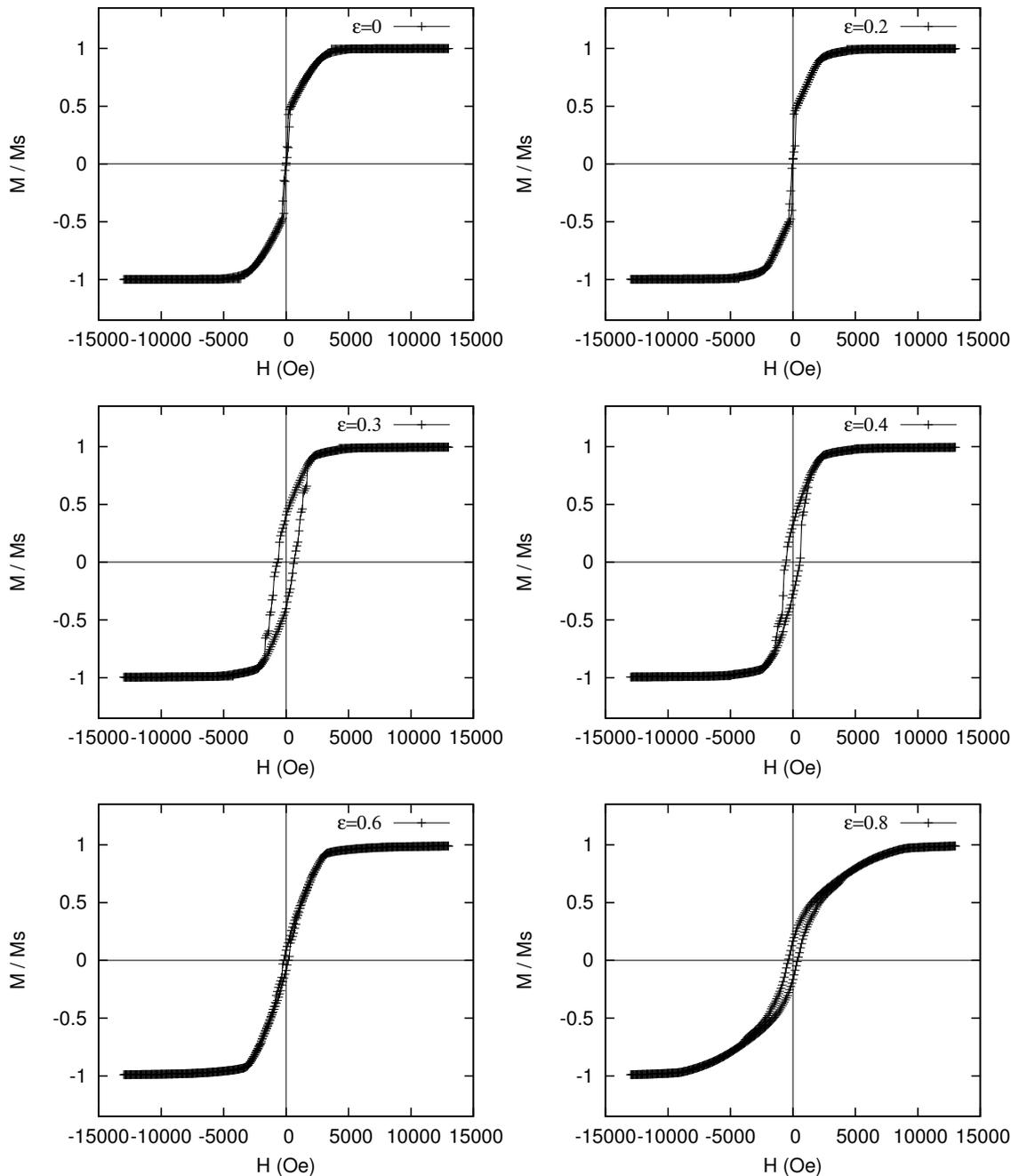
Até aqui as interações dipolares dominam os processos em função de ε . É de grande importância incluir outras energias.

5.3 Resultados da simulação do sistema de 100 nanocascas magnéticas de Co

5.3.1 Simulação estática

5.3.1.1 Simulação para o campo aplicado paralelo ao plano do arranjo

Na Figura 61 se mostram os ciclos de histerese simulados para diferentes valores da espessura ε . Em geral, os ciclos de histerese se caracterizam por ser abertos na região de baixos campos ($< 2500 Oe$), o que foi reportado em (88) para cadeias de esferas ocas mesoscópicas. A magnetização remanente encontra-se no intervalo de 0.01 – 0.4, o valor de 0.04 foi reportado em (88), semelhante ao valor determinado para os nanofios de Co e Fe medidos com o eixo do fio perpendicular ao campo aplicado (89). O campo coercitivo, H_c , tem a faixa de valores de 50 – 700 Oe , o que é muito maior em relação ao valor *bulk*, 10 Oe (86). Esta melhoria é em parte atribuída ao efeito da superfície ou anisotropia de forma (23). Ele é também maior do que 40 Oe obtido com as esferas ocas de 500 nm de diâmetro e 40 nm de espessura da casca (23). Encontra-se próximo do valor 60 Oe reportado em (88).

Figura 61 – Ciclos de histerese simulados para diferentes valores da espessura, ε 

Fonte: Produzido pelo autor

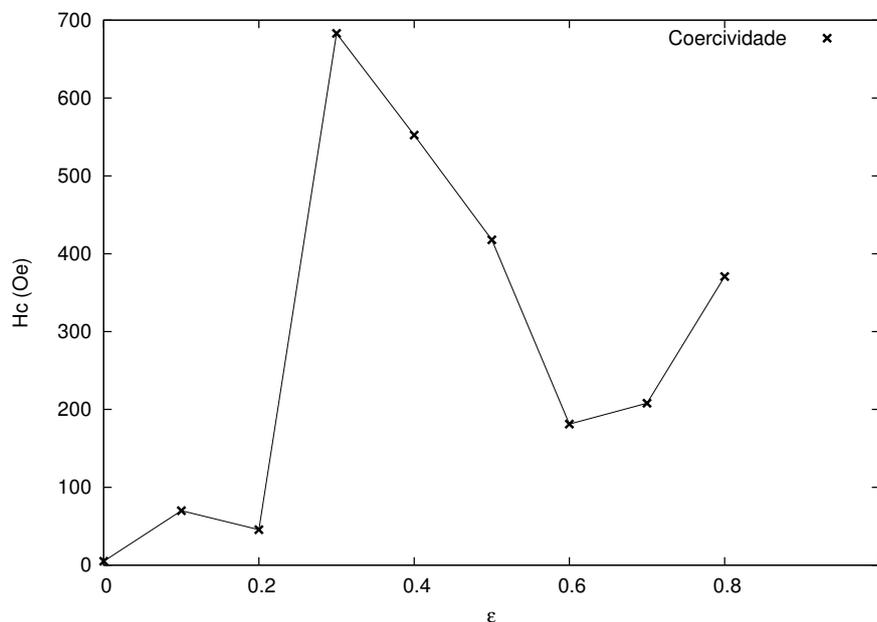
Para este estudo colocamos o eixo de mínima energia magnetocristalina perpendicular ao arranjo. O objetivo principal desta escolha é devido às aplicações em sistemas de gravação magnética perpendicular. Além disso, para avaliar os efeitos da espessura da casca e a interação autodesmagnetizante, é mais interessante colocar esta direção.

Primeiro que tudo vale destacar na Figura 61, que o processo de magnetização no plano ocorre em dois regimes. Um deles é o inicial, onde os primeiros momentos começam a se alinhar

com o campo. Nesta primeira parte o momento total da amostra aumenta rapidamente até um valor de campo a partir do qual o campo magnetocristalino (perpendicular ao arranjo) começa dificultar o processo e o crescimento ocorre mais lentamente como se observa em $\varepsilon = 0, 0.2$ e mais suavemente nas outras amostras.

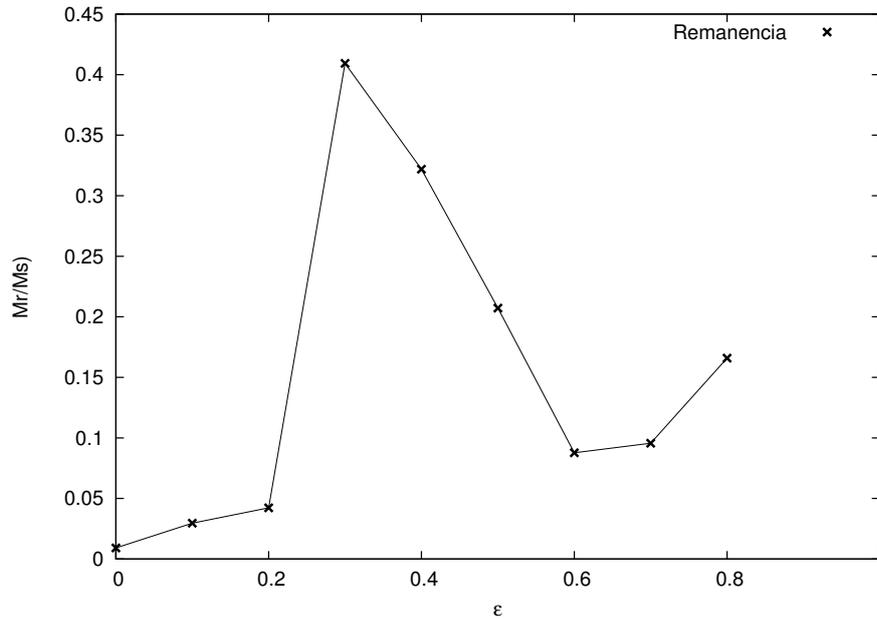
Observando ainda a Figura 61 podemos ver que com a diminuição da espessura (aumento de ε) os efeitos de interação começam se manifestar mostrando um aumento da coercividade até $\varepsilon = 0.3$. Depois, com o aumento de ε , a coercividade e a remanência diminuem provavelmente pelas mudanças no modo predominante da inversão da magnetização. Vale lembrar que em todos os casos, as formas da energia são responsáveis pelo comportamento do sistema.

Figura 62 – Coercividade em função da espessura da casca, ε



Fonte: Produzido pelo autor

Nas Figuras 62 e 63 observamos o comportamento do campo coercitivo e da remanência reduzida com o aumento do parâmetro ε . Na Figura 62 é digno de ser destacado o alto range de variação do campo coercitivo neste sistema. Observe que existe um pico que ocorre em $\varepsilon = 0.3$ provavelmente pelo fato de ser esta geometria favorável à manifestação de todos os mecanismos desmagnetizantes neste tipo de arranjo. Depois do aumento há uma grande queda que já foi relatada na Figura 61. O mesmo comportamento ocorre na remanência, atribuído às mesmas causas.

Figura 63 – Remanência em função da espessura da casca, ε 

Fonte: Produzido pelo autor

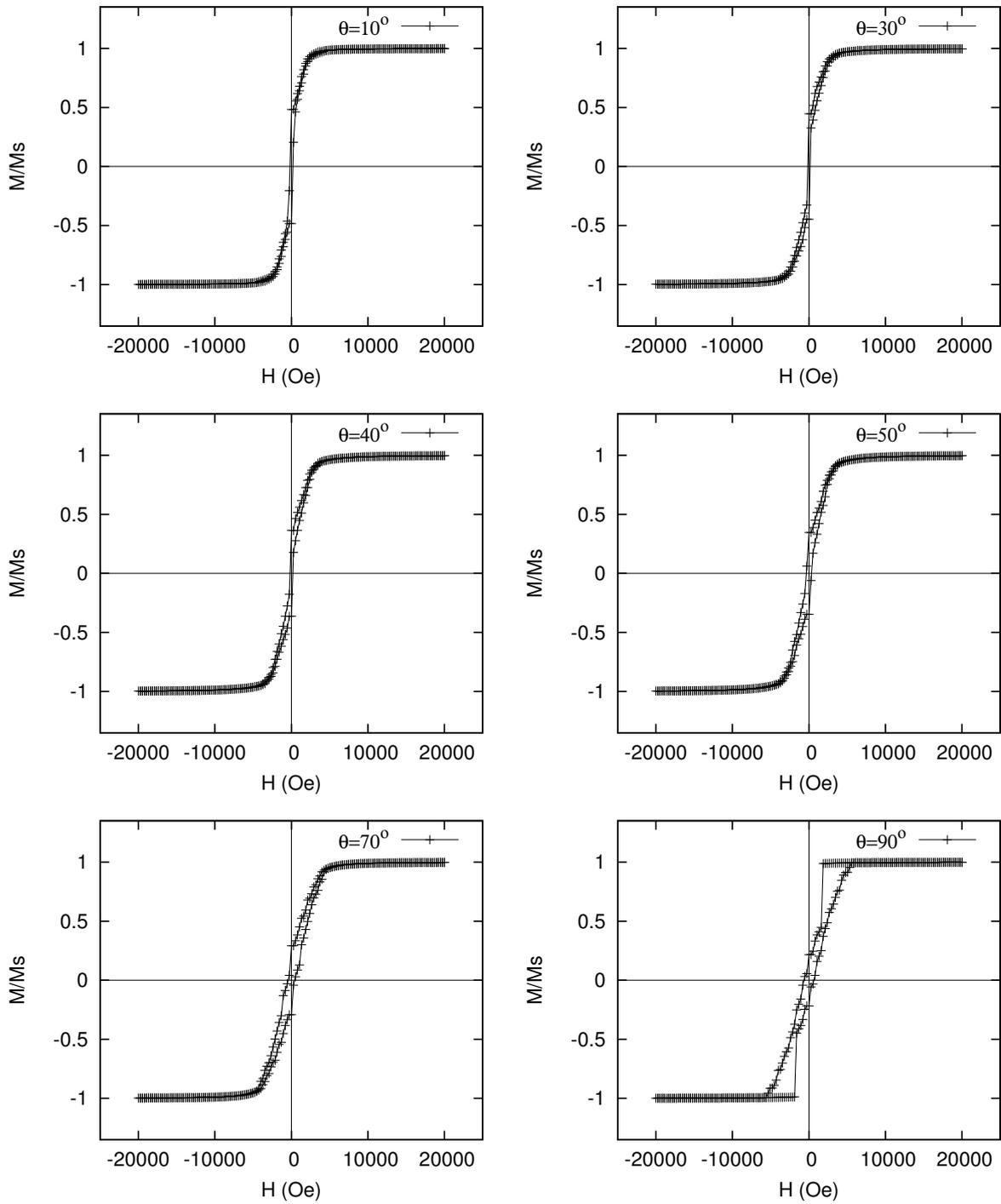
Com o objetivo de melhor compreender o comportamento destes arranjos fizemos um estudo mudando o ângulo de aplicação do campo externo.

5.3.1.2 Simulação para o campo aplicado formando ângulo θ com o eixo X

O estudo com diferentes orientações foi feito em todos os arranjos mudando ε . Novamente medimos o ângulo em relação à superfície do filme para assim manter um padrão de comparação com as amostras de Ni.

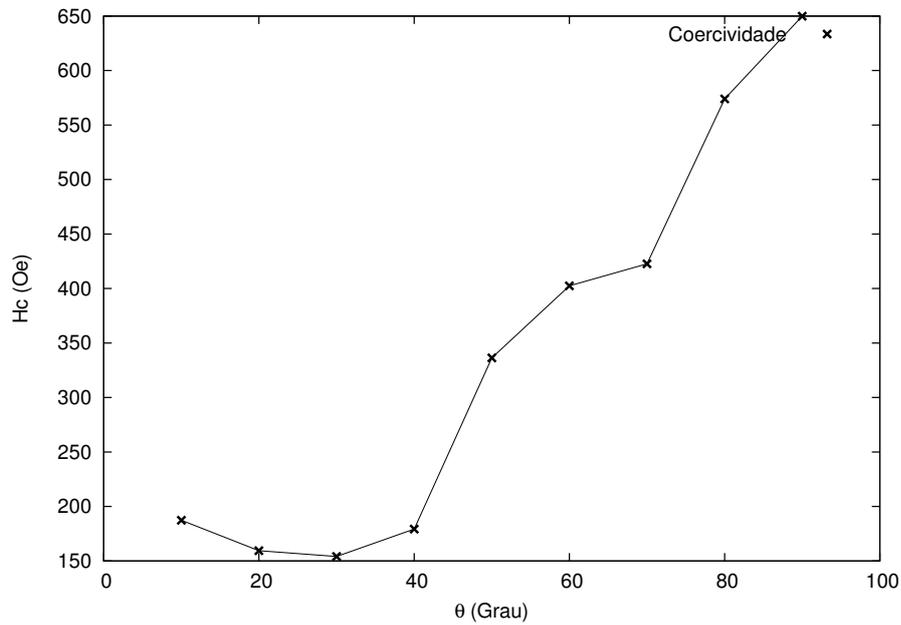
A Figura 64 apresenta as curvas de magnetização em alguns ângulos para a amostra de $\varepsilon = 0.2$. Observe que em baixos ângulos temos o mesmo comportamento já apresentado na Figura 61. Por outra parte, com o aumento do ângulo, o campo aplicado começa ser cada vez mais paralelo ao eixo fácil da energia magnetocristalina. Motivo este que leva a o formato das curvas mudar tão drasticamente. Observe que com aumento do ângulo o sistema se comporta cada vez mais próximo a um sistema de dois estados. Em ângulos intermediários observamos um formato distorcido que pode ser estudado mais na frente e cuja origem é a competição entre interações dipolares e magnetocristalinas.

Figura 64 – Ciclos de histerese simulados para a espessura $\varepsilon = 0.2$ variando o ângulo de aplicação do campo



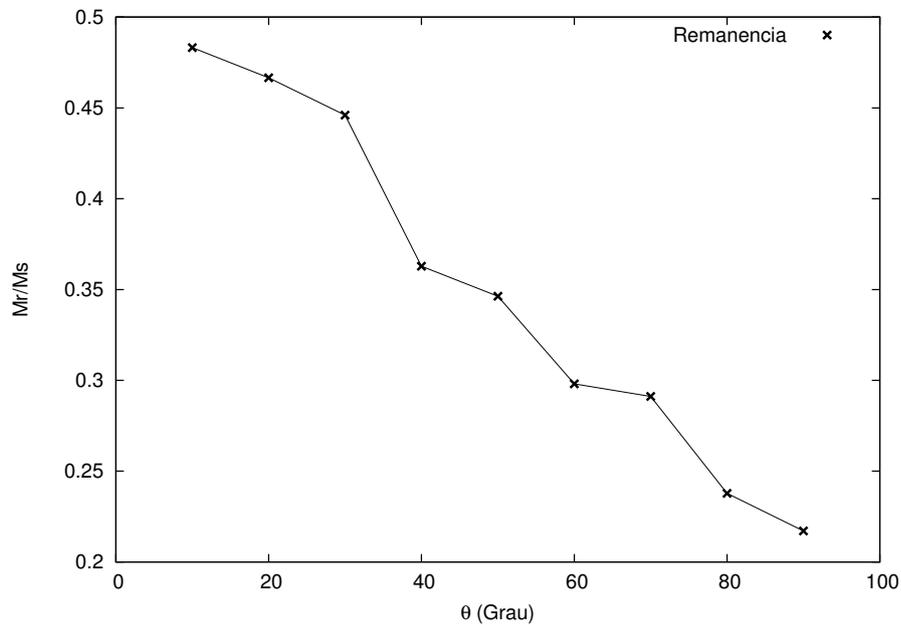
Fonte: Produzido pelo autor

Figura 65 – Coercividade em função do ângulo de aplicação do campo para $\varepsilon = 0.2$



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 66 – Remanência em função do ângulo de aplicação do campo para $\varepsilon = 0.2$



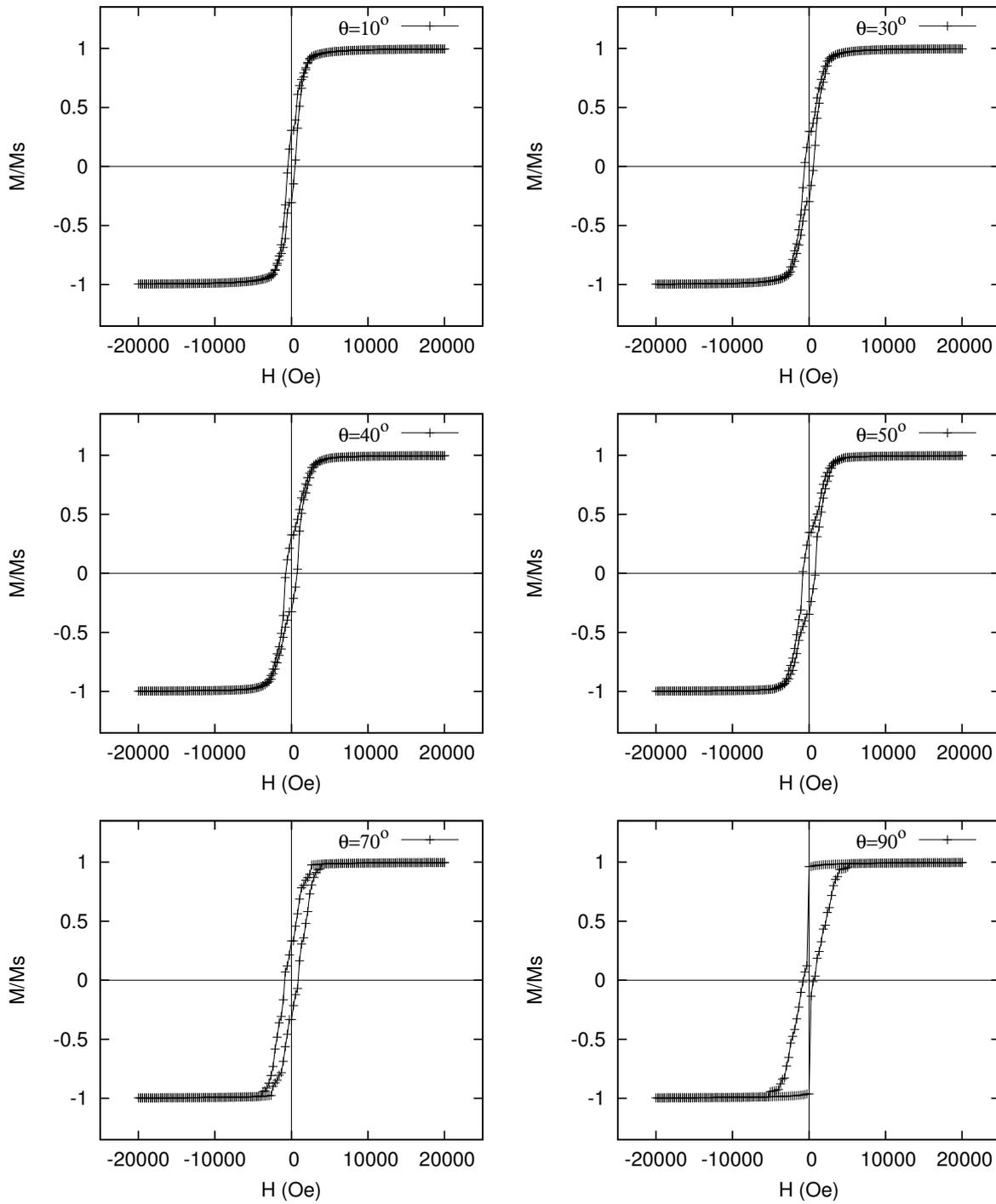
Fonte: Produzido pelo autor

As Figuras 65 e 66 apresentam a dependência da coercividade com o ângulo de aplicação do campo. Observemos que em $\varepsilon = 0.2$ o campo coercitivo aumenta à medida que o campo é mais perpendicular ao arranjo. O efeito oposto ocorre com a remanência reduzida.

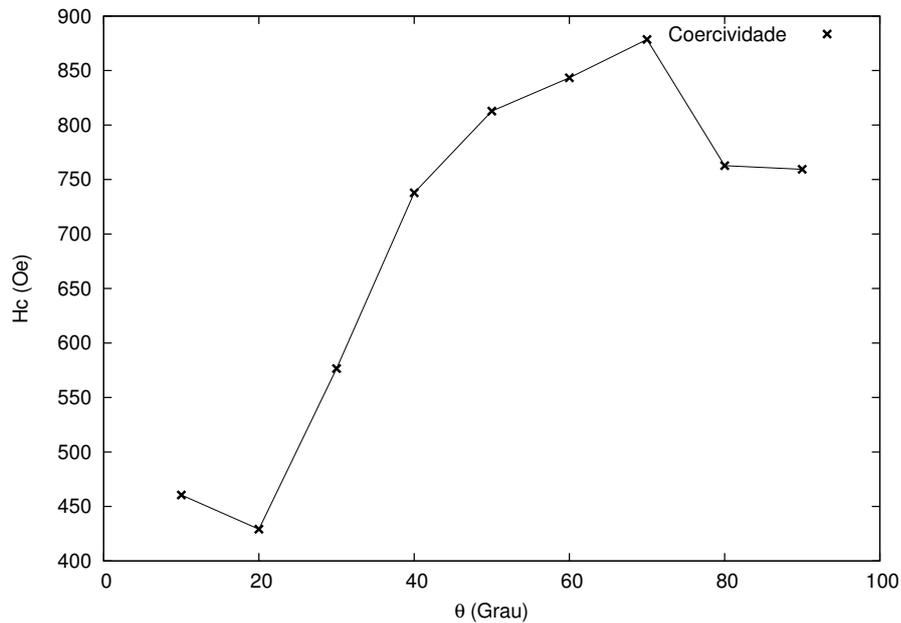
Para verificar a forma como os efeitos autodesmagnetizantes influenciam, fizemos a mesma análise com a amostra $\varepsilon = 0.5$, de casca mais fina.

Na Figura 67 apresentamos os ciclos de histerese para diferentes ângulos de aplicação do campo na amostra com cascas de $\varepsilon = 0.5$. Quando comparamos com as curvas das cascas de $\varepsilon = 0.2$ vemos ciclos mais longos em forma geral. Além disso com o aumento do ângulo de aplicação do campo, H_c aumenta até um limite. Neste caso a remanência começa acompanhando H_c .

Figura 67 – Ciclos de histerese simulados para a espessura $\varepsilon = 0.5$ variando o ângulo de aplicação do campo

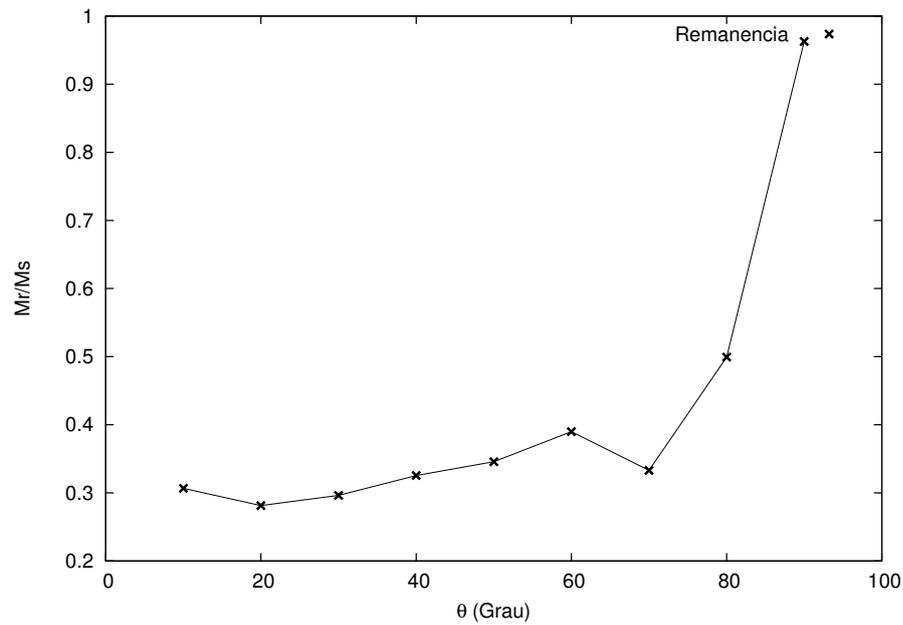


Fonte: Produzido pelo autor

Figura 68 – Coercividade em função do ângulo de aplicação do campo para $\varepsilon = 0.5$ 

Fonte: Produzido pelo autor

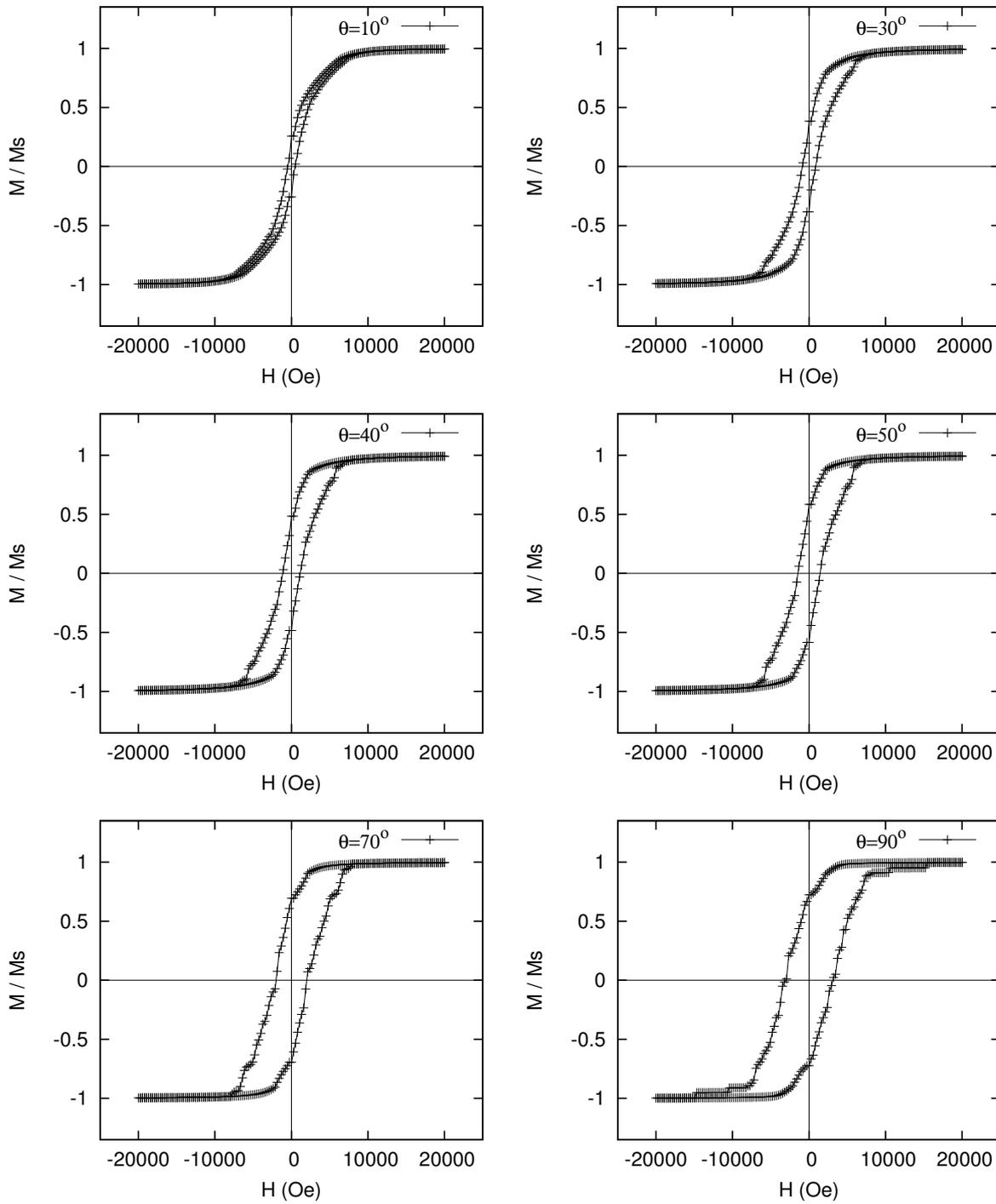
As curvas das Figuras 68 e 69 apresentam com maior detalhe o comportamento do campo coercitivo e da remanência à medida que o campo é mais perpendicular ao filme. Observe que o aumento em H_c ocorre até 875 Oe e que depois há uma diminuição. Na Figura 69 podemos observar que no ponto em que H_c começa diminuir, a remanência aumenta até um valor próximo de 1.

Figura 69 – Remanência em função do ângulo de aplicação do campo para $\varepsilon = 0.5$ 

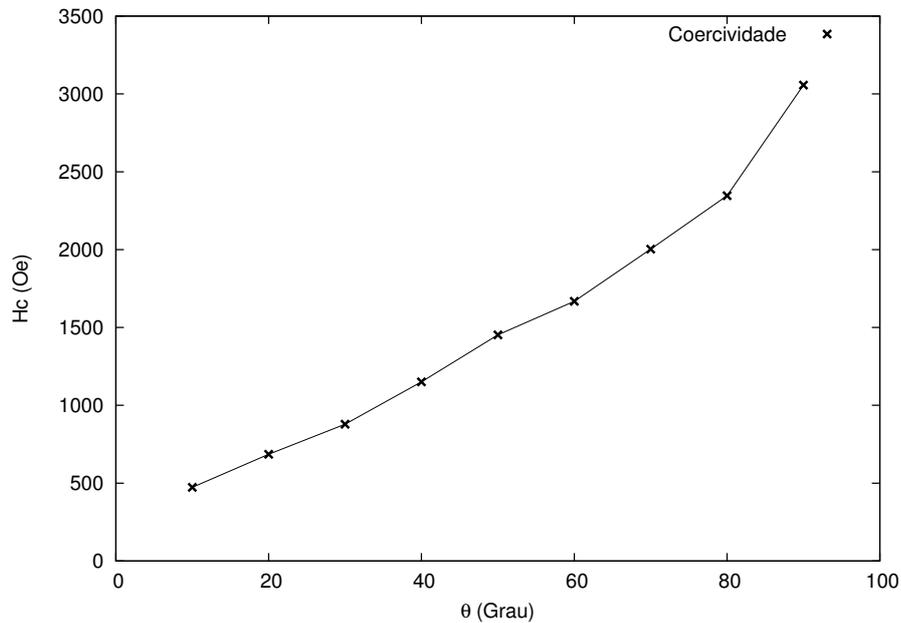
Fonte: Produzido pelo autor

O estudo com diferentes ângulos de campo aplicado no arranjo de cascas mais finas oferece um resultado surpreendente. Aparentemente o aumento de efeitos dipolares fazem que ocorra um travamento dos momentos a ponto de aumentar a coercividade a $3000 Oe$ para $\theta = 90 \text{ graus}$. A Figura 70 apresenta o resultado em $\varepsilon = 0.8$ e alguns ângulos de campo aplicado.

Figura 70 – Ciclos de histerese simulados para a espessura $\varepsilon = 0.8$ variando o ângulo de aplicação do campo

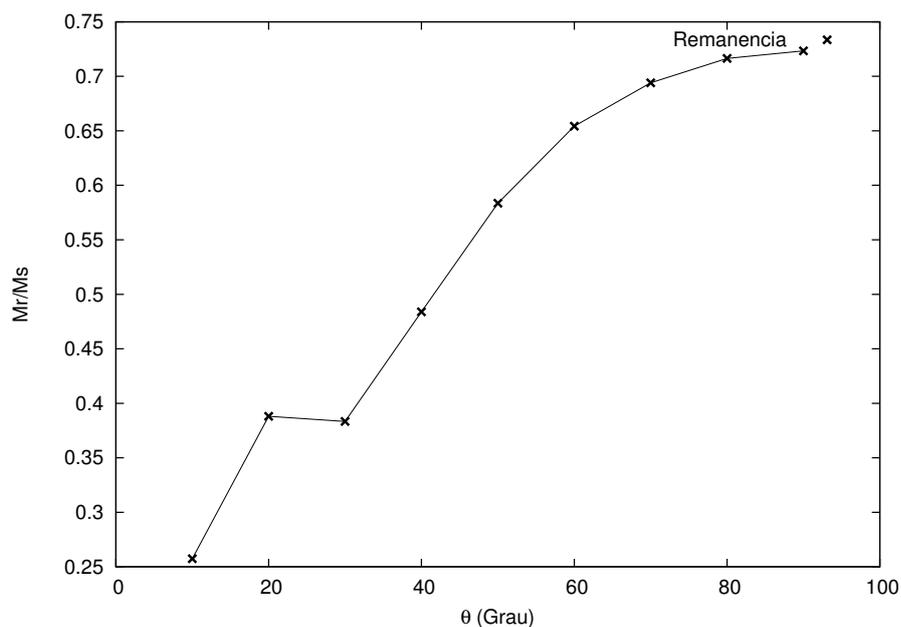


Fonte: Produzido pelo autor

Figura 71 – Coercividade em função do ângulo de aplicação do campo para $\varepsilon = 0.8$ 

Fonte: Produzido pelo autor

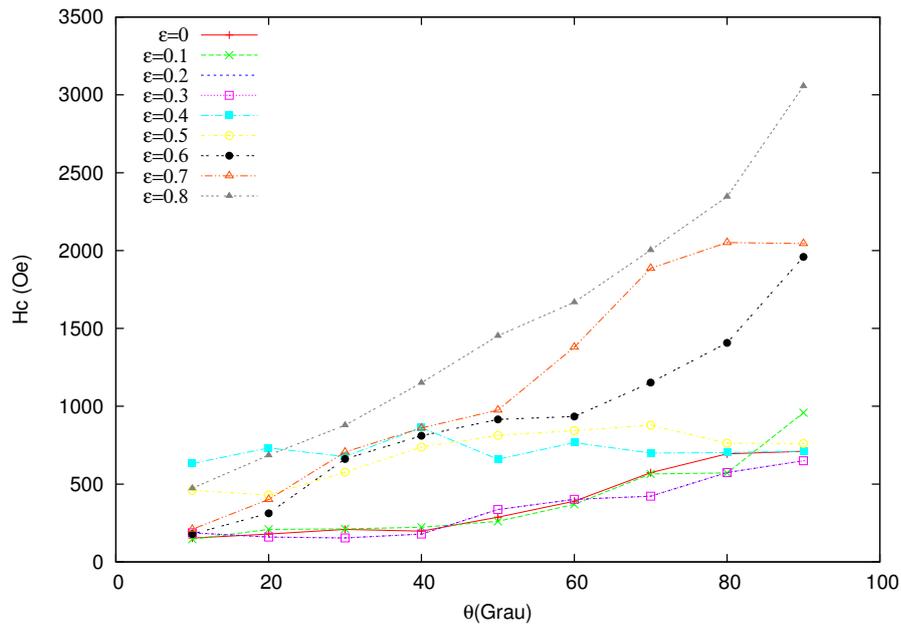
O comportamento da remanência e coercividade para este arranjo é apresentado nas Figuras 71 e 72. Aqui podemos garantir altos valores de coercividade que aumentam com ângulo θ e a remanência apresenta um comportamento semelhante com a tendência a saturar em 90 graus em valor pouco acima de 0.70.

Figura 72 – Remanência em função do ângulo de aplicação do campo para $\varepsilon = 0.8$ 

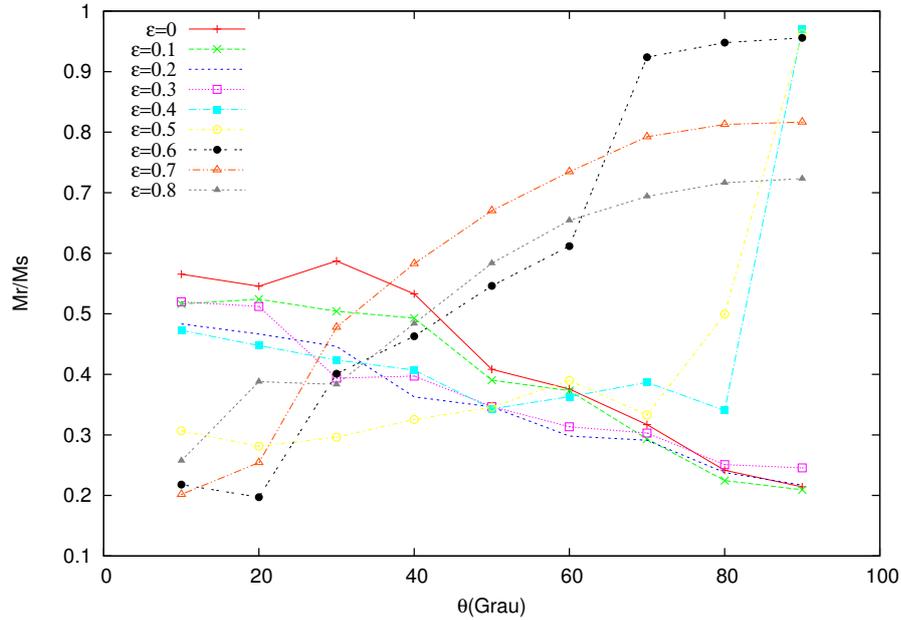
Fonte: Produzido pelo autor

Para melhor comparar o comportamento da remanência e da coercividade com o ângulo em todas as amostras, colocamos todos os gráficos nas Figuras 73 e 74. Observemos que o comportamento da coercividade é sempre aumentar independentemente da espessura da camada (valor de ε). O câmbio mais visível é no valor absoluto, que vai desde 300 até 3000 Oe para cascas cada vez mais finas. A remanência já apresenta mudança de comportamento em $\varepsilon = 0.4$ que será melhor estudado seu motivo em próxima seção.

Figura 73 – Coercividade em função do ângulo para diferentes espessuras ε da casca



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 74 – Remanência em função do ângulo para diferentes espessuras ε da casca

Fonte: Produzido pelo autor

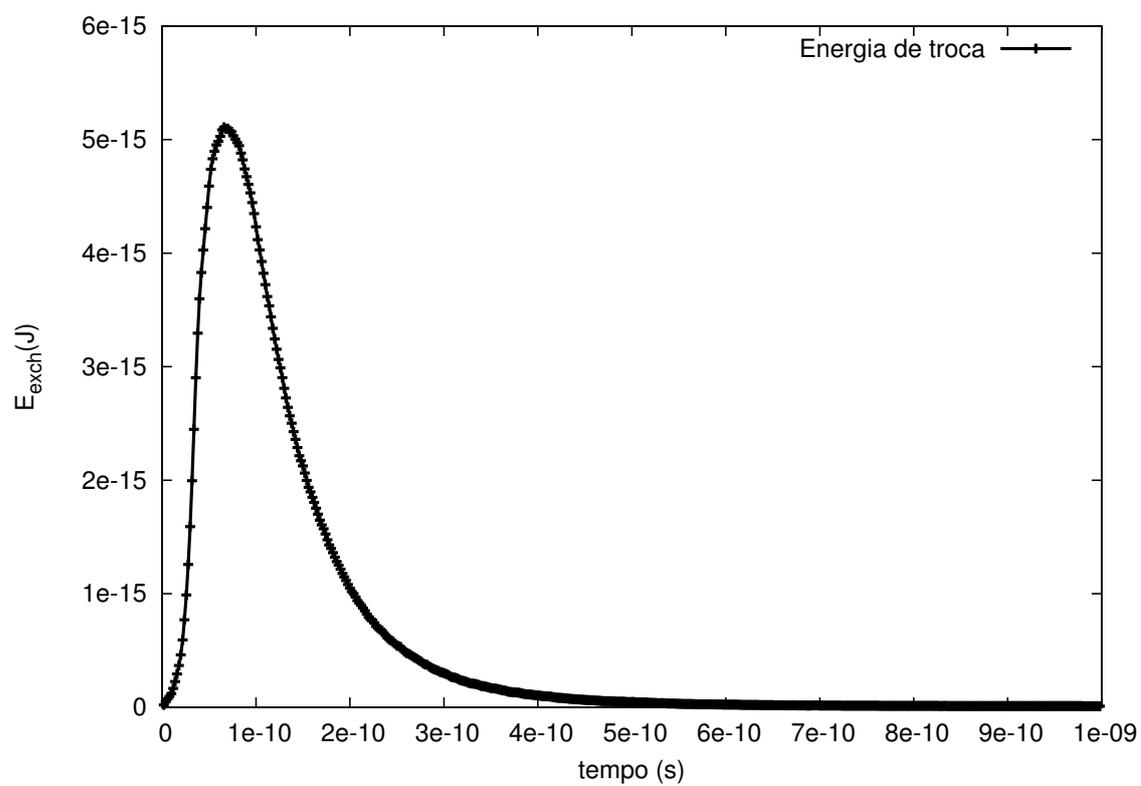
5.3.2 Estudo da dinâmica em arranjos de cascas de Co

Para melhor compreender o comportamento das cascas de Co, fizemos os estudos dinâmicos que tinham sido realizados em cascas de Ni. No ato de aplicar um campo na direção negativa do eixo X, saturamos a amostra e logo invertemos o campo. Neste momento medimos a energia de troca e as componentes da magnetização que são perpendiculares ao campo aplicado. Para apresentar alguns resultados, escolhemos as amostras com cascas de $\varepsilon = 0.1, 0.5$ e 0.8 afim de verificar os efeitos da espessura.

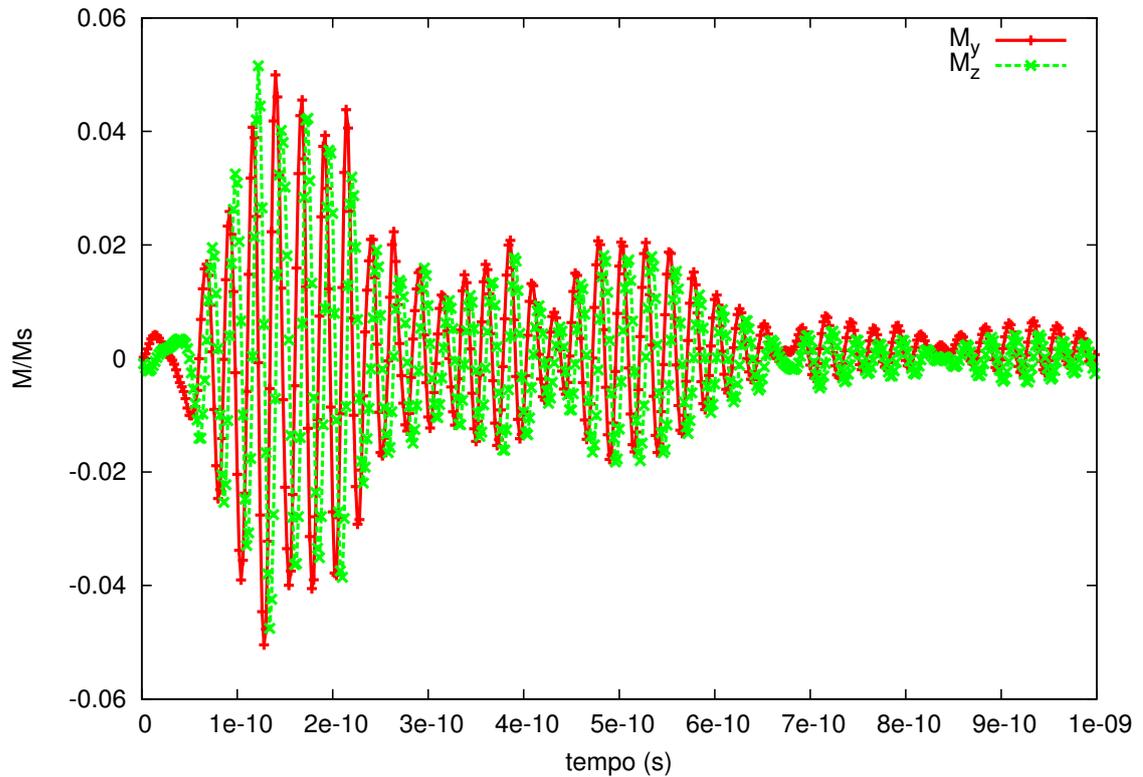
5.3.2.1 Simulação para cascas de espessura $\varepsilon = 0.1$

A Figura 75 mostra a evolução temporal da energia de troca para o arranjo de cascas com $\varepsilon = 0.1$. O resultado aqui é semelhante ao visto em cascas de Ni, apresentando um máximo em $t \approx 0.1$ ns. Logo depois a energia de intercâmbio diminui até o sistema saturar.

Figura 75 – Energia de troca durante a reversão da magnetização



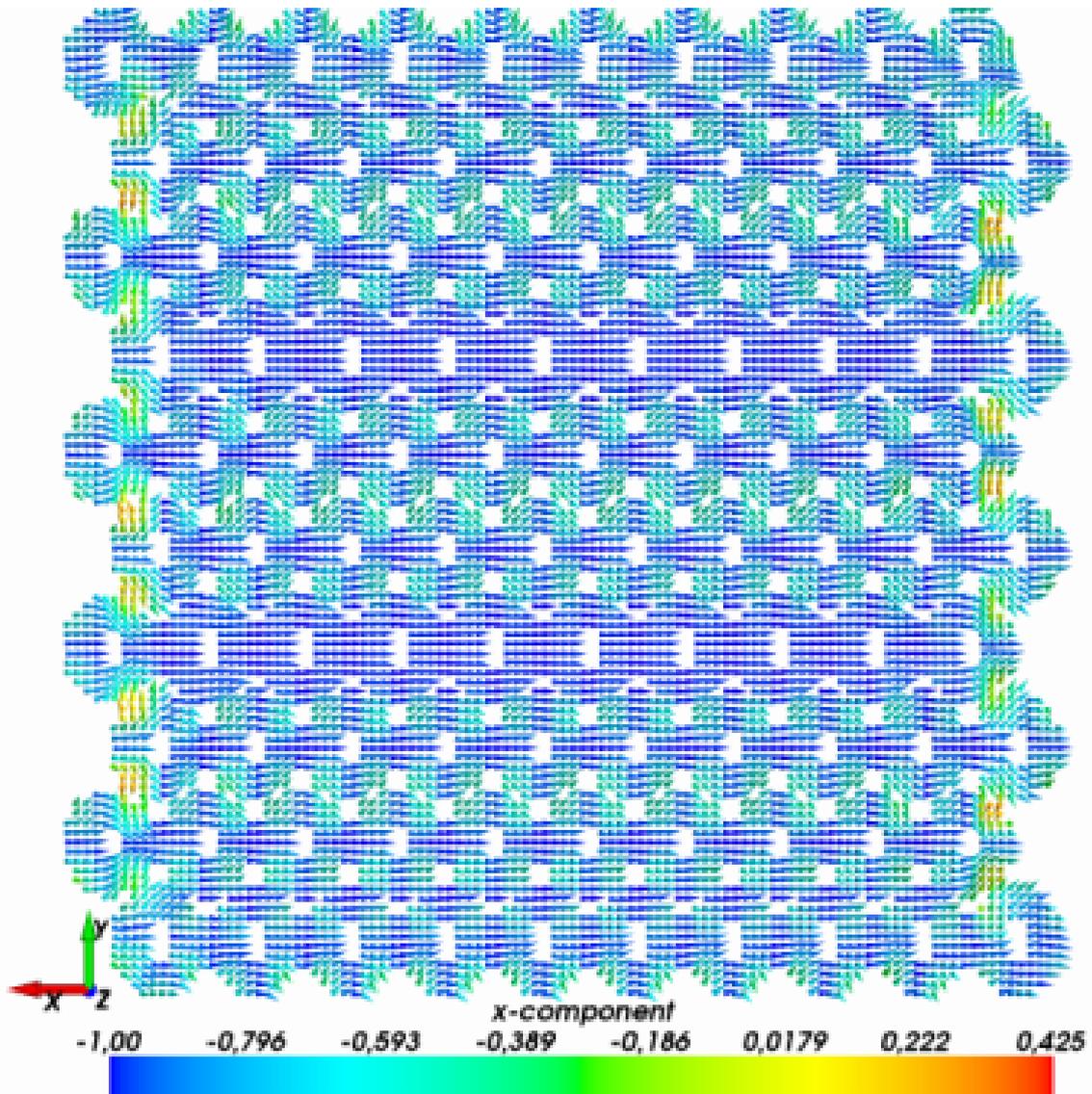
Fonte: Produzido pelo autor

Figura 76 – Evolução temporal das componentes m_y e m_z da magnetização

Fonte: Produzido pelo autor

A Figura 76 mostra a evolução das componentes m_y e m_z . É fácil observar que a envoltória a esta curva corresponde ao processo visto na Figura 75 para a energia de troca e os detalhes podem ser melhor vistos nos mapas apresentados a seguir.

Figura 77 – Distribuição da magnetização no instante $2.6 \cdot 10^{-11} s$ para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.1$

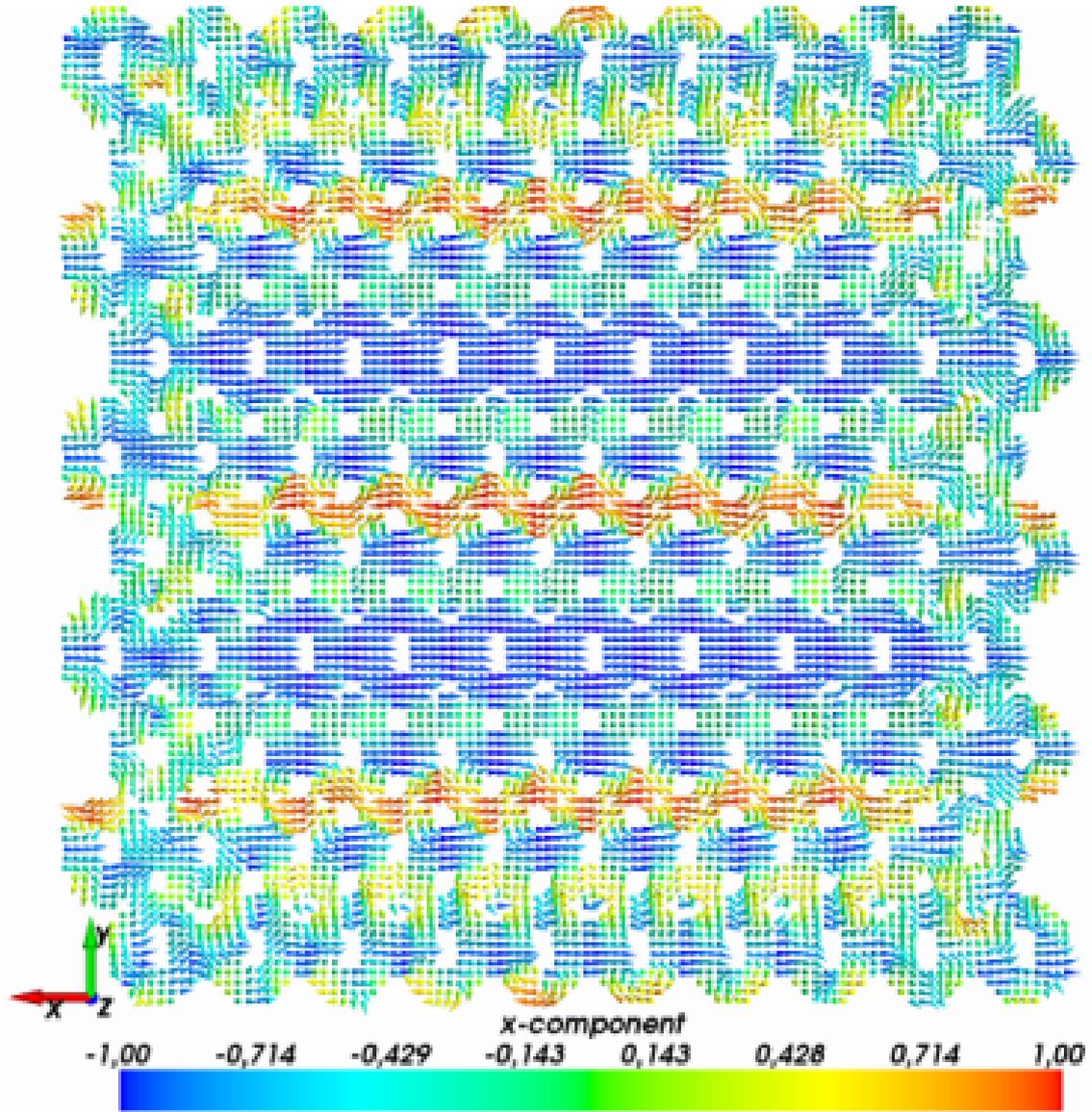


Fonte: Produzido pelo autor

A Figura 77 apresenta o mapa da casca $\varepsilon = 0.1$ para o instante $0.026 ns$. Observe que já neste momento se observa o modo *onion* bem definido. Mesmo assim se apresentam algumas modificações que se devem ao fato da amostra estar em processo de relaxação.

Nas bordas, como é esperado, há estrutura de fechamento de fluxo e se observa uma configuração mais ordenada nas quartas filas olhando nos dois sentidos. Isto caracteriza um comportamento ondulatório que veremos com mais calma em outros instantes da reversão.

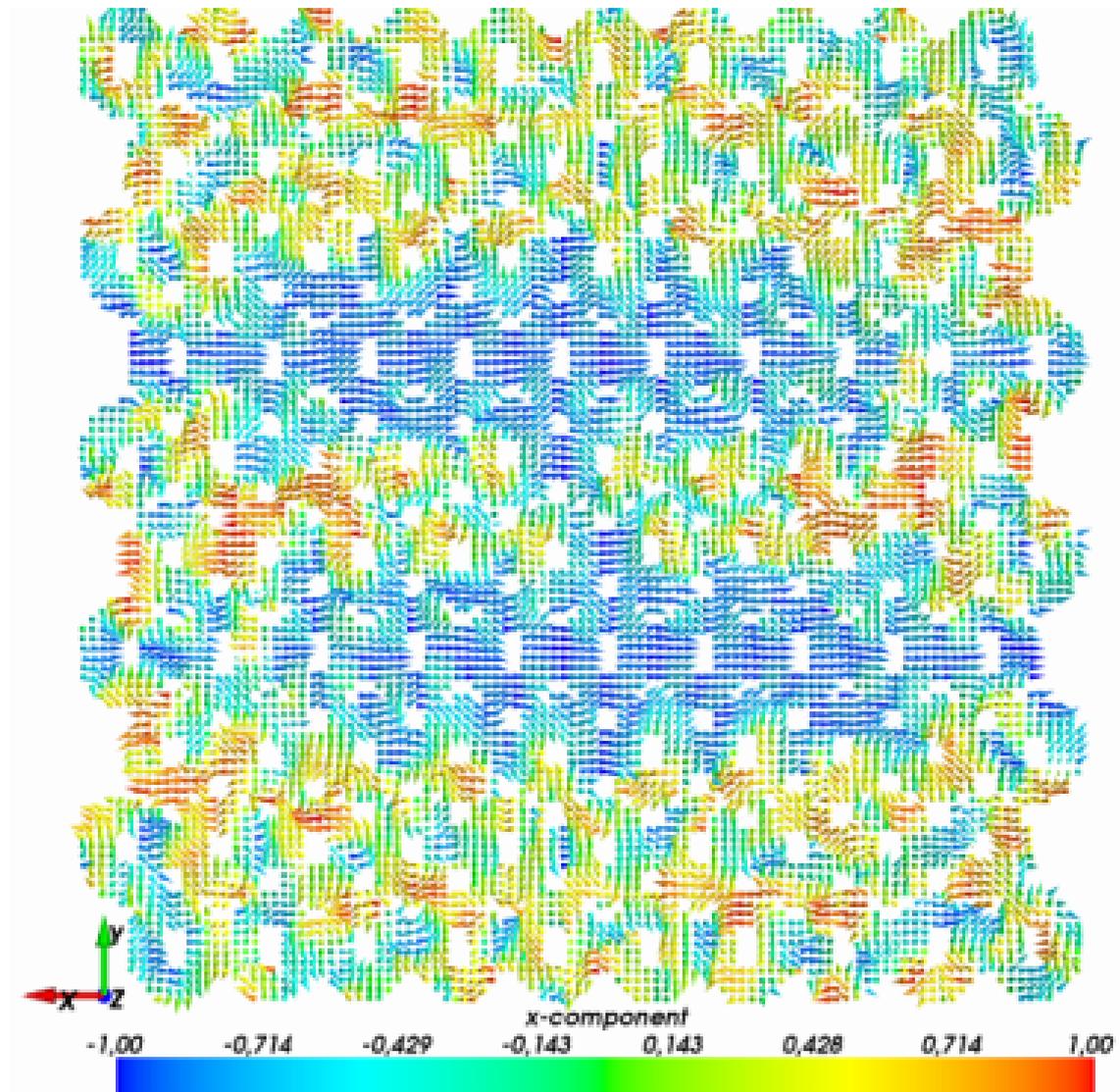
Figura 78 – Distribuição da magnetização no instante $4.4 \cdot 10^{-11} s$ para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.1$



Fonte: Produzido pelo autor

No mapa da Figura 78 no instante $t = 0.044 ns$ podemos observar ainda as duas franjas das quartas filas e o resto do arranjo começa ter estrutura de vórtice alternando a estas duas filas. Neste momento logicamente a energia de troca deve aumentar rapidamente o que já foi visto na curva de energia em função do tempo apresentada antes.

Figura 79 – Distribuição da magnetização no instante $6.6 \cdot 10^{-11} s$ para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.1$

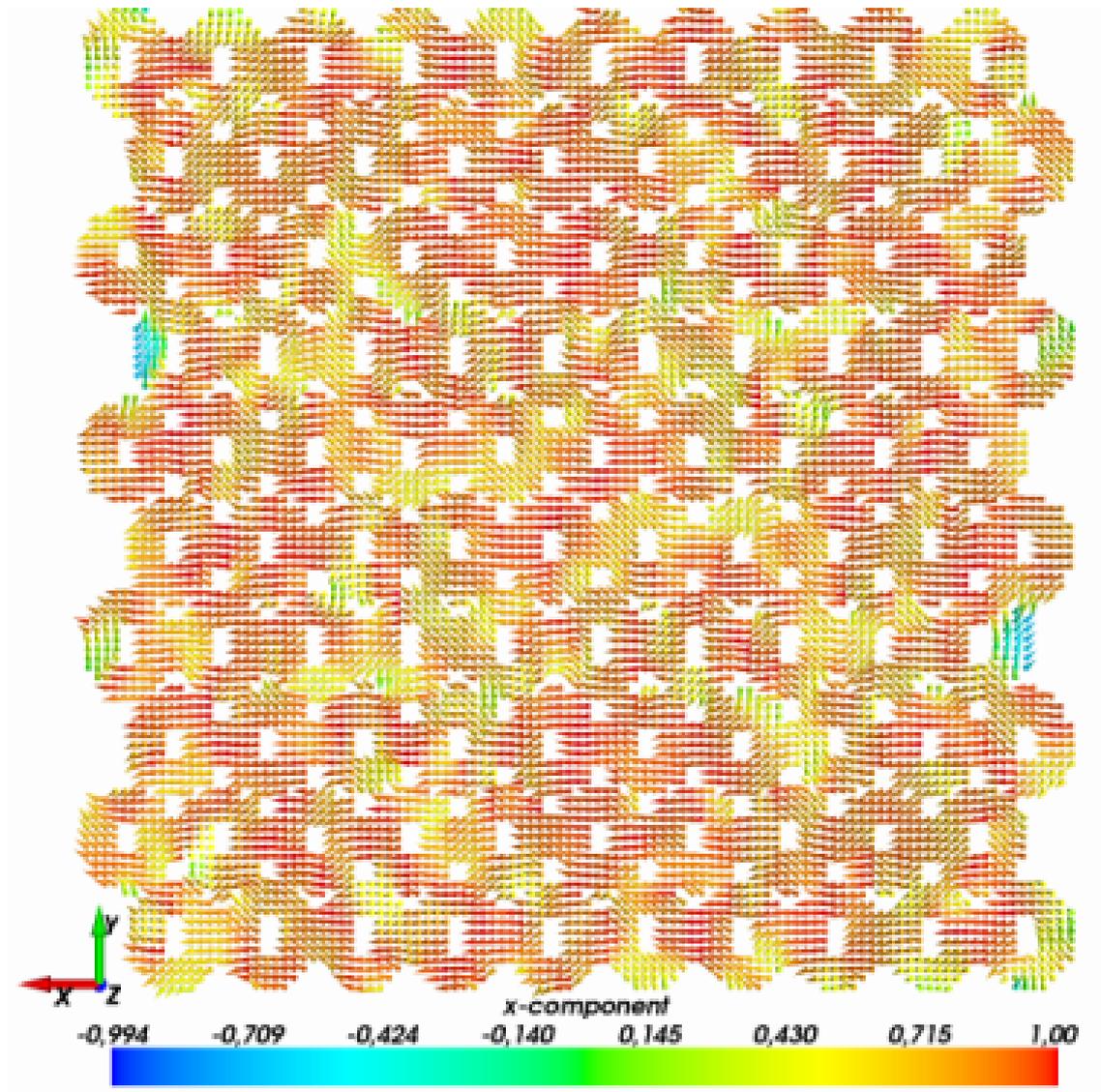


Fonte: Produzido pelo autor

No instante de $0.066 ns$ desaparecem as franjas e todo o arranjo começa apresentar configuração predominante de vórtice como mostrado na Figura 79. Evidentemente si comparamos esta configuração com aquelas já discutidas em outras figuras, a energia de troca será maior devido ao alto desordem que se apresenta nesse instante.

Na Figura 80, em $0.198 ns$ o máximo na energia de troca ficou diminuído devido ao ordenamento que os momentos começam apresentar. Observe que neste mapa a direção dos momentos começa ser no sentido do campo próxima da relaxação.

Figura 80 – Distribuição da magnetização no instante $1.98 \cdot 10^{-10}$ s para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.1$



Fonte: Produzido pelo autor

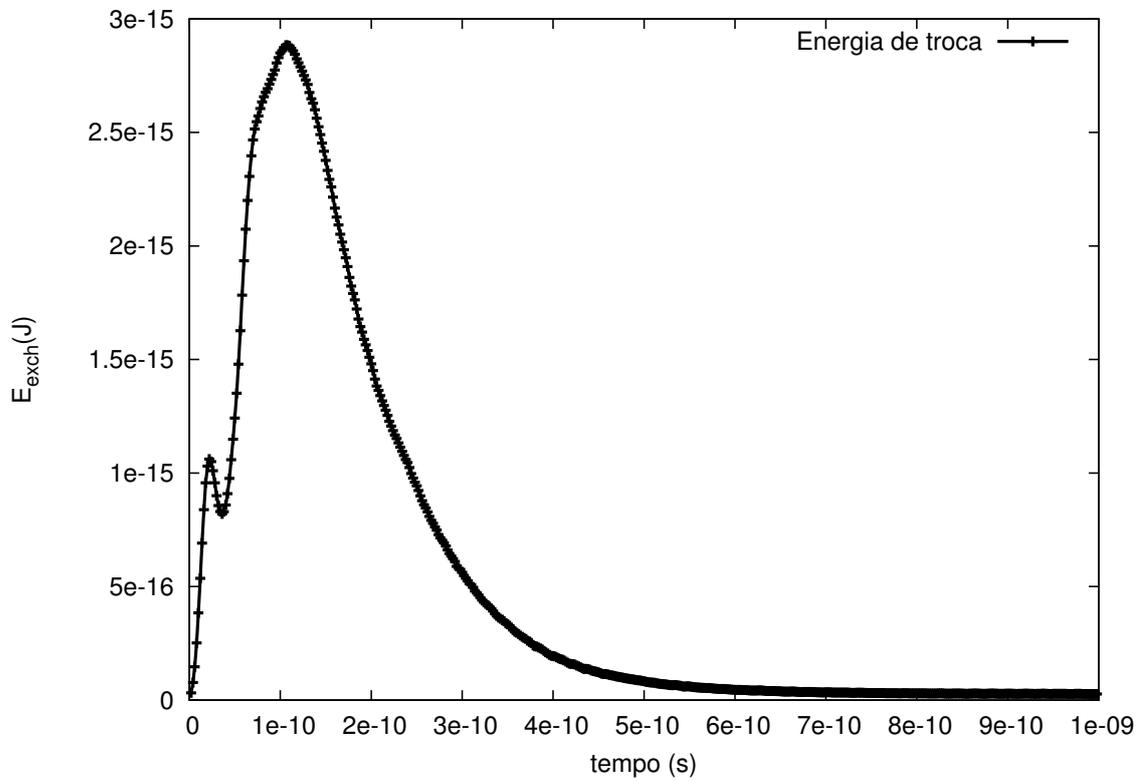
É importante destacar que as franjas relatadas nas figuras iniciais desta discussão, são atribuídas aos efeitos de interações dipolares que em amostras mais finas devem ser mais fortes. Devido isso apresentamos os resultados para $\varepsilon = 0.5$.

5.3.2.2 Simulação para cascas de espessura $\varepsilon = 0.5$

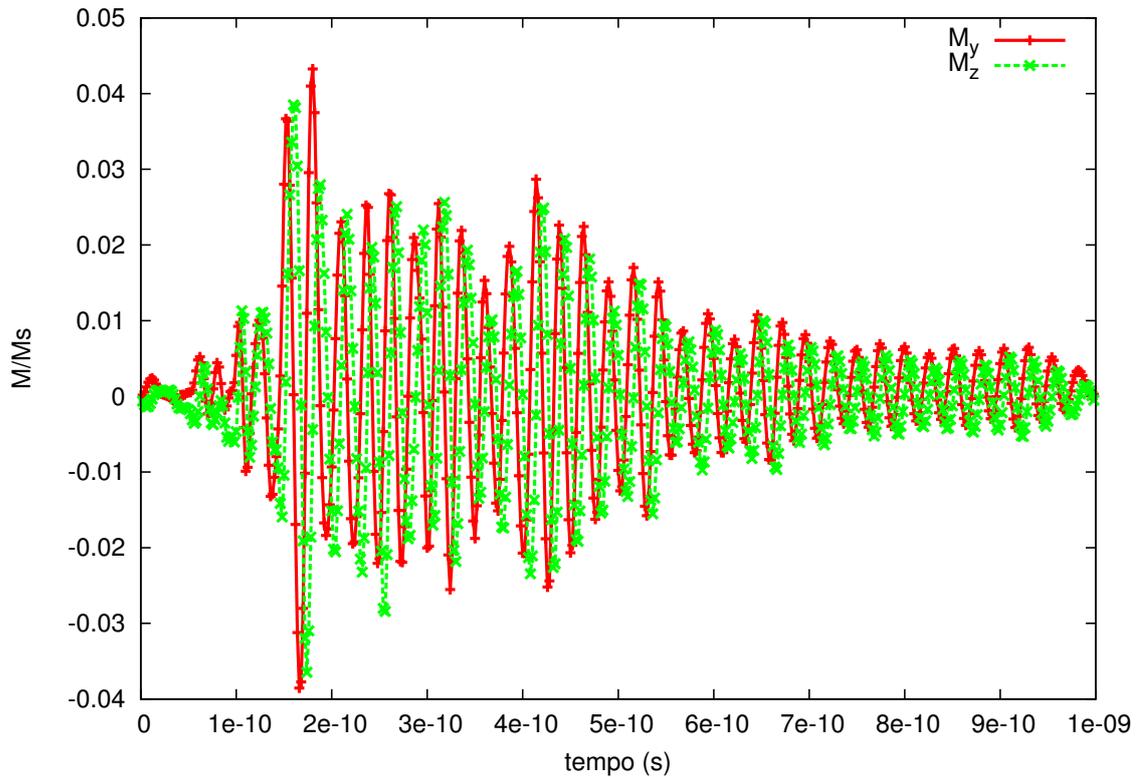
Uma forma de verificar os efeitos da espessura da casca nas amostras de Co foi fazer a análise dinâmica em arranjos com $\varepsilon = 0.5$ e comparar com os resultados de $\varepsilon = 0.2$. Na Figura 81 podemos observar os efeitos da espessura na evolução temporal da energia de troca. Do mesmo modo que nas cascas de Ni estudadas neste trabalho, observamos uma estrutura de dois picos na energia de troca. Atribuímos o primeiro pico e principalmente a queda logo depois, aos

efeitos de desmagnetização. Vemos também que o máximo ocorre um pouco depois do que o mesmo máximo da amostra com $\varepsilon = 0.2$.

Figura 81 – Energia de troca durante a reversão da magnetização



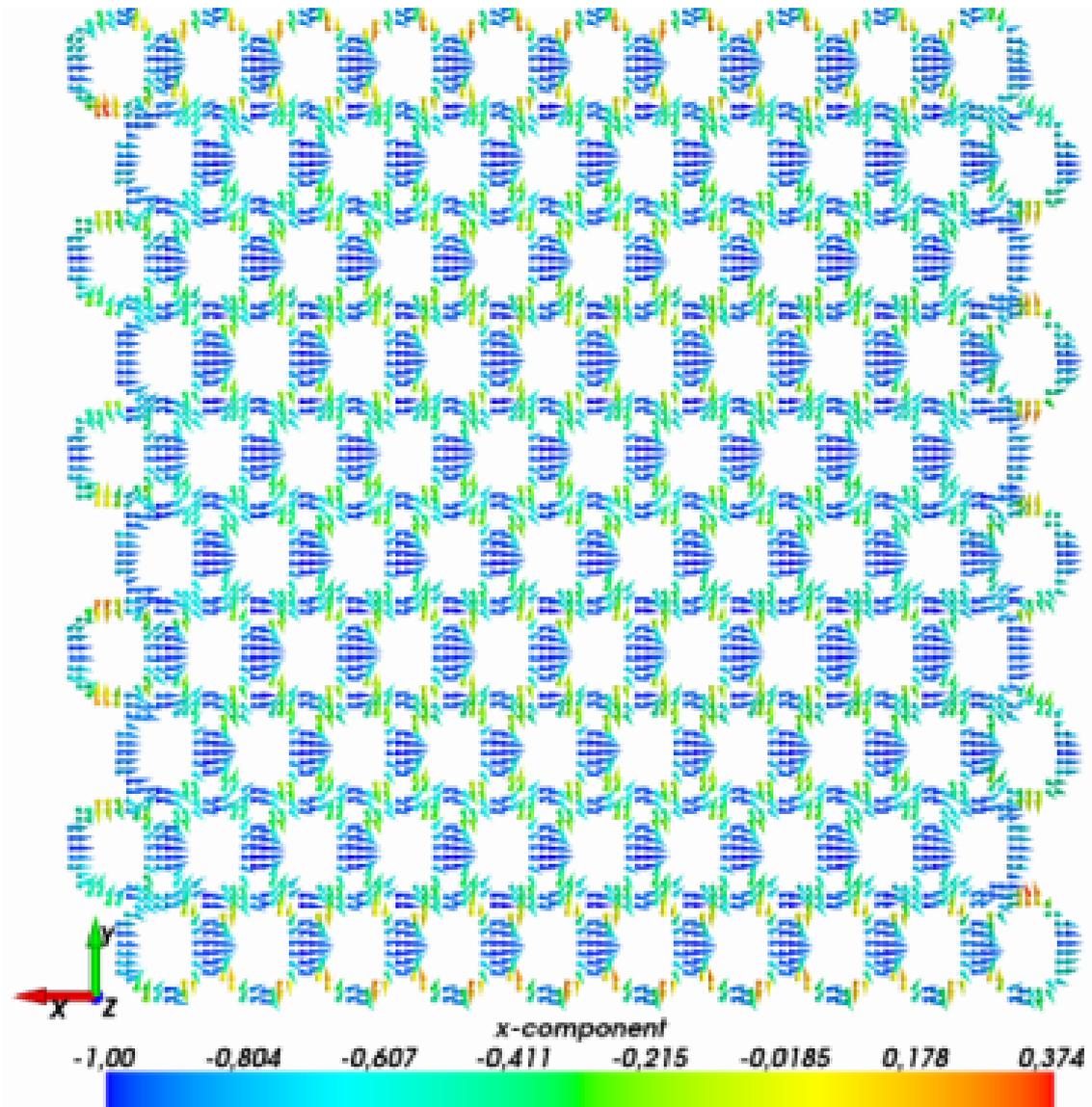
Fonte: Produzido pelo autor

Figura 82 – Evolução temporal das componentes m_y e m_z da magnetização

Fonte: Produzido pelo autor

Observando o comportamento da magnetização na Figura 82 podemos verificar a mesma estrutura oscilante observada em todos os arranjos estudados neste trabalho e a assinatura principal aqui é a queda muito suave destas componentes. O primeiro pico da energia de troca pode ser melhor explicado nos mapas.

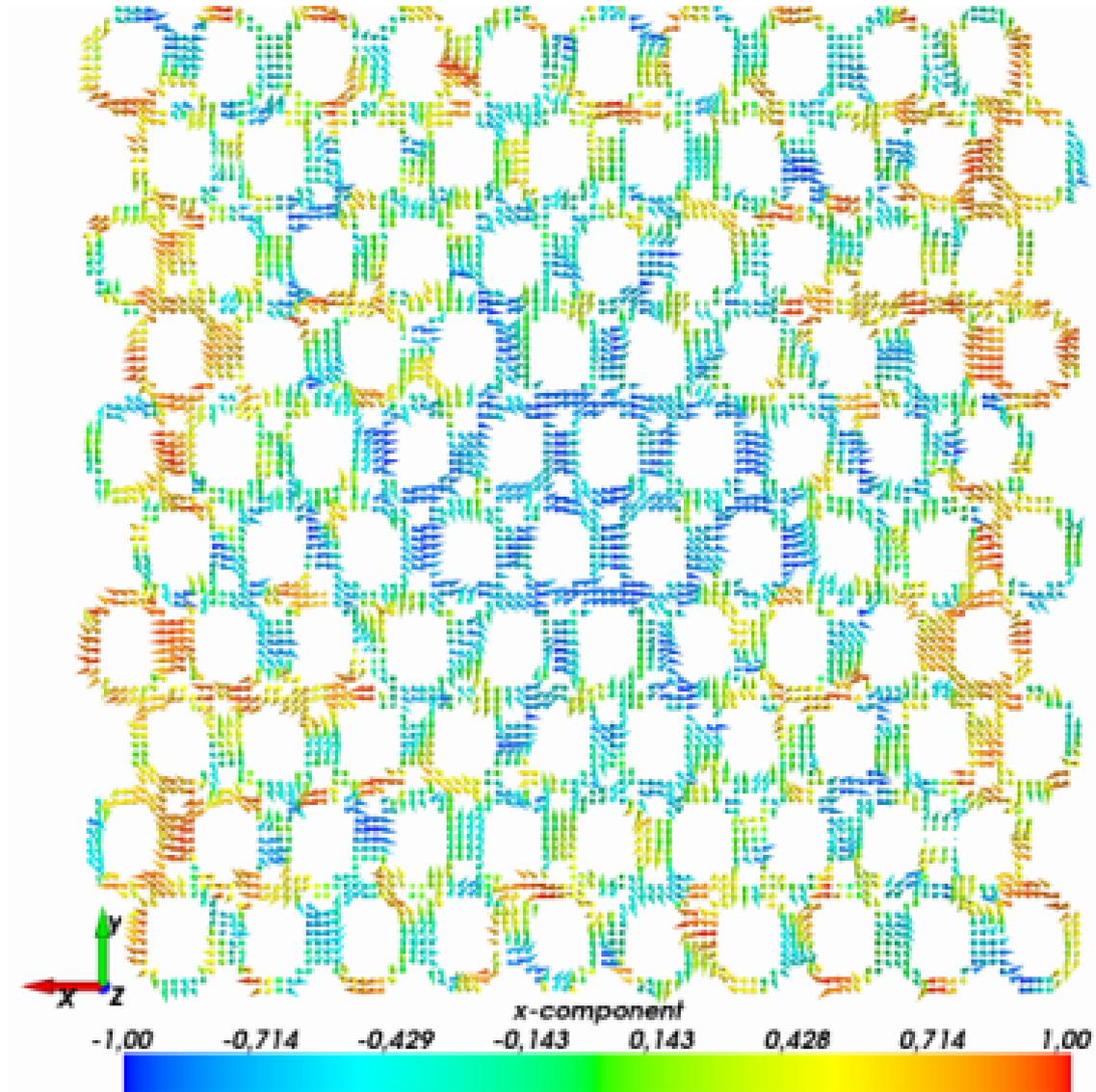
Figura 83 – Distribuição da magnetização no instante $2.2 \cdot 10^{-11} s$ para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.5$



Fonte: Produzido pelo autor

O mapa no instante $0.02 ns$, Figura 83, apresenta uma grande quantidade de momentos, na união entre as cascas, que se mantém orientadas opostas ao campo aplicado. Como mencionamos, os efeitos dipolares são muito fortes e levam o sistema a este comportamento. Existe neste arranjo uma estrutura que fecha o fluxo na união entre três cascas, tornando a energia de troca muito alta nestes pontos. Os momentos orientados opostos ao campo na verdade se encontram em orientação oblíqua em relação ao campo e buscando a orientação do eixo fácil da energia magnetocristalina. Isto pode ser motivo para H_c elevado.

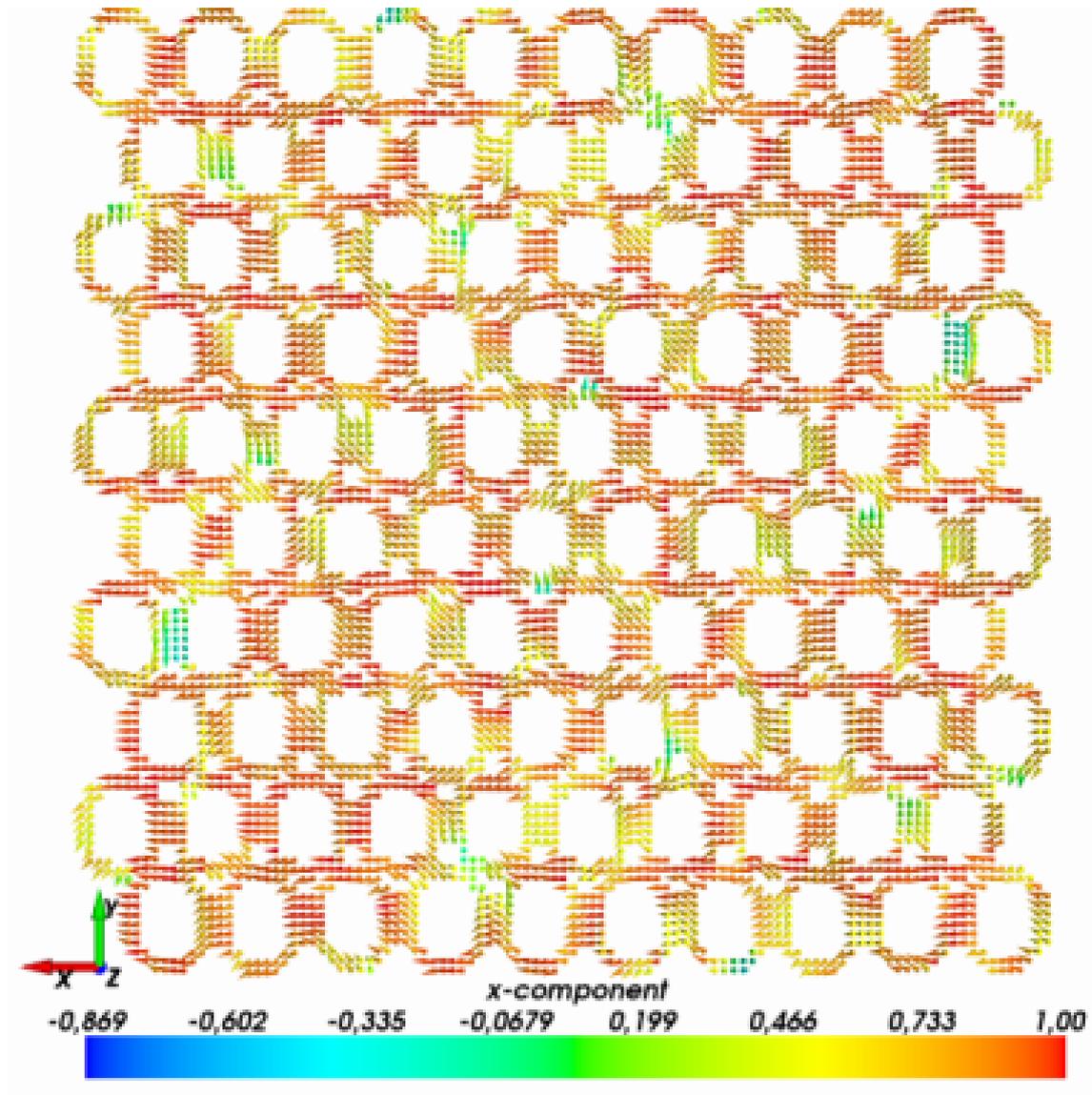
Figura 84 – Distribuição da magnetização no instante $1.08 \cdot 10^{-10}$ s para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.5$



Fonte: Produzido pelo autor

Na Figura 84 em $0.108ns$ os momentos apresentam uma estrutura complexa que leva o sistema ao seu máximo de energia de troca. Aparecem neste caso algumas estruturas de fechamento nas bordas do arranjo. Já no instante $0.286ns$, os momentos tem orientação que favorece a direção do campo e ocorrem padrões tipo *onion* assim como regiões de rotação coerente. A Figura 85 mostra detalhadamente o mencionado mapa.

Figura 85 – Distribuição da magnetização no instante $2.86 \cdot 10^{-10}$ s para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.5$



Fonte: Produzido pelo autor

A fim de comprovar os efeitos oscilantes de alta frequência visto em amostras de Ni com $\varepsilon = 0.8$, fizemos a análise para a amostra do Co com as mesmas discussões.

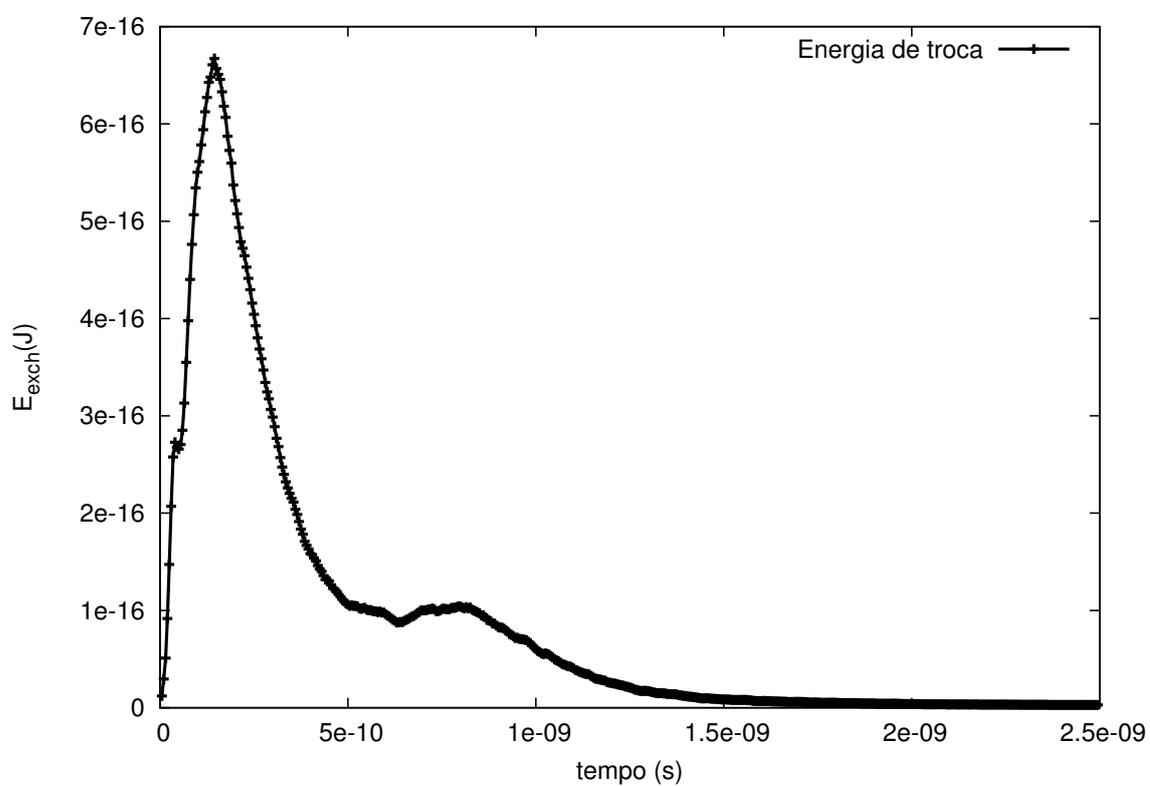
5.3.2.3 Simulação para cascas de espessura $\varepsilon = 0.8$

A Figura 86 apresenta a dependência da energia da troca com o tempo na amostra de Co de menor espessura estudada por nós. O formato do gráfico bem diferente do estudado em qualquer uma das amostras aqui apresentadas.

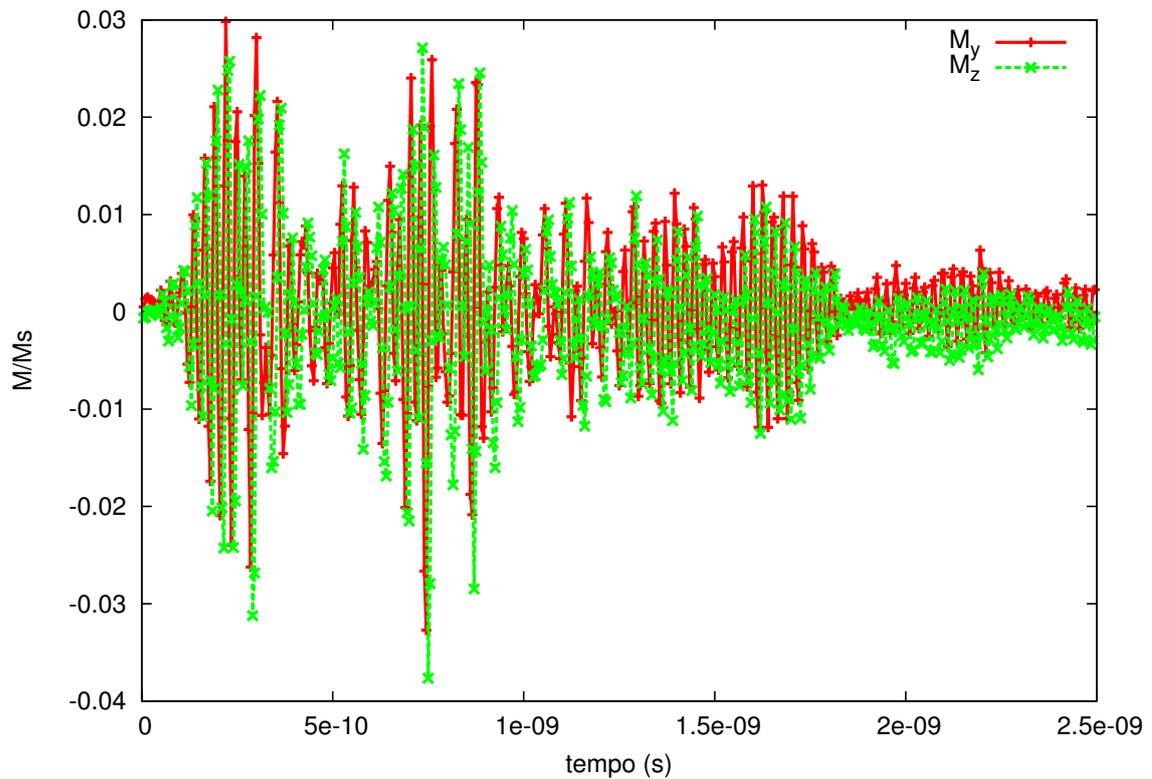
Observamos um pico já visto em todas as amostras mais com uma pequena irregularidade durante a subida. Logo depois podemos observar uma banda que mostra o aumento da energia

de troca antes de 1 ns . A relaxação nesta amostra ocorre em 2 ns .

Figura 86 – Energia de troca durante a reversão da magnetização



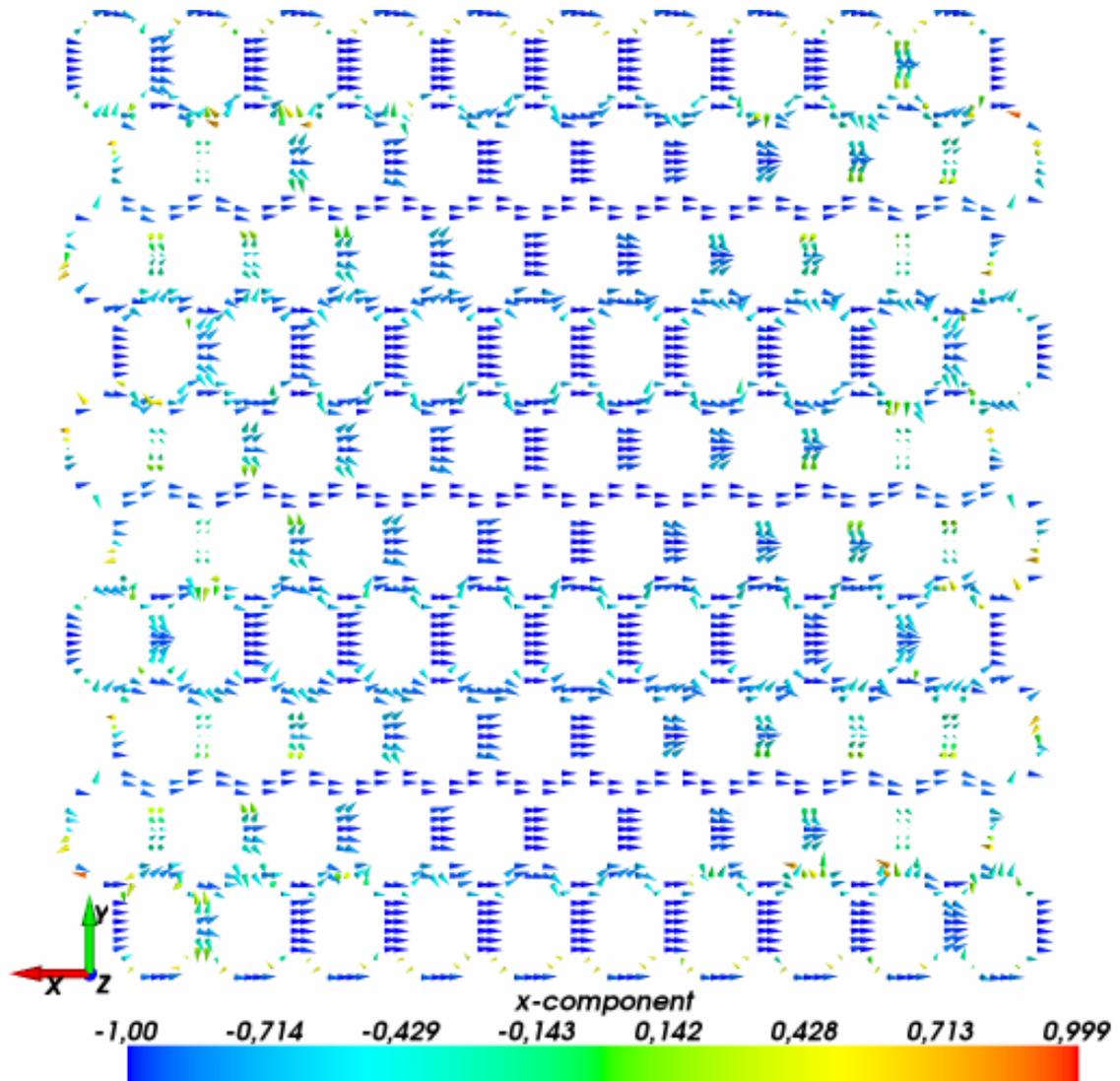
Fonte: Produzido pelo autor

Figura 87 – Evolução temporal das componentes m_y e m_z da magnetização

Fonte: Produzido pelo autor

A Figura 87 mostra uma evolução temporal da magnetização que é muito ruidosa, da mesma forma que a amostra de Ni de $\varepsilon = 0.8$. Vemos também uma diminuição da amplitude muito suave que tem relação com a banda antes de 1 ns .

Figura 88 – Distribuição da magnetização no instante $7.5 \cdot 10^{-11} s$ para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.8$

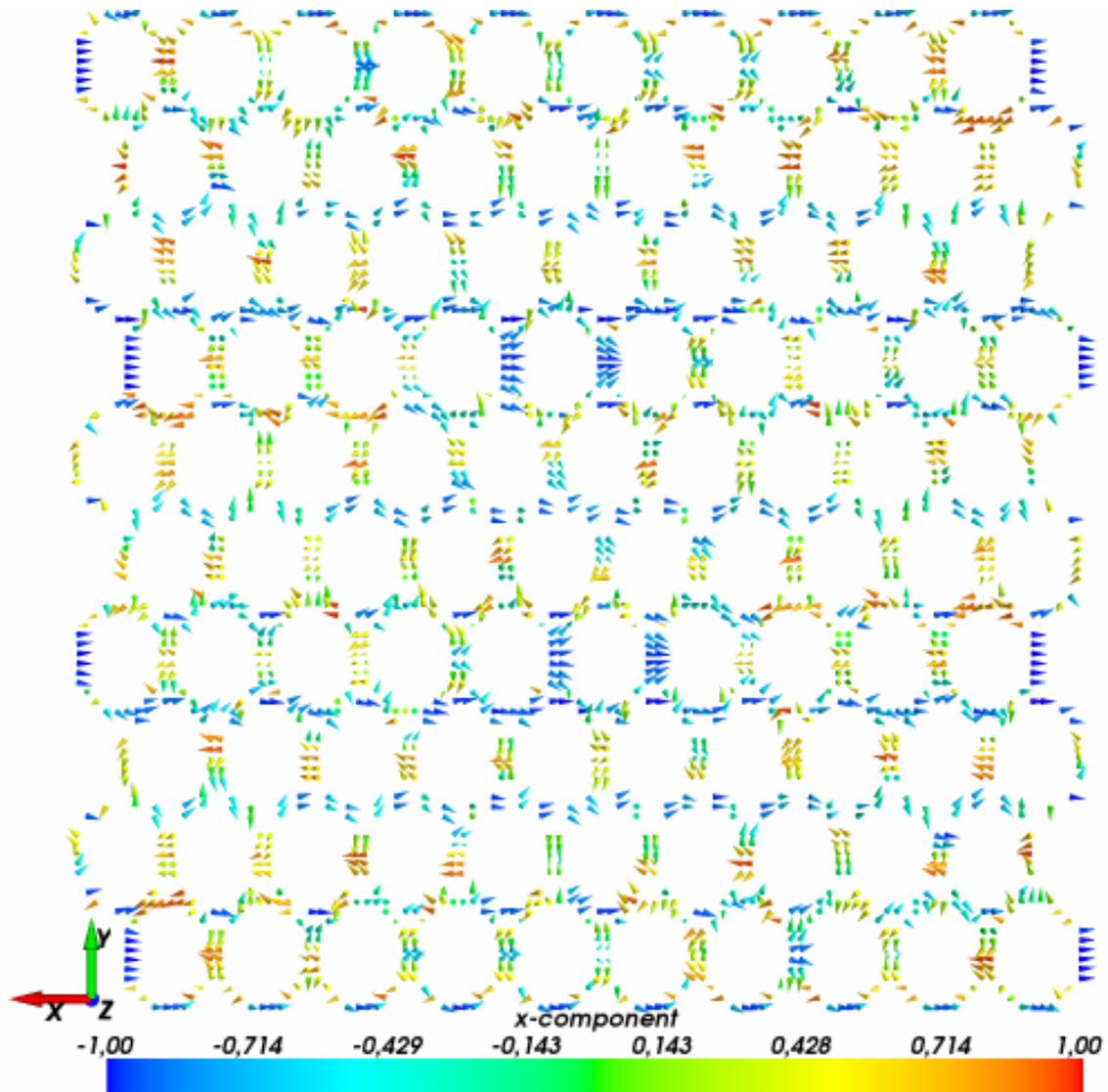


Fonte: Produzido pelo autor

A Figura 88 apresenta momentos fixos na direção negativa do eixo X, no instante $t = 0.075 ns$. Ainda é observada uma componente ondulatória que pode ser associada à competição energética na amostra durante a reversão.

No instante $t = 0.145 ns$ os momentos fecham o fluxo ao redor das cascas e este pode ser um mecanismo de estabilidade encontrado pelo sistema o que contribui ao aumento da remanência e da coercividade. A Figura 89 apresenta todos os detalhes deste instante.

Figura 89 – Distribuição da magnetização no instante $1.45 \cdot 10^{-10}$ s para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.8$

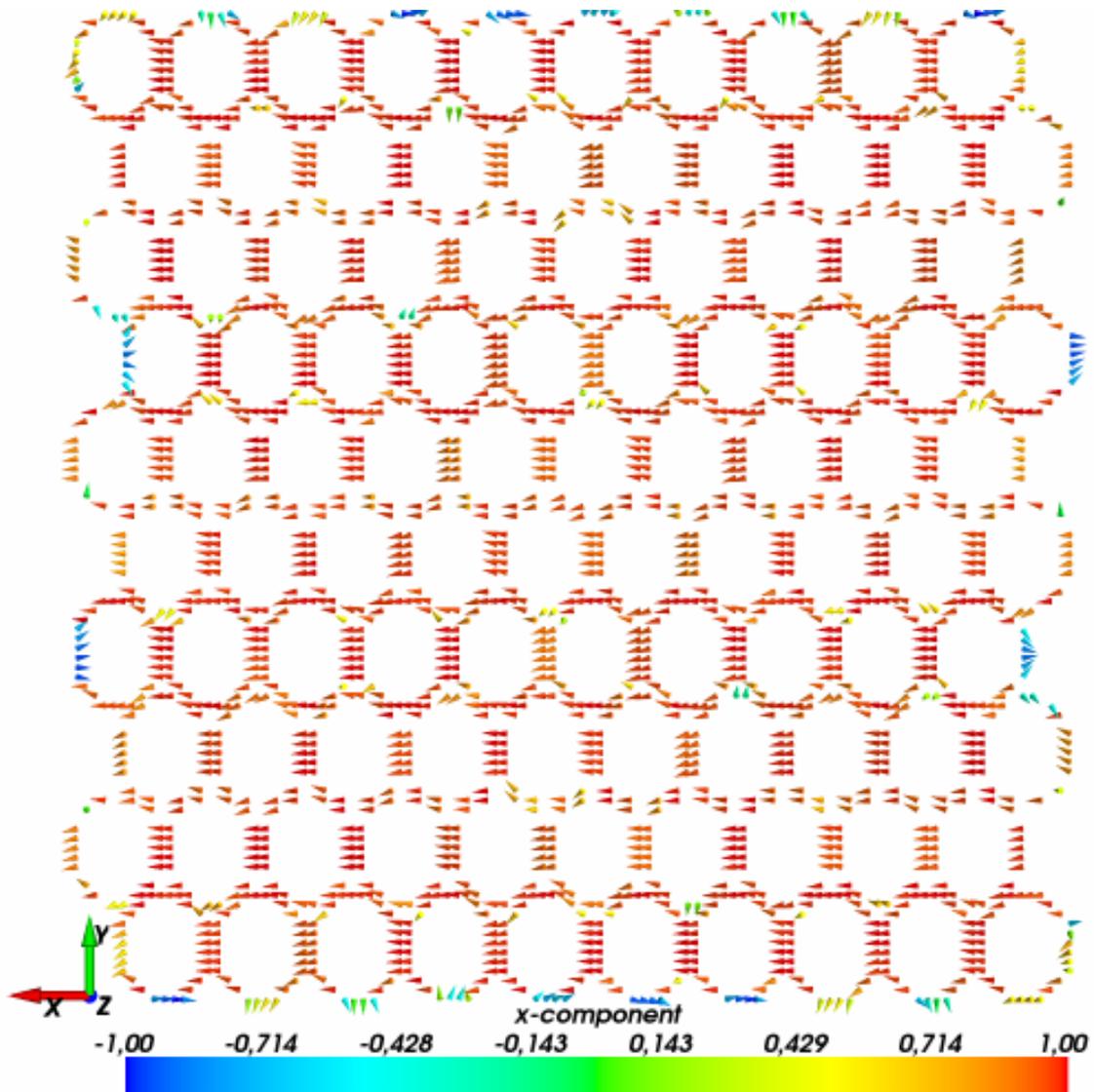


Fonte: Produzido pelo autor

De acordo com o mapa da Figura 90 em 0.745 ns , os momentos já tentam se alinhar na interface entre as cascas. Por outra parte ocorrem as mesmas estruturas onduladas que podem ser as causantes pelo longo tempo de relaxação.

Uma dúvida permanece em nosso estudo para as amostras com $\varepsilon = 0.8$ e é o alto ruído nas curvas de magnetização em função do tempo. É possível que seja motivo da instabilidade dos momentos em cascas finas.

Figura 90 – Distribuição da magnetização no instante $7.45 \cdot 10^{-10}$ s para arranjos de Co com $\varepsilon = 0.8$



Fonte: Produzido pelo autor

Até aqui levamos este estudo, que nos oferece muita informação sobre propriedades magnéticas estáticas e dinâmicas de cascas de Ni e Co em arranjos hexagonais. As informações aqui serão utilizadas na preparação de amostras para nosso grupo.

6 Conclusões

Finalmente, depois de ter realizado este trabalho, podemos reunir algumas conclusões importantes para benefício das pesquisas de nosso grupo:

1. A simulação com OOMMF é eficiente no estudo de arranjos de objetos nanométricos.
2. A espessura é o fator principal nas propriedades estáticas e dinâmicas de cascas nanométricas.
3. À medida que diminui a espessura da casca temos mudanças abruptas do H_c para cascas de Co.
4. Durante a inversão dos momentos se observa a formação de vórtices bem organizados em Co.
5. Em cascas de Ni, o conjunto se apresenta como sistema biestado quando $\varepsilon \leq 0.4$.
6. O processo de orientação nas cascas de Co, com o eixo fácil cristalino normal ao plano, ocorre em duas etapas quando o campo é aplicado no plano do arranjo. Na primeira parte o momento total da amostra aumenta rapidamente até um valor de campo a partir do qual o campo magnetocristalino começa dificultar o processo e o crescimento ocorre mais lentamente.
7. A relaxação em todos os sistemas aqui estudados, é fortemente influenciada pelo valor de ε e quanto menor é a espessura da casca maior é o tempo de relaxação.
8. A energia de troca apresenta dois máximos que podem ser atribuídos aos efeitos desmagnetizantes.

7 Perspectivas

O trabalho aqui apresentado é o início de uma nova filosofia de atividades em nosso grupo. Por isso é que temos já diversas tarefas previstas no próximo passo:

1. Verificar se o ruído detectado na dinâmica da magnetização é de fato característica de nossos objetos.
2. Comparar os resultados com os que gera o simulador Nmag (72) baseado em MEF.
3. Utilizar os resultados da simulação micromagnética para simular imagens de Microscopia de Força Magnética (MFM) e melhorar a compreensão dos distintos modos de reversão comparando com imagens reais.
4. Mapear outras energias além da de troca para melhor compreender os processos envolvidos em nossos arranjos.
5. Estudar outro tipo de ordenamento das cascas.
6. Incluir os efeitos térmicos nas simulações.

Referências

- 1 GUBIN, S. P. (Ed.). *Magnetic Nanoparticles*. Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co, 2009.
- 2 YIN, Y. et al. *Science*, v. 304, n. 5671, p. 711–714, 2004.
- 3 BURIK, J. *Science*, v. 304, n. 5671, p. 692–693, 2004.
- 4 SON, D. et al. *Science*, v. 306, n. 5698, p. 1009–1012, 2004.
- 5 CARUSO, F.; CARUSO, R.; MOHWALD, H. *Science*, v. 282, n. 5391, p. 1111–1114, 1998.
- 6 LI, Z. et al. *New J. Chem*, v. 27, p. 1518, 2003.
- 7 VASQUEZ, Y.; K, S. A.; SCHAACK, R. E. *J. Am. Chem. Soc.*, v. 127, n. 36, p. 12504–12505, 2005.
- 8 SUN, Y.; XIA, Y. *Nano Letters*, v. 3, n. 11, p. 1569–1572, 2003.
- 9 ZHANG, Y.; LI, G.; ZHANG, L. *Inorg. Chem. Commun*, v. 7, p. 344–346, 2004.
- 10 NIU, K. et al. *Nano Lett*, v. 13, n. 11, p. 5715–5719, 2013.
- 11 WANG, W.; DAHL, M.; YIN, Y. *Chemistry of Materials*, v. 25, n. 8, p. 1179–1189, 2013.
- 12 PENG, S.; SUN, S. *Angewandte Chemie*, v. 119, n. 22, p. 4233–4236, 2007.
- 13 FAN, H.; GÖSELE, U.; ZACHARIAS, M. *Small*, v. 3, n. 10, p. 1660–1671, 2007.
- 14 CABOT, A. et al. *Journal of the American Chemical Society*, v. 131, n. 32, p. 11326–11328, 2009.
- 15 CHIANG, R.; CHIANG, R. *Inorganic Chemistry*, v. 46, n. 2, p. 369–371, 2007.
- 16 HONG, J. et al. *Nat Mater*, v. 5, n. 8, p. 627–631, 2006.
- 17 SUN, Y.; MAYERS, B.; XIA, Y. *Advanced Materials*, v. 15, n. 7-8, p. 641–646, 2003.
- 18 GONZÁLEZ, E.; ARBIOL, J.; PUNTES, V. *Science*, v. 334, n. 6061, p. 1377–1380, 2011.
- 19 GHOSH, R.; PARIJA, S. *Chem. Rev.*, v. 112, n. 4, p. 2373–2433, 2012.
- 20 MAYERS, B. et al. *J. Am. Chem. Soc.*, v. 125, n. 44, p. 13364–13365, 2003.
- 21 ZHANG, J. et al. *Mater. Lett.*, v. 60, n. 2, p. 280–283, 2006.
- 22 XU, C. et al. *Electrochemistry Communications*, v. 9, n. 8, p. 2009–2012, 2007.
- 23 YOSHIKAWA, H. et al. *Applied Physics Letters*, v. 85, n. 22, p. 5287–5289, 2004.
- 24 ZHANG, D. et al. *Advanced Materials*, v. 14, n. 20, p. 1499–1502, 2002.
- 25 BAO, J. et al. *Advanced Materials*, v. 15, n. 21, p. 1832–1835, 2003.

- 26 SELVAKANNAN, P.; SASTRY, M. *Chem. Commun.*, n. 13, p. 1684–1686, 2005.
- 27 LIU, Q. et al. *Advanced Materials*, v. 17, n. 16, p. 1995–1999, 2005.
- 28 WANG, N. et al. *The Journal of Physical Chemistry C*, v. 112, n. 17, p. 6613–6619, 2008.
- 29 DUAN, G. et al. *The Journal of Physical Chemistry B*, v. 110, n. 14, p. 7184–7188, 2006.
- 30 YANG, S. et al. *Langmuir*, v. 25, n. 14, p. 8287–8291, 2009.
- 31 YANG, S. et al. *Advanced Functional Materials*, v. 20, n. 15, p. 2527–2533, 2010.
- 32 PANG, X. et al. *Nat Nano*, v. 8, n. 6, p. 426–431, 2013.
- 33 ZHONG, Z. et al. *Advanced Materials*, v. 12, n. 3, p. 206–209, 2000.
- 34 BOURLINOS, A. B.; KARAKASSIDES, M. A.; PETRIDIS, D. *Chem. Commun.*, n. 16, p. 1518–1519, 2001.
- 35 CARUSO, F.; CARUSO, R. A.; MÖHWALD, H. *Chemistry of Materials*, v. 11, n. 11, p. 3309–3314, 1999.
- 36 KAWAHASHI, N.; MATIJEVIĆ, E. *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 143, n. 1, p. 103–110, 1991. ISSN 0021-9797.
- 37 SHIN, J. et al. *Angewandte Chemie International Edition*, WILEY-VCH Verlag, v. 48, n. 2, p. 321–324, 2009. ISSN 1521-3773.
- 38 ZHAO, Q. et al. *European Journal of Inorganic Chemistry*, WILEY-VCH Verlag, v. 2006, n. 8, p. 1643–1648, 2006. ISSN 1099-0682.
- 39 NIU, K. Y. et al. *Langmuir*, v. 26, n. 22, p. 16652–16657, 2010.
- 40 OHMORI, M.; MATIJEVIĆ, E. *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 150, n. 2, p. 594–598, 1992. ISSN 0021-9797.
- 41 LOU, X. W. et al. *Advanced Materials*, WILEY-VCH Verlag, v. 18, n. 17, p. 2325–2329, 2006. ISSN 1521-4095.
- 42 GOLL, D.; BERKOWITZ, A. E.; BERTRAM, H. N. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 70, p. 184432, Nov 2004.
- 43 GOLL, D. et al. *Physica B: Condensed Matter*, v. 372, n. 1–2, p. 282–285, 2006. ISSN 0921-4526.
- 44 KONG, D.; WANG, S.; CHEN, C. *Journal of Applied Physics*, v. 104, n. 1, p. –, 2008.
- 45 KRONMÜLLER, H.; PARKIN, S. (Ed.). *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*. [S.l.]: John Wiley & Sons, Ltd., 2007. v. 2.
- 46 DONAHUE, M. J.; PORTER, D. G. *OOMMF User's Guide*, National Institute of Standards and Technology. [S.l.], 1999.
- 47 BERTOTTI, G. *Hysteresis in Magnetism - For Physicists, Materials Scientists and Engineers*. [S.l.]: Academic Press, 1998.

- 48 GETZLAFF, M. *Fundamentals of Magnetism*. [S.l.]: Springer, 2008.
- 49 GOLSTEIN, H. *Mecânica Clásica*. [S.l.]: Reverté, 1990.
- 50 Brown Jr, W. *Micromagnetics*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1978.
- 51 CULLITY, B. *Introduction to Magnetic Materials*. [S.l.]: Addison-Wesley, 1972.
- 52 KITTEL. *Introducción a la Física del Estado Sólido*. [S.l.]: Reverte, 1993.
- 53 Coelho de Almeida, D. F. *Spintronic Micromagnetic Simulations Using Parallel Computations*. Tese (Doutorado), 2013.
- 54 D'AQUINO, M. *Nonlinear Magnetization Dynamics in Thin-films and Nanoparticles*. Tese (Doutorado), 2004.
- 55 AHARONI, A. *Introduction to the theory of ferromagnetism*. [S.l.]: Claredon Press, 1996.
- 56 JOHNSON, C. *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1990.
- 57 GARCÍA-CERVERA, C. J.; GIMBUTAS, Z.; WEINAN, E. *Journal of Computational Physics*, v. 184, n. 1, p. 37–52, 2003. ISSN 0021-9991.
- 58 GARCIA-CERVERA, C.; E, W. *Magnetics, IEEE Transactions on*, v. 39, n. 3, p. 1766–1770, May 2003. ISSN 0018-9464.
- 59 PARKER, G.; CERJAN, C.; HEWETT, D. Embedded curve boundary method for micromagnetic simulations.
- 60 DONAHUE, M.; MCMICHAEL, R. *Magnetics, IEEE Transactions on*, v. 43, n. 6, p. 2878–2880, June 2007. ISSN 0018-9464.
- 61 MANSURIPUR, M.; GILES, R. *Magnetics, IEEE Transactions on*, v. 24, n. 6, p. 2326–2328, Nov 1988. ISSN 0018-9464.
- 62 W.H., P. et al. *Numerical Recipes in Fortran: The Art of Scientific Computing*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1996.
- 63 ÁLVAREZ, M.; GUERRA, A.; LAU, R. *Matemática numérica*. Editorial Félix Varela, 2007.
- 64 SCHEINFELD, M. R. *LLG - Micromagnetics Simulator*. [S.l.]. Disponível em: <<http://lmgmicro.home.mindspring.com>>. Acesso em: nov. 2014.
- 65 BERKOV, D. V. *MicroMagus - Software for Micromagnetic Simulation*. [S.l.]. Disponível em: <<http://www.micromagus.de>>. Acesso em: nov. 2014.
- 66 VISSCHER, P. V. et al. *AlaMag Micromagnetics Simulator*. [S.l.]. Disponível em: <<http://faculty.mint.ua.edu/~visscher/AlaMag/>>. Acesso em: dez. 2014.
- 67 WHITTENBURG, S. L. *JaMM - Java MicroMagnetics*. [S.l.]. Disponível em: <<http://jamm.uno.edu/>>. Acesso em: dez. 2014.
- 68 KETTERSON, J. B.; RIVKIN, K. *RKMAG*. [S.l.]. Disponível em: <<http://www.rkmag.com>>. Acesso em: dez. 2014.

- 69 OTI, J. *MagOasis*. [S.l.]. Disponível em: <<http://www.magoasis.com>>. Acesso em: dez. 2014.
- 70 RAMSTÖCK, K. *MagFEM3D*. [S.l.]. Disponível em: <<http://magfem3d.sourceforge.net>>. Acesso em: dez. 2014.
- 71 SCHOLZ, W. *magpar - Parallel Finite Element Micromagnetics Package*. [S.l.]. Disponível em: <<http://www.cwscholz.net/Main/MagparProject>>. Acesso em: dez. 2014.
- 72 FISCHBACHER, T. et al. Nmag. *Magnetics, IEEE Transactions on*, v. 43, n. 6, p. 2896–2898, June 2007. ISSN 0018-9464. Disponível em: <<http://nmag.soton.ac.uk/nmag/>>.
- 73 DONAHUE, M. J.; PORTER, D. G. *OOMMF Citation list*. [S.l.]. Disponível em: <http://math.nist.gov/oommf/oommf_cites.html>. Acesso em: nov. 2014.
- 74 STROUSTRUP, B. *The C++ Programming Language*. 3rd. ed. [S.l.]: Hardcover, 2000.
- 75 OUSTERHOUT, J. K.; JONES, J. *Tcl and the Tk Toolkit*. [S.l.]: Addison-Wesley Professional, 2009.
- 76 BELL, J. T. *Visualization Toolkit(VTK) Tutorial*. [S.l.]. Disponível em: <<http://www.cs.uic.edu/~jbell/CS526/Tutorial/Tutorial.html>>. Acesso em: nov. 2014.
- 77 FANGOHR, H.; BOARDMAN, R. *OVF2VTK: Tool for Conversion of OOMMF to VTK Files*. [S.l.]. Disponível em: <<http://www.soton.ac.uk/~fangohr>>. Acesso em: jan. 2015.
- 78 RAMACHANDRAN, P. *MayaVi Users Guide*. [S.l.]. Disponível em: <<http://mayavi.sourceforge.net/docs/guide/index.html>>. Acesso em: nov. 2014.
- 79 MASCARO, M. *OOMMFTools*. [S.l.]. Disponível em: <<http://web.mit.edu/daigohji/projects/OOMMFTools>>. Acesso em: nov. 2014.
- 80 WILLIAMS, T.; KELLEY, C. *Gnuplot 5.0*. [S.l.]. Disponível em: <http://www.gnuplot.info/docs_5.0/gnuplot.pdf>. Acesso em: nov. 2014.
- 81 VASILIEF, I.; BESCH, S. *The QtiPlot Handbook*. [S.l.]. Disponível em: <<http://www.qtiplot.com/doc/manual-en/index.html>>. Acesso em: nov. 2014.
- 82 JUBERT, P.-O.; ALLENSPACH, R. Analytical approach to the single-domain-to-vortex transition in small magnetic disks. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 70, p. 144402, Oct 2004.
- 83 VAZ, C. A. F. et al. Energetics of magnetic ring and disk elements: Uniform versus vortex state. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 73, p. 054411, Feb 2006.
- 84 DORMAND, J.; PRINCE, P. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 6, n. 1, p. 19–26, 1980. ISSN 0377-0427.
- 85 *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 15, n. 2, p. 203–211, 1986. ISSN 0377-0427.
- 86 CHIKAZUMI, S. *Physics of Magnetism*. [S.l.]: John Wiley & Sons., 1964.
- 87 EAGLETON, T. S.; SEARSON, P. C. Electrochemical Synthesis of 3D Ordered Ferromagnetic Nickel Replicas Using Self-Assembled Colloidal Crystal Templates. *Chemistry of Materials*, v. 16, n. 24, p. 5027–5032, 2004.

- 88 GUO, L. et al. Uniform Magnetic Chains of Hollow Cobalt Mesospheres from One-Pot Synthesis and Their Assembly in Solution. *Advanced Functional Materials*, WILEY-VCH Verlag, v. 17, n. 3, p. 425–430, 2007. ISSN 1616-3028.
- 89 SELLMYER, D. J.; ZHENG, M.; SKOMSKI, R. Magnetism of Fe, Co and Ni nanowires in self-assembled arrays. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 13, n. 25, p. R433, 2001. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0953-8984/13/i=25/a=201>>.