



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DE MATERIAIS

JANDREWS LINS GOMES

**Mecanismos de reversão da magnetização em
arranjos de nanotubos de níquel: estudo por
simulação micromagnética**

Tese de Doutorado

Recife

2018

JANDREWS LINS GOMES

Mecanismos de reversão da magnetização em arranjos de nanotubos de níquel: estudo por simulação micromagnética

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 Doutor em Ciência de Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Eduardo Padrón Hernández

Recife

2018

Catálogo na fonte
Bibliotecário Jefferson Luiz Alves Nazareno CRB 4-1758

G633m Gomes, Jandrews Lins.
 Mecanismos de reversão da magnetização em arranjos de nanotubos de níquel: estudo por simulação micromagnética / Jandrews Lins Gomes. – 2018.
 151f.: fig., tab.

 Orientador: Eduardo Padrón Hernández.
 Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Ciência de Materiais, Recife, 2018.
 Inclui referências e anexos.

 1. Ciência de materiais. 2. Nanotubos. 3. Magnetização. I. Padrón Hernández, Eduardo. (Orientador). II. Título.

620.11

CDD (22. ed.)

UFPE-FQ 2018-45

JANDREWS LINS GOMES

Mecanismos de reversão da magnetização em arranjos de nanotubos de níquel: estudo por simulação micromagnética

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

Aprovada em: 12/06/2018.

BANCA EXAMINADORA

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

Prof.^o Dr. Rene Rodrigues Montenegro Filho (Examinador Externo)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof.^a Dr.^a Juliana Angeiras Batista da Silva (Examinadora Externa)
Universidade Federal de Pernambuco

Prof.^a Dr.^a Sara Cristina Pinto Rodrigues (Examinadora Externa)
Universidade Federal Rural de Pernambuco

Prof.^o Dr. Ramon Enrique Ramayo Gonzalez (Examinador Externo)
Universidade Federal Rural de Pernambuco

Este trabalho é dedicado à minha mãe, Esposa, irmãos e a meus dois filhos (Dino e Pingo) que sempre me esperam em casa.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente, e principalmente, à Deus por tudo que aconteceu em minha vida, pois sei que isto me fortaleceu para estes dias.

Agradeço à minha mãe pelo carinho e atenção prestada, aos meus irmãos pelos momentos de conversa e conselhos.

Agradeço à minha esposa por todos os momentos juntos, sei que ela me ajudou bastante.

Agradeço aos meus amigos de laboratório, Professor Mestre Yuset Guerra (Amigão), Prof. Pós-Dr Ramon Raudel (Amigão), Bruno Veríssimo (Velhinho), Tio Von Ivison, Fred Frederico, Jurandir, Ariel (Amigão) e meus amigos do mundão, Erick (O matemático), Professor Romero, Renato (O químico), dentre muitos que passaram por minha vida, além de meus alunos que quase me deixaram louco.

Agradeço aos meus professores do doutorado, Prof. Dr. Eduardo Padrón, Prof. Dr. Eduardo Falção, Prof. Dr. Marcos Sacilote, dentre outros que me deram suporte nestes 4 anos de estudos e pesquisas.

Os agradecimentos principais são direcionados a meu orientador Eduardo Padrón pela ajuda e oportunidade de ser parte do grupo de pesquisa ao longo destes anos.

Agradeço aos professores Michael Joseph Donahue e Donald Gene Porte, pela oportunidade de usar o software OOMMF e também ao grupo do DyNaMat orientado pelo Prof. Van Waeyenberge pela utilização do MuMax3.

Agradeço ao CNPq, FACEPE, FINEP e CAPES pelo suporte financeiro.

A todos meu muito obrigado.

*Você é o único representante do seu sonho na face da Terra. Se isso não fizer você correr, chapa,
eu não sei o que vai.*
Emicida - Cantor

RESUMO

Neste trabalho foram estudados os efeitos da espessura e da variação angular do campo aplicado em arranjos hexagonais de nanotubos de Níquel (Ni). O estudo foi feito por simulação micromagnética utilizando *Object Oriented Micro Magnetism Framework (OOMMF)* e *MuMax3*, estes *softwares* são baseados no método de diferenças finitas (MDF). Uma análise preliminar acerca dos modos de reversão foi feita por meio de cálculo e comparação da competição energética existente no nanotubo. Desse estudo analítico, confirmamos que os modos de reversão que aparecem, considerando as configurações geométricas apresentadas nos resultados, são o Vórtex e o Transversal. Posteriormente a isso, fizemos a análise utilizando simulação micromagnética obtendo curvas de histerese, campo coercitivo H_c e remanescência reduzida M_r , além de um diagrama de fases da energia total em função da espessura do nanotubo, tendo como resultado a confirmação dos cálculos analíticos, os quais apresentam modos de reversão Vórtex ou Transversal. Foi abordada a dependência angular de H_c e M_r para diferentes espessuras β . Com isso, confirmamos que ao variar o ângulo de aplicação do campo magnético há uma mudança no modo de reversão da magnetização. Também foi tema de pesquisa, através das simulações, o comportamento de H_c e M_r para diferentes distâncias entre os nanotubos. Este estudo proporcionou uma análise das interações de troca e dipolar entre os nanotubos. Além disso, obtivemos resultados referentes à simulação dinâmica dos momentos magnéticos, em que é verificado, claramente, a forte influência dipolar nos nanotubos, confirmada através dos mapas de magnetização e dos gráficos da evolução temporal dos momentos. Finalizando nossos resultados, estudamos a reversão dos momentos magnéticos como função do campo magnético invertido. Foram analisados os gráficos para a componente do momento magnético no eixo Z (m_z) e a energia de troca (E_{exch}) como função do tempo, e assim modificamos o valor do campo magnético $H_{ext} = -\Delta H$, em que $\Delta H = 5, 10, 20, 50$ e 110 mT. Observamos que a importância destas análises é devida aos valores da energia de troca que estão associadas ao modo de reversão dos momentos. No caso de um modo de reversão bem definido, a energia de troca não mudará no tempo durante a reversão. Com isso, há várias formas de acompanhar a reversão dos momentos magnéticos e a ideia de impor várias condições finais, $\Delta H = 5, 10, 20, 50$ e 110 mT, está relacionada com a independência que o sistema deverá assumir a condição de equilíbrio de cada modo de reversão. Desta forma, vemos que em todos os ΔH , a energia de troca muda de diferentes formas e sobretudo oscilando, esta oscilação mostra que não há um modo bem estabelecido e as trocas que ocorrem em m_z confirmam isto. Por conseguinte, não há um modo bem definido na reversão de nanotubos em arranjo e portanto as soluções de um único nanotubo não se adequam totalmente a esta nova situação. Assim, o estudo sobre a reversão dos momentos magnéticos em função do campo invertido está relacionado com as promessas de gravação em mídias magnéticas.

Palavras-chave: Nanotubos. Simulação Micromagnética. OOMMF. MuMax3. Magnetização.

ABSTRACT

In this work the effects of the thickness and the angular variation of the field applied in hexagonal arrangements of nickel (Ni) nanotubes were studied. The study was done by micromagnetic simulation using Object Oriented Micro Magnetism framework (OOMMF) and MuMax3, these software are based on the finite difference method (MDF). A preliminary analysis of the modes of reversal was done by means of calculating comparison of predominant energies. From this analytical study we confirm that the modes of reversion that appear, considering the geometric configurations presented in the results, are the Vortex and the Transversal. Subsequently to this, we performed the analysis using micromagnetic simulation obtaining hysteresis curves, coercive field H_c and reduced remanence M_r , in addition to a phase diagram of the total energy as a function of the thickness of the nanotube, resulting in the confirmation of the analytical calculations, the which have Vortex or Transversal modes. The angular dependence of H_c and M_r for different β thicknesses. With this, we confirm that by varying the angle of application of the magnetic field there is a change in the mode of reversal of the magnetization. It was also a research topic, through the simulations, the behavior of H_c and M_r for different distances between nanotubes. This study provides an analysis of the exchange and dipole interactions between nanotubes. In addition, we obtained results concerning the dynamic simulation of the magnetic moments, in which the strong dipolar influence on the nanotubes is verified, confirmed by the magnetization maps and the graphs of the time evolution of the moments. Finishing our results, we studied the reversal of magnetic moments as a function of the inverted magnetic field. We analyzed the graphs for the magnetic moment component in the Z axis (m_z) and the exchange energy (E_{exch}) as a function of time, and thus modify the value of the magnetic field $H_{ext} = -\Delta H$, on what $\Delta H = 5, 10, 20, 50$ e 110 mT. We observed that the importance of these analyzes is due to the values of the exchange energy that is associated with the mode of reversion of the moments. In the case of a well-defined reversal mode, the exchange energy will not change in time during the reversal. With this, there are several ways of following the reversal of magnetic moments and the idea of imposing several final conditions, $\Delta H = 5, 10, 20, 50$ e 110 mT, it is related to the independence that the system should assume the equilibrium condition of each mode of reversion. In this way, we see that in all ΔH , the exchange energy changes in different ways and above all, oscillating, this oscillation shows that there is no well established mode and the changes occurring in m_z confirm this. Therefore, there is no well defined mode in the reversal of nanotubes in arrangement and therefore the solutions of a single nanotube do not fully fit this new situation. Thus, the study on the reversal of magnetic moments as a function of the inverted field is related to promises of recording in magnetic media.

Keywords: Nanotubes. Micromagnetic Simulation. OOMMF. MuMax3. Magnetization.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	– Esquema da formação dos polos livres superficiais, levando à formação do campo desmagnetizante, onde no esquema o campo externo aplicado possui duas direções: (a) Paralela ao eixo curto e (b) paralela ao eixo longo.	30
Figura 2	– Distribuição espacial de energia magnetocristalina para um cristal com anisotropia uniaxial, no esquema mostra-se a representação do eixo de fácil magnetização com ($K_u > 0$).	31
Figura 3	– Distribuição espacial de energia para cristais cúbicos, representação do eixo fácil ($K_c < 0$). A figura da esquerda representa o ferro e a direita o níquel. .	32
Figura 4	– Esquema de dois materiais ferromagnéticos exibindo estrutura de multidomínios (a) e de monodomínio (b).	32
Figura 5	– Dinâmica da magnetização em presença de um campo magnético efetivo. A Figura esquematiza o movimento de precessão amortecido do vetor magnetização em direção ao campo magnético efetivo $\vec{H}_{eff}$ de acordo com a equação de Gilbert do movimento.	35
Figura 6	– Ilustração da curva de histerese magnética. A Figura apresenta a Magnetização (M), a Magnetização de Saturação (M_s), a Magnetização remanente (M_r) e o Campo coercivo (H_c).	37
Figura 7	– Esquema dos modos de reversão da magnetização em nanoestruturas cilíndricas: (esquerda) rotação coerente, (centro) parede de domínio do tipo vórtex e (direita) parede de domínio do tipo transversal, para o campo externo paralelo ao eixo do nanotubo.	39
Figura 8	– Descrição dos parâmetros geométricos de uma nanoestrutura cilíndrica; r é o raio interno do tubo, R o raio externo, L o comprimento do cilindro e $\beta = r/R$, um parâmetro adimensional.	40
Figura 9	– Representação esquemática de um nanotubo, os momentos magnéticos na configuração de modo de reversão coerente (L é o comprimento do nanotubo, d_w é a espessura da parede e R o raio externo).	41
Figura 10	– Representação esquemática do nanotubo, os momentos magnéticos e o modo de reversão do tipo vórtex, em que a largura da parede de domínio é representada por w_V e a posição do centro da parede de domínio por z_w	43
Figura 11	– Representação esquemática do nanotubo, os momentos magnéticos e o modo de reversão transversal.	50
Figura 12	– Esquema dos parâmetros geométricos do nanotubo magnético. Seção reta, com seus raios interno r , externo R , razão β , o comprimento L e o ângulo θ entre o eixo do nanotubo e o campo aplicado H_a	56

Figura 13 – Curva de histerese de um conjunto de nanotubos paralelos de Co rodeados por uma matriz porosa não magnética. O campo externo é aplicado ao longo do eixo do tubo. O sinal ferromagnético (pontos) é extraído dos dados experimentais, $T_{exp} = 300$ K. A linha contínua representa os resultados das simulações numéricas. Lado direito: dados experimentais junto com a simulação micromagnética em $T_{exp} = 1,8$ K. Lado esquerdo: distribuição log-normal dos coeficientes de anisotropia, K , obtida por ajuste dos dados experimentais. A seta indica o valor de anisotropia cristalina para FCC-Co [1].	58
Figura 14 – Diagrama de fases para nanotubos magnéticos dando as regiões no plano RH onde uma das configurações tem menor energia: fase F para a esquerda superior, fase V para a parte inferior direita. Os pontos 1, 2, 3 e 4 são resultados obtidos para $R = 90$ nm e $L = 60$ μ m [2].	59
Figura 15 – Energia magnética das configurações coerente (círculos em azul) e vórtex (triângulos em vermelho) de um tubo em unidades de $\mu_0 M_0^2 L_x^3$, em função de β	60
Figura 16 – Instantâneos da reversão nos nanotubos definido por (a) $\beta = 0,17$, (b) $\beta = 0,33$ e (c) $\beta = 0,5$, nas duas fases diferentes do processo. A abscissa representa a coordenada axial, z , ao longo do tubo e as ordenadas dão os componentes médios da magnetização. m_x linha tracejada (azul), m_y linha pontilhada (vermelha) e m_z linha sólida (preta), t_1 e t_2 são os estágios temporais no processo de reversão dos momentos magnéticos.	62
Figura 17 – As linhas contínuas pretas ilustram: (a) as barreiras energéticas e (b) a largura da parede para o modo V e as linhas a tracejado azul correspondem ao modo T.	63
Figura 18 – Dependência angular da coercividade, H_c , de um nanotubo de níquel com $L = 0,5$ μ m, $\beta = 14/30$ e (a) $R = 10$ nm e em (b) $R = 25$ nm.	64
Figura 19 – Dependência angular do campo coercitivo medido experimentalmente (quadrados) e calculado analiticamente (modo C: sólido azul, modo T: vermelho tracejado e modo V: verde pontilhado) para arranjos Co (a) e (b), e para arranjos de Ni (c) e (d).	65
Figura 20 – Morfologia dos nanotubos de cobalto: (a) imagens em FESEM dos nanotubos de com espessura e_2 e (b) imagens em TEM dos nanotubos de espessura e_1 . A inserção mostra o padrão de difração dos nanotubos mostrando sua estrutura cristalina <i>fcc</i>	66
Figura 21 – Dependência angular do campo coercitivo para o arranjo de nanotubos de Co, Fe e Ni, (a) espessura e_1 e (b) e_2	67
Figura 22 – Dependência angular do SQ (remanência) para o arranjo de nanotubos de Co, Fe e Ni, (a) espessura e_1 e (b) e_2	68
Figura 23 – Janela <i>mmLaunch</i> que dá acesso a um conjunto de outras janelas cujas funções são: salvar, editar e executar o problema	71

Figura 24 – Demonstração do <i>mmArchive</i> em execução.	71
Figura 25 – Ilustração do <i>mmDataTable</i> , mostrando os dados que foram calculados, lado esquerdo mostrando a janela e do lado direito as variáveis micromagnéticas.	72
Figura 26 – A janela <i>mmDisp</i> mostra graficamente a evolução do campo dos momentos da amostra em estudo. Neste caso, a amostra tem o formato do próprio nome do simulador, e a proporção é de um <i>spin</i> (setas pretas) para cada duas células. O padrão colorido está de acordo com o sistema de eixos, de maneira a indicar a direção 3D dos <i>spins</i> de cada célula.	73
Figura 27 – Ilustração da Janela <i>mmGraph</i> , que mostra um gráfico da magnetização em função do campo aplicado, à esquerda, e seus respectivos eixos, X-Axis e Y ₁ -Axis, à direita.	73
Figura 28 – Janela <i>mmProbEd</i> , à esquerda, e a janela acoplada, à direita, para a definição do problema magnético.	74
Figura 29 – Janela <i>mmSolve2D</i> usada na resolução do problema micromagnético.	75
Figura 30 – Janela <i>OXSii</i> usada na resolução de problemas 3D.	75
Figura 31 – Campo vetorial de <i>output</i> (saída) numa simulação do MuMax3. As cores representam as diferentes orientações do campo vetorial.	76
Figura 32 – Interface da <i>web</i> do MuMax3, pode-se visualizar os parâmetros micromagnéticos usados numa simulação.	77
Figura 33 – Interface mostrando parâmetros, como, quantidade e tamanho de células.	78
Figura 34 – Interface mostrando o <i>solver</i> do MuMax3, especificando parâmetros como o tempo da simulação.	79
Figura 35 – Interface descrevendo a geometria, comportamento dos momentos e gráfico da magnetização como função do tempo.	79
Figura 36 – Parâmetros micromagnéticos envolvidos na execução da simulação.	80
Figura 37 – Esquematização do desempenho da simulação do <i>OOMMF</i> e <i>MuMax3</i>	81
Figura 38 – Fluxograma da simulação computacional é usado para os <i>softwares OOMMF</i> e <i>MuMax3</i>	82
Figura 39 – Esquematização da malha regular de um cubóide usando o MDF. Para a figura (a), tem-se a representação bi-dimensional da malha regular e na (b) a representação tri-dimensional.	83
Figura 40 – Figura esquemática da malha para o MDF, em (a) vemos a configuração do método, em (b) a 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 $\vec{M}(i, j, k) = M_S \vec{m}(i, j, k)$	84
Figura 41 – Esquematização de um nanotubo, (a) especificando seu comprimento L e o campo aplicado H_a . Em (b), mostra-se a seção reta do nanotubo no plano XY , os raios interno r e externo R	92

Figura 42 – A representação dos ciclos de histerese para as variações da razão β em (a) 0, (b) 0,25, (c) 0,375, (d) 0,5, (e) 0,625 e (f) 0,75.	93
Figura 43 – Seção do nanotubo de 1 μm de comprimento, mostrando a formação do modo vórtex, para $\beta = 0,25$ e o campo de 15 mT, em (a) $L_1 = 0,2 \mu\text{m}$, (b) $L_2 = 0,5 \mu\text{m}$ e (c) $L_3 = 0,8 \mu\text{m}$	94
Figura 44 – Seção do nanotubo de 1 μm de comprimento, mostrando os mapas com a formação do modo transversal, para $\beta = 0,75$ e o campo de 50 mT, em (a) $L_1 = 0,45 \mu\text{m}$, (b) $L_2 = 0,5 \mu\text{m}$ e (c) $L_3 = 0,55 \mu\text{m}$	94
Figura 45 – A figura (a) mostra a coercividade H_c como função da razão β , em (b) a remanência reduzida M_R/M_s em função da razão β	95
Figura 46 – Ciclos de histerese em função da variação do ângulo θ de aplicação do campo magnético para $\beta = 0,5$. Em (a) $\theta = 0^\circ$, (b) $\theta = 40^\circ$, (c) $\theta = 50^\circ$, (d) $\theta = 70^\circ$, (e) $\theta = 80^\circ$ e (f) $\theta = 90^\circ$	97
Figura 47 – A figura (a) mostra coercividade H_c e em (b) a remanência reduzida M_r/M_s como função de θ	98
Figura 48 – A Figura (a) mostra a coercividade e em (b) a remanência reduzida como função de θ , além de exibir a variação com os valores de β	99
Figura 49 – Energia dos modos de reversão como função de β . Este gráfico é um diagrama de fase que indica a transição entre os modos.	100
Figura 50 – Figura esquemática do arranjo hexagonal de 7 nanotubos magnéticos, em que $D = 2R$ é o diâmetro externo do nanotubo, d é a distância entre as superfícies dos nanotubos e L é o comprimento dos nanotubos.	102
Figura 51 – Curvas de histerese para o arranjo hexagonal de níquel, neste caso o campo externo é paralelo ao eixo Z. Variamos a razão β e a distância entre os nanotubos. Apresentando nas colunas distâncias de 0 nm, 55 nm e 100 nm, sendo (a), (b) e (c) para $\beta = 0,2$, (d), (e) e (f) para $\beta=0,5$ e (g), (h) e (i) para $\beta=0,8$	103
Figura 52 – Coercividade e remanência como função de β para as respectivas distâncias entre os nanotubos de níquel.	105
Figura 53 – Curvas de histerese para o arranjo hexagonal de níquel, neste caso $d = 0 \text{ nm}$ e a razão $\beta = 0,5$ são fixos. O campo magnético externo é variado segundo o ângulo θ , $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$. Em (a), $\theta = 0^\circ$, em (b) $\theta = 30^\circ$, em (c) $\theta = 60^\circ$ e em (d) $\theta = 90^\circ$	106
Figura 54 – Coercividade e Remanência reduzida para $d = 0 \text{ nm}$ e a razão $\beta = 0,5$ como função do ângulo de aplicação do campo magnético, $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$	107
Figura 55 – Esquema da simulação da reversão da magnetização. Inicialmente o arranjo tem uma magnetização no sentido negativo do eixo Z e o campo externo aplicado no sentido positivo.	109

Figura 56 – Esquema da simulação da reversão da magnetização durante a reversão dos momentos magnéticos, os quais começam a rotacionar (ou girar), as cores misturadas indicam este movimento.	109
Figura 57 – Esquema da simulação da reversão da magnetização. Depois de um determinado tempo, o momento magnético reverteu a sua magnetização, com isso, campo externo e momento se encontram no mesmo sentido sobre o eixo Z. .	110
Figura 58 – Energia de troca durante a reversão da magnetização para $H_a = 500$ mT. . .	111
Figura 59 – Evolução temporal das componentes m_x e m_y da magnetização e suas respectivas distâncias. Na Figura (a) a distância entre os nanotubos é de 0 nm, em (b) é de 55 nm e em (c) 100 nm.	112
Figura 60 – Evolução temporal das componentes da magnetização para $\beta = 0,2$ no arranjo de nanotubos no plano XY para distância 0 nm. Em (a) 0,01 ns, (b) 0,25 ns, (c) 0,45 ns, (d) 0,70 ns e (e) 0,90 ns. A distribuição de cores apresenta a orientação dos momentos.	114
Figura 61 – Evolução temporal das componentes da magnetização a para $\beta = 0,2$ no arranjo de nanotubos no plano XY para distância 55 nm. Em (a) 0,01 ns, (b) 0,30 ns, (c) 0,50 ns, (d) 0,70 ns e (e) 1,0 ns. A distribuição de cores apresenta a orientação dos momentos magnéticos no arranjo para $H_a = 500$ mT. . . .	116
Figura 62 – Evolução temporal das componentes da magnetização para $\beta = 0,2$ no arranjo de nanotubos no plano XY para distância 100 nm. Em (a) 0,01 ns, (b) 0,30 ns, (c) 0,5 ns, (d) 0,70 ns e (e) 1,0 ns. A distribuição de cores apresenta a orientação dos momentos magnéticos no arranjo para $H_a = 500$ mT. . . .	117
Figura 63 – Energia de troca evoluindo temporalmente para a razão $\beta = 0,8$ e $H_a = 500$ mT.	118
Figura 64 – Evolução temporal das componentes m_x e m_y da magnetização e suas respectivas distâncias: 0 nm, 55 nm e 100 nm.	119
Figura 65 – Evolução temporal das componentes para $\beta = 0,8$ no arranjo de nanotubos no plano XY para distância 0 nm. Em (a) 0,01 ns, (b) 0,20 ns, (c) 0,35 ns, (d) 0,55 ns e (e) 1,2 ns. A distribuição de cores apresenta a orientação dos momentos magnéticos no arranjo para $H_a = 500$ mT.	121
Figura 66 – Evolução temporal das componentes para $\beta = 0,8$ no arranjo de nanotubos no plano XY para distância 55 nm. Em (a) 0,01 ns, (b) 0,28 ns, (c) 0,40 ns, (d) 0,60 ns e (e) 1,2 ns. A distribuição de cores apresenta a orientação dos momentos magnéticos no arranjo para $H_a = 500$ mT.	122
Figura 67 – Evolução temporal das componentes para $\beta = 0,8$ no arranjo de nanotubos no plano XY para distância 100 nm. Em (a) 0,01 ns, (b) 0,30 ns, (c) 0,40 ns, (d) 0,60 ns, (e) 1,2 ns e (f) 1,8 ns. A distribuição de cores apresenta a orientação dos momentos magnéticos no arranjo para $H_a = 500$ mT. . . .	123
Figura 68 – Laço de Histerese utilizado na variação de ΔH	125

Figura 69 – Evolução temporal da componente m_z da magnetização e da energia de troca E_{exch} para uma variação de campo $\Delta H = -5$ mT.	126
Figura 70 – Evolução temporal da componente m_z da magnetização e da energia de troca E_{exch} para uma variação de campo $\Delta H = -10$ mT.	127
Figura 71 – Evolução temporal da componente m_z da magnetização e da energia de troca E_{exch} para uma variação de campo $\Delta H = -20$ mT.	128
Figura 72 – Evolução temporal da componente m_z da magnetização e da energia de troca E_{exch} para uma variação de campo $\Delta H = -50$ mT.	129
Figura 73 – Evolução temporal da componente m_z da magnetização e da energia de troca E_{exch} para uma variação de campo $\Delta H = -110$ mT.	130
Figura 74 – Fragmento do código micromagnético da simulação estática de um nanotubo magnético isolado de Níquel. Mostram-se o Atlas, a Malha e os termos e geometria envolvidos.	147
Figura 75 – Fragmento do código micromagnético da simulação estática de um nanotubo magnético isolado de Níquel. Particularmente mostram-se as energias envolvidas no processo e 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 $\vec{m}_0$	148
Figura 76 – Neste fragmento do código, mostram-se: número e tamanho de células, além dos parâmetros que definem o formato do arranjo hexagonal dos nanotubos.	149
Figura 77 – O fragmento do código mostram-se: a forma do material, a geometria para uma determinada forma e os parâmetros M_{sat} , A_{ex} , K_{c1} , $Anis_{c1}$, $Anis_{c2}$, além do <i>damping alpha</i> , utilizado em simulações dinâmicas.	150
Figura 78 – Fragmento do código mostrando o vetor magnetização inicial, as energias envolvidas e o comando para realizar o laço de histerese.	151
Figura 79 – Fragmento do código relacionado ao <i>Running</i> , que define variáveis como função do tempo.	152

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Dados para os parâmetros micromagnéticos de alguns materiais.	36
Tabela 2 – Propriedades intrínsecas dos materiais e parâmetros da simulação para o MuMax3.	102
Tabela 3 – Os tempos e distâncias entre nanotubos para confecção dos mapas magnéticos.	113
Tabela 4 – Os tempos e distâncias entre nanotubos para confecção dos mapas magnéticos.	120

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
β	Espessura dos nanotubos
$\vec{M}$	Vetor 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
u_s	Densidade superficial de energia potencial
μ_0	Permeabilidade magnética do vácuo
$\vec{B}$	Campo de indução
$\vec{\tau}$	Torque magnético
$\vec{\mu}$	Dipolo magnético
$\vec{S}$	<i>Spin</i> do elétron
γ	Razão giromagnética
g	Fator de <i>Landé</i>
q_e	Carga do elétron
m_e	Massa do elétron
μ_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
J_{ij}	Integral de Troca
$\mathcal{U}_{exch}$	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	Distância 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 elétrico
$\vec{\rho}(\vec{r}, t)$	Densidade volumétrica de carga livre
$\vec{\nabla}$	Operador nabra
$\frac{d}{dt}$	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 célula
$\Delta X, \Delta Y, \Delta Z$	Dimensões da malha
l_{ex}	Comprimento 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	22
2	FUNDAMENTOS DO MICROMAGNETISMO	26
2.1	<i>INTRODUÇÃO</i>	26
2.2	<i>CONTRIBUIÇÕES PARA A ENERGIA</i>	27
2.2.1	Interação de Troca	27
2.2.2	Energia magnetostática	29
2.2.3	Energia Magnetocristalina	31
2.2.4	Energia Zeeman	33
2.3	<i>DINÂMICA DE MAGNETIZAÇÃO</i>	33
2.3.1	Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert	33
2.3.2	Campo efetivo	35
2.4	<i>CURVA DE HISTERESE MAGNÉTICA</i>	36
3	ESTUDO ANALÍTICO DOS MODOS DE REVERSÃO DA MAGNETIZA- ÇÃO PARA NANOTUBOS MAGNÉTICOS	38
3.1	<i>MODO DE REVERSÃO COERENTE</i>	40
3.2	<i>MODO DE REVERSÃO VÓRTEX</i>	43
3.3	<i>MODO DE REVERSÃO TRANSVERSAL</i>	50
3.4	<i>CÁLCULO DA ENERGIA MAGNETOCRISTALINA</i>	52
3.5	<i>CÁLCULO DA ENERGIA ZEEMAN</i>	54
4	NANOTUBOS MAGNÉTICOS	56
5	SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA UTILIZANDO <i>OBJECT ORIENTED</i> <i>MICROMAGNETIC FRAMEWORK</i> (OOMMF) E MUMAX3	69
5.1	<i>SIMULADORES MICROMAGNÉTICOS</i>	69
5.2	<i>OBJECT ORIENTED MICROMAGNETIC FRAMEWORK (OOMMF)</i> . . .	69
5.3	<i>MUMAX3 - SIMULADOR BASEADO EM GPU</i>	76
5.3.1	Executando a Simulação	76
5.3.2	Script para Simular no MuMax3	77
5.3.2.1	<u>Rotina de cálculo para os <i>softwares</i> OOMMF e MuMax3</u>	81
5.4	<i>MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS E DISCRETIZAÇÃO DAS EQUA- ÇÕES DO MICROMAGNETISMO</i>	83
5.4.1	Discretização das Equações Micromagnéticas	85
5.4.2	Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert	88

6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	91
6.1	CONSIDERAÇÕES INICIAIS DA SIMULAÇÃO	91
6.2	RESULTADOS DA SIMULAÇÃO COM OOMMF PARA UM NANOTUBO DE Ni	91
6.2.1	Dependência angular da coercividade e da remanência reduzida para um nanotubo isolado	92
6.3	SIMULAÇÃO UTILIZANDO O MUMAX3: ARRANJO HEXAGONAL DE NANOTUBOS MAGNÉTICOS DE NÍQUEL	101
6.3.1	Interações Magnéticas no arranjo hexagonal de nanotubos de níquel por MuMax3	103
6.3.2	Dependência angular da coercividade (H_c) e remanência (M_r) em um arranjo de nanotubos de níquel	106
6.3.3	Estudo da dinâmica da reversão dos momentos no arranjo hexagonal de nanotubos de níquel	108
6.3.3.1	<u>Simulação mantendo fixa a razão $\beta = 0,2$ e variando as distâncias</u>	110
6.3.3.2	<u>Evolução temporal dos MAPAS para $\beta = 0,2$</u>	113
6.3.3.3	<u>Simulação mantendo fixa a razão $\beta = 0,8$ e variando as distâncias</u>	118
6.3.3.4	<u>Evolução temporal dos MAPAS para $\beta = 0,8$</u>	120
6.4	ESTUDO DA REVERSÃO DOS MOMENTOS MAGNÉTICOS EM FUNÇÃO DO CAMPO INVERTIDO	124
7	PERSPECTIVAS	132
8	CONSIDERAÇÕES FINAIS	133
	REFERÊNCIAS	136
	ANEXO A – SCRIPT DO OOMMF	145
	ANEXO B – SCRIPT DO MUMAX3	149

1 INTRODUÇÃO

A nanociência é um campo que se concentra no desenvolvimento de novas ferramentas de síntese e análise, no estudo dos fenômenos e manipulação de materiais na escala nanométrica [1, 3, 4]. Nanomateriais possuem pelo menos uma dimensão que se encontra na faixa de 10 a 100 nm. O interesse em estudar sistemas nesta escala é grande, pois os materiais apresentam propriedades físicas e químicas distintas às das amostras na escala macroscópica. Nanotecnologia é a aplicação das propriedades únicas dos nanomateriais à tecnologia para a criação de materiais, dispositivos e sistemas com novas propriedades e funções devido a seu pequeno tamanho. Este campo de interesse é interdisciplinar, já que engloba as áreas de física, química, biologia, ciência e engenharia de materiais e devido aos investimentos de vários recursos nesta área [5, 6], a nanotecnologia está crescendo e progredindo num ritmo sem precedentes [7, 8].

Dentre as várias formas de nanoestruturas que podem ser estudadas, durante os últimos anos, têm sido intensamente investigadas as propriedades magnéticas de nanoestruturas cilíndricas, tais como fios e tubos. As propriedades físicas destes sistemas na escala nanométrica, permitem o aparecimento de novos fenômenos que podem ser utilizados para diversos fins biológicos [2, 9, 10], em que as nanoestruturas magnéticas flutuando em soluções, podem ser utilizadas em seres vivos [11], em dispositivos de gravação magnética [12], conseguindo aumentar a densidade das informações, e além destas aplicações, também estão sendo utilizados como tratamento experimental (hipertermia) contra o câncer. O comportamento magnético destas nanoestruturas, como as configurações de mínima energia e os mecanismos de reversão da magnetização, são muito sensíveis ao tamanho e à forma dos nanotubos, sendo suas manipulações as principais representantes das mudanças nas interações existentes em um arranjo de nanotubos, como as energias de troca, magnetostática e a anisotropia de forma.

Do ponto de vista experimental, as nanoestruturas podem ser sintetizadas através da aplicação de diversos métodos, dentre eles, mediante um processo eletroquímico, no qual se produz o crescimento de nanoestruturas cilíndricas nos poros de uma membrana de óxido de alumínio (Al_2O_3) [13], obtendo assim um ordenamento dos nanotubos na amostra e a técnica de eletrodeposição utilizando uma membrana de policarbonato como molde para crescimento dos nanomateriais [14]. Em geral, sintetizam-se nanoestruturas magnéticas cilíndricas de materiais ferromagnéticos, tais como níquel, cobalto ou ferro, além de suas ligas. Dentre estes estudos, pode-se destacar, por exemplo, a medição das velocidades de propagação de uma parede de domínio num nanofio cilíndrico de permalloy [15], encontrando valores em torno de 500 m/s para 40 Oe e de 1500 m/s para 49 Oe, muito superiores às observadas em nanofios retangulares de NiFe [16], em que se mediram 170 m/s para 100 Oe, o qual permitiria utilizar estas nanoestruturas como uma alternativa para dispositivos *spintrônicos*. A *spintrônica* se utiliza da propriedade quântica do *spin*, sendo uma tecnologia emergente que pode incrementar a funcionalidade de

futuros dispositivos. Estes dispositivos prometem combinar três características, não volatilidade (conservar a memória), alta densidade de armazenamento de informação e alta velocidade de funcionamento dos dispositivos. Sendo, particularmente, atrativos em diversas aplicações, como o futuro uso de implantes biomédicos. Assim, para o estudo das nanoestruturas magnéticas, realizaram-se algumas previsões teóricas sobre as propriedades destas nanoestruturas [17, 18]. Os materiais magnéticos utilizados para formação de nanotubos incluem Ni, Co, Fe, CoFe_2O_4 , FeNi e Fe_3O_4 [19, 20]. Até a data, existem alguns estudos teóricos sobre o efeito das interações magnetostáticas com forma cilíndrica [21–23] e entre elementos com diversas formas regulares [24]. Juntamente com o progresso experimental, cálculos teóricos e simulações computacionais, para nanotubos, foram realizados extensivamente para trabalhar as propriedades, entre elas: propriedades de magnetotransporte [25], propriedades de paredes de domínio e anisotropias, além da investigação do comportamento dos estados de magnetização em nanotubos de níquel individuais por magnetometria *cantilever* sensível [26].

Com base nas várias aplicações, torna-se imprescindível, atualmente, explicar e compreender com domínio pleno os comportamentos magnéticos e a dinâmica da magnetização destes materiais na escala nanométrica. Com isso, é importante salientar que nos dias atuais, grande parte da comunidade científica realiza investigações utilizando simulações computacionais. Possibilitando investigar sistemas complexos que são difíceis de estudar, ou quase impossíveis, utilizando unicamente cálculos analíticos. É observado na literatura científica, que estas simulações permitem reproduzir condições que, às vezes, são bastante complicadas de satisfazer experimentalmente. Como exemplos, podemos citar o modelamento de um nanotubo de cobalto variando sua constante de anisotropia, realizado por *Lebeckia et. al.* [27] através do *software OOMMF* [28], comparando os parâmetros da distribuição de anisotropia experimental com seu modelo teórico. No artigo escrito por *Escrig et. al.* [29], relatam-se os efeitos da anisotropia em nanotubos, calculando expressões analíticas para a energia magnética total, obtendo um diagrama de fases magnético relacionado aos parâmetros geométricos, como raios interno e externo, além do comprimento dos nanotubos. Outra abordagem verificada na literatura, está na dependência angular da coercividade feita por *M. P. Proença et. al.* [30], observando mudanças no modo de reversão da magnetização para diferentes diâmetros do nanotubo e ângulos de aplicação do campo magnético, proporcionando modificações nos modos de reversão (coerente, vórtex ou transversal), e isto acontecendo para um ângulo crítico, entre $\theta = 60^\circ$ e $\theta = 80^\circ$. Com isso, os simuladores micromagnéticos são de muita importância no estudo das propriedades magnéticas de diversas nanoestruturas. Neste trabalho, utilizou-se os *softwares* livres *OOMMF* [28] e *MuMax3* [31] para realizar os cálculos computacionais.

O *OOMMF* acrônimo de (*Object Oriented Micromagnetic Framework*) é um simulador micromagnético desenvolvido e projetado na MCS D (*Mathematical and Computational Sciences Division*) do ITL (*Information Technology Laboratory*) no NIST (*National Institute of Standards and Technology*), em cooperação direta com o μ MAG (*Micromagnetic Modeling Activity Group*) [32], que é um grupo voltado a fazer programas portáteis de código aberto, além de ferramentas

para simulações micromagnéticas. E o *MuMax3*, desenvolvido pelo grupo DyNaMat (Dynamics of Functional Nano Materials) na Universidade de Ghent, Bélgica. O *MuMax3* fornece uma linguagem de *script*, que se torna simples para simulações complexas. O sistema que será modelado é definido por vários parâmetros. Para o propósito das simulações realizadas nesta tese, os parâmetros mais relevantes são: constante de rigidez magnética A (*Exchange stiffness*), magnetização de saturação M_s , constantes de anisotropia magnetocristalina uniaxial K_u ou cúbica K_c . Os simuladores micromagnéticos são classificados pelo método de discretização utilizado: simuladores baseados no Método de Diferenças Finitas (MDF) e no Método de Elementos Finitos (MEF), o *OOMMF* e *MuMax3* são baseados no Método de Diferenças Finitas (MDF). Os dois simuladores já foram bastante testados e apresentaram bons resultados em comparação aos obtidos experimentalmente e até o presente momento, são citados em mais de 2000 artigos.

É oportuno destacar que diversos artigos abordam as soluções analíticas da reversão dos momentos magnéticos para um único nanotubo, mas iremos observar que para um arranjo hexagonal de nanotubos estas soluções deixam de ser aplicadas devido às diversas irregularidades estruturais e à proximidade dos tubos, fato que ocorre em um arranjo real. Por isso, em nosso trabalho, realizamos estudos, utilizando simulações computacionais, sobre arranjos hexagonais de nanotubos magnéticos de níquel. Para entendermos as propriedades magnéticas (coercividade, remanência reduzida, laços de histerese, interações de troca e dipolar), utilizamos como base a dependência destas propriedades com parâmetros geométricos dos nanotubos, como raio interno ou externo e ângulo de aplicação do campo magnético. Além desses parâmetros, também incluímos, em alguns dos nossos cálculos, a dependência temporal para a configuração dos momentos magnéticos e para a energia de troca (*Exchange*). Com isso, teremos a possibilidade de analisar quais são os efeitos desses parâmetros geométricos sobre as propriedades magnéticas e a possibilidade da ocorrência de mudança do modo de reversão dos momentos magnéticos.

A tese é estruturada em Capítulos como se segue, no Capítulo 1, introduzimos explicações sobre todo o contexto da tese, abordando-se a importância dos estudos por simulação micromagnética nestes objetos na escala nanométrica, particularmente, o estudo dos efeitos da geometria dos nanotubos sobre as propriedades magnéticas. No Capítulo 2, revisamos os conceitos fundamentais do micromagnetismo, como contribuições para a energia total (interação de troca, energia magnetocristalina, energia magnetostática, energia Zeeman), além do estudo da dinâmica de magnetização, usando a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert e do Campo Efetivo para calcular a curva de histerese magnética. No Capítulo 3, desenvolvem-se os cálculos analíticos das energias para obtenção dos modos de reversão da magnetização, sendo os modos de reversão Coerente, Vórtex e Transversal. No Capítulo 4, iniciamos com uma revisão bibliográfica de alguns artigos científicos, que abordam o estudo de forma experimental ou teórica de materiais com forma cilíndrica. No Capítulo 5, faremos explicações sobre os dois *softwares* utilizados para realizar as simulações micromagnéticas (*OOMMF* e *MuMax3*), além de abordar o Método de Diferenças Finitas (MDF) e a discretização das Equações Micromagnéticas. No Capítulo 6, teremos as análises dos resultados obtidos através das simulações micromagnéticas. Serão

analisados resultados estáticos (sem a dependência temporal das propriedades magnéticas) e dinâmicos. No Capítulo 7 fazemos as devidas conclusões da tese, em que se encontram as mais importantes conclusões que foram obtidas durante as análises dos resultados. Finalizamos a tese com algumas perspectivas para trabalhos futuros e os *scripts* das simulações nos *softwares* *OOMMF* e *MuMax3*, os quais se encontram nos Anexos A e B. Por fim, as respectivas referências que foram utilizadas como base para realização da tese.

No próximo capítulo, discorreremos sobre os fundamentos que permeiam os cálculos micromagnéticos, tais como as contribuições das energias e a dinâmica da magnetização.

2 FUNDAMENTOS DO MICROMAGNETISMO

2.1 INTRODUÇÃO

Para o estudo teórico das propriedades magnéticas de nanoestruturas, de um ponto de vista mais rigoroso, é necessário construir a teoria com um formalismo da mecânica quântica. O magnetismo de qualquer material, não importando seu tamanho, está determinado pelo comportamento dos *spins* dos elétrons. Para átomos isolados, é possível entender o magnetismo mediante as regras de Hund, mas em materiais com grandes dimensões, macroscópicos, este fato se torna impossível devido à enorme quantidade de *spins* que participam das estruturas. Atualmente, no melhor dos casos, só é possível estudar o magnetismo em algumas dezenas de átomos, que significa tamanhos extremamente pequenos, da ordem de 1 ou 2 nanômetros ou mais, utilizando técnicas de estrutura eletrônica.

O escopo desta tese busca utilizar uma teoria, que contenha os elementos necessários, para abordar o fenômeno do magnetismo em materiais com dimensões nanométricas, e que não requeira um tempo exagerado de cálculo para obter resultados relevantes. A teoria considerada aqui é a teoria micromagnética (assim chamada por Brown [33]), a qual inclui as forças magnetostáticas. Por causa desta inclusão, não é possível usar a mecânica quântica, sendo assim, é necessário atacar o problema desde um ponto de vista macroscópico, utilizando as equações de Maxwell [34], e modelando as interações entre os momentos magnéticos e a anisotropia de forma clássica.

A teoria micromagnética tem sido utilizada no estudo dos processos de inversão da magnetização. Nos fundamentos da teoria, o que se faz é trabalhar com a teoria do contínuo do vetor magnetização, em lugar dos *spins* associados aos átomos. Devido a esta teoria, é possível estudar os efeitos de curto alcance, os quais são envolvidos pelas energias de troca, e de longo alcance (de dezenas a centenas de nanômetros) pela energia magnetostática. Com isso, pode-se correlacionar os efeitos da microestrutura e os detalhes da geometria das nanoestruturas, possibilitando estudar os mecanismos da inversão da magnetização.

A energia total de um material ferromagnético em função da magnetização, pode ser influenciada por uma grande quantidade de efeitos físicos. Em micromagnetismo, a magnetização, isto é a densidade de momentos magnéticos, é representada por um campo vetorial, $\vec{M}(\vec{r})$. Em muitos cálculos, a magnetização reduzida é utilizada, a qual é expressa como sendo $\vec{m} = \frac{\vec{M}}{M_S}$, M_S representa a magnetização de saturação do material. No estudo micromagnético, tem-se que determinar a direção da magnetização reduzida em cada ponto $\vec{r}$, isto é alcançado através da minimização da energia livre magnética [35]. O micromagnetismo é essencialmente uma aproximação contínua, que permite o cálculo de estruturas de magnetização e inversão da magnetização, supondo que a magnetização seja uma função contínua da posição, e derivando

expressões relevantes para a contribuição proveniente das energias de troca, magnetostática e magnetocristalina. Todos os termos de energia dependem apenas da magnetização local. Para a análise das propriedades magnéticas de nanotubos através de cálculo numérico ou de simulação computacional, a energia total envolve as contribuições da Interação de Troca, Anisotropia Magnetocristalina, Energia Dipolar e Energia Zeeman. Além dos cálculos da minimização da energia, tem-se a solução da equação de Landau-Lifshitz (1935)[36] e Gilbert em 1955 [37]. Para esta solução, o vetor magnetização é supostamente uniforme e a precessão de Larmor do vetor magnetização é governada pela equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, a qual envolve um parâmetro fenomenológico de amortecimento, α , e o campo magnético efetivo que é obtido do negativo da derivada funcional da energia de Gibbs.

Com esta breve explanação, abordaremos, inicialmente, a minimização da energia livre magnética.

2.2 CONTRIBUIÇÕES PARA A ENERGIA

A energia total de um sistema micromagnético é dada pela energia livre magnética, a qual depende diretamente da magnetização do material, do campo magnético externo e dos parâmetros geométricos da amostra, além das propriedades magnéticas dos materiais [35, 38, 39]. Assim, a energia total têm as contribuições macroscópicas da energia Zeeman e da energia magnetostática, além das contribuições microscópicas, tais como a energia magnetocristalina e a interação de troca (exchange). Portanto, neste capítulo abordaremos as principais contribuições para a energia livre, as quais, no próximo capítulo, servirão como base nos cálculos da energia livre em nanotubos magnéticos.

2.2.1 Interação de Troca

A interação de troca é a energia responsável por todos os momentos magnéticos apontarem na mesma direção, em ferromagnetismo, independentemente de qual direção seja esta. Sua origem não possui análogo clássico e é causada pela sobreposição dos orbitais dos elétrons vizinhos. Quando os *spins* são paralelos, a energia de troca se reduz, obtendo assim uma configuração estável. A interação eletrônica de troca [40] entre um par de momentos magnéticos vizinhos é descrita pelo Hamiltoniano de Heisenberg [41]:

$$e_{exc} = -J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.1)$$

em que J_{ij} é a constante de acoplamento entre os *spins* atômicos, cujo valor é dado pelas integrais de troca entre as funções de onda associadas com os átomos i e j . Tratando-se de átomos de um material ferromagnético, temos que $J > 0$, por outro lado, se $J < 0$, o material é antiferromagnético.

É possível obter a energia de troca total do material somando sobre todos os pares de primeiros vizinhos:

$$E_{i,j} = -J \sum_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -JS^2 \sum_{ij} \cos \phi_{ij}, \quad (2.2)$$

com ϕ_{ij} representando o ângulo relativo aos *spins* vizinhos $\vec{S}_i$ e $\vec{S}_j$. Em um material ferromagnético, este ângulo sempre é pequeno, $|\phi_{ij}| \ll 1$, o que possibilita expandir o cosseno até primeira ordem:

$$E_{exc} = -JS^2 \sum_{i,j} \left[1 - \frac{\phi_{ij}^2}{2} \right] = E_{exc}^0 + \frac{JS^2}{2} \sum_{ij} \phi_{ij}^2, \quad (2.3)$$

em que o primeiro termo é independente da configuração magnética do sistema, já que mostra o valor dos *spins* alinhados numa mesma direção. O segundo termo corresponde a energia de troca produzida pela mudança na direção da magnetização dos átomos vizinhos. Como se mencionou anteriormente, considerou-se um volume suficientemente pequeno que não permitia grandes variações na direção dos momentos magnéticos vizinhos. Assim, é possível a utilização de uma aproximação, pois o ângulo ϕ_{ij} entre os momentos magnéticos vizinhos $\vec{m}_i$ e $\vec{m}_j$ é pequeno. Realizando uma expansão em série de Taylor, tem-se:

$$|\phi_{ij}| \approx |\vec{m}_i - \vec{m}_j| \approx \left| r_{ix} \frac{\partial}{\partial x} + r_{iy} \frac{\partial}{\partial y} + r_{iz} \frac{\partial}{\partial z} \right| \vec{m} = (\vec{r}_i \cdot \vec{\nabla}) \vec{m}, \quad (2.4)$$

em que $\vec{r}_i$, representa o vetor que une os momentos magnéticos i e j . Portanto, somando-se os momentos magnéticos, obteremos:

$$E_{exc} = \frac{JS^2}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{S_i} \left[(\vec{r}_i \cdot \vec{\nabla}) \cdot \vec{m} \right]^2. \quad (2.5)$$

É interessante notar que a primeira soma é executada sobre todos os sítios na rede, enquanto a segunda soma é executada somente em sítios que são primeiros vizinhos do i -ésimo átomo. Logo, substituindo o somatório sobre i por uma integral sobre todo o material ferromagnético, obtêm-se:

$$E_{exc} = A \int [(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2] dV, \quad (2.6)$$

e como consequência, a densidade de energia de troca no limite contínuo é da forma:

$$e_{exc} = A[(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2]. \quad (2.7)$$

Os valores da constante de troca (J) podem ser obtidos por cálculo da teoria do densidade funcional *ab-initio* (DFT) [42]. Em que A é a constante de *stiffness* (rigidez) do material, a qual

é proporcional à constante de troca (J) entre os pares dos átomos magnéticos, sendo sua unidade de J/m , definida como:

$$A = \frac{JS^2}{a}c, \quad (2.8)$$

em que a é a constante de rede e c corresponde ao número de átomos em uma célula unitária, a qual depende se a rede é cúbica simples, cúbica de face centrada ou cúbica de corpo centrado.

2.2.2 Energia magnetostática

Do eletromagnetismo clássico, tem-se a relação constitutiva no vácuo [34]:

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H}, \quad (2.9)$$

onde $\vec{B}$ é a indução magnética e $\vec{H}$ é o campo. No interior de um material com magnetização $\vec{M}$, a expressão se torna:

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}). \quad (2.10)$$

Sendo assim, as equações de Maxwell podem ser escritas:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{B} = 0 \\ \nabla \times \vec{H}_{ext} = \mu_0 \vec{J} \\ \nabla \times \vec{H}_{dem} = 0 \end{cases} \quad (2.11)$$

Percebe-se a existência de dois tipos de campo, o campo aplicado, $\vec{H}_{ext}$, e o campo desmagnetizante, $\vec{H}_{dem}$. De forma geral, a solução da lei de Ampère no interior do material, tem a forma [40]:

$$\vec{H}_{dem} = \nabla U_{dem}, \quad (2.12)$$

em que U_{dem} é um potencial escalar magnetostático. Tendo em conta as equações 2.11 e 2.12, resulta:

$$\nabla^2 U_{dem} = \nabla \cdot \vec{M}. \quad (2.13)$$

A equação 2.13 é a equação de Poisson (EP), com isso, ao utilizarmos a função de Green, a equação EP pode ser resolvida, e sua solução geral será :

$$U_{dem}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\mu_0} \left[- \int_{\Omega'} \frac{\nabla' \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV' + \int_{S'_d} \frac{\vec{M}(\vec{r}') \cdot \vec{n}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS' \right]. \quad (2.14)$$

A primeira integral é tomada sobre o volume magnético, enquanto que o segundo termo é uma integral de superfície. O vetor $\vec{n}$ é normal à superfície, direcionado para fora da superfície da amostra. A equação 2.14 permite introduzir conceitos relacionados a cargas volumétricas e superficiais como fontes do campo desmagnetizante, análogo ao caso da eletrostática [34]:

$$\begin{aligned} \rho_{mag} &= -\mu_0(\nabla \cdot \vec{M}) \\ \sigma_{mag} &= \mu_0(\vec{M} \cdot \vec{n}) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Muitas vezes, o campo magnetostático fora do material é chamado na literatura como campo dispersivo. Considerando que o campo desmagnetizante descreve o campo dentro da amostra, o qual se opõe à direção da magnetização. Sendo assim, o termo da densidade de energia resultante do campo desmagnetizante é:

$$e_{dem} = -\frac{1}{2}\mu_0(\vec{H}_{dem} \cdot \vec{M}), \quad (2.16)$$

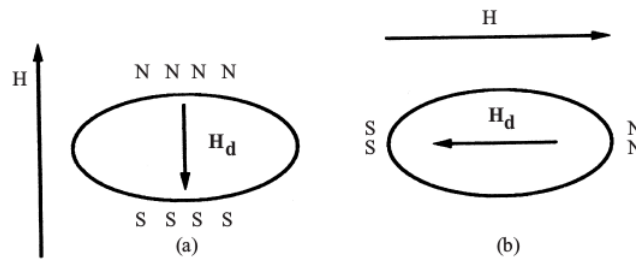
em que o fator $\frac{1}{2}$ exclui as auto-interações. A energia magnetostática total poderá ser escrita na forma:

$$E_{dem} = \int_{\Omega} e_{dem} dV = \frac{\mu_0}{2} \int_{\Omega} H_{dem}^2 dV. \quad (2.17)$$

A equação 2.17 possui as seguintes propriedades, primeira é que a energia magnetostática pode apenas ser minimizada evitando a formação de cargas magnéticas, a segunda é que a energia magnetostática total de um corpo ferromagnético é sempre positiva.

O primeiro ponto citado, expressa o fato que a magnetização tenderá a alinhar no contorno, tal que $\vec{M} \cdot \vec{n} \rightarrow 0$, de modo que minimize, $\nabla \cdot \vec{M}$, tanto quanto possível [33]. Uma das consequências deste princípio é a formação de estados de vórtex [43]. Direções preferenciais da magnetização podem ser determinadas devido à anisotropia de forma, levando em consideração uma analogia com materiais dielétricos, pode-se referenciar a polarização magnética (magnetização) através da criação de polos magnéticos livres na superfície da amostra. Assim, ao considerarmos uma amostra uniformemente magnetizada com seus fatores desmagnetizantes, os quais são mostrados analiticamente por [40, 43, 44]. Este fato leva à formação de um campo desmagnetizante ($\vec{H}_d$), o qual atua em oposição ao campo externo ($\vec{H}$) aplicado.

Figura 1 – Esquema da formação dos polos livres superficiais, levando à formação do campo desmagnetizante, onde no esquema o campo externo aplicado possui duas direções: (a) Paralela ao eixo curto e (b) paralela ao eixo longo.



Fonte: Produzida pelo autor.

A Figura 1 apresenta uma amostra elipsoidal com anisotropia de forma com um campo magnético aplicado em duas direções, produzindo polos magnéticos na superfície da amostra, sendo assim gera um campo desmagnetizante no interior da amostra. Com este fato, a energia envolvida no processo aumenta com o aumento do campo desmagnetizante, $\vec{H}_d$.

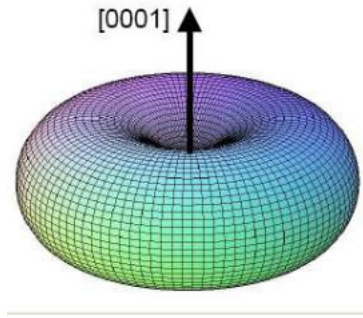
2.2.3 Energia Magnetocristalina

A energia magnetocristalina tem sua origem na estrutura cristalina do material. Devido à simetria do cristal, a direção da magnetização é, energeticamente, favorecida a um certo eixo. O caso mais simples de anisotropia magnetocristalina é a uniaxial, a densidade de energia para a 1ª ordem não nula, será:

$$e_{an} = K_u[1 - (\vec{m} \cdot \vec{k})^2], \quad (2.18)$$

em que, K_u é a constante de anisotropia uniaxial e $\vec{k}$ é um vetor unitário paralelo ao eixo de fácil magnetização. Este eixo representa a orientação preferencial da magnetização no cristal [35]. Na Figura 2, podemos observar a distribuição espacial de energia magnetocristalina para o cobalto, o qual possui constante de anisotropia positiva ($K_u > 0$). Materiais que possuem uma estrutura

Figura 2 – Distribuição espacial de energia magnetocristalina para um cristal com anisotropia uniaxial, no esquema mostra-se a representação do eixo de fácil magnetização com ($K_u > 0$).



Fonte: Produzida por [45].

de rede com simetria cúbica, naturalmente, permitem tipos de eixos de fácil magnetização, de tal modo que os vetores unitários, sejam ortogonais, como descrito em 2.19:

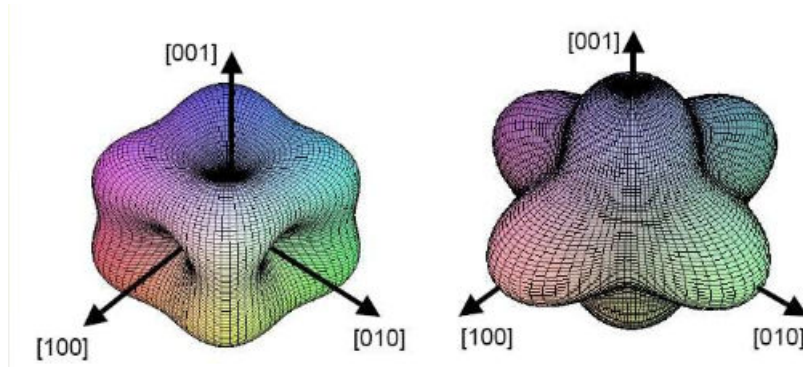
$$e_i \cdot e_j = \delta_{ij}. \quad (2.19)$$

A energia magnetocristalina, para este caso até a sexta ordem, é o resultado de uma expansão nas componentes da magnetização, a qual resulta em:

$$E = \int_{\Omega} [K_{c1}(m_1^2 m_2^2 + m_2^2 m_3^2 + m_3^2 m_1^2) + K_{c2} m_1^2 m_2^2 m_3^2] dV, \quad (2.20)$$

em que $m_i = \vec{e}_i \cdot \vec{m}$ é a componente da magnetização na direção do eixo $\vec{e}_i$. A simetria cúbica ocorre em amostras de α - ferro que possui uma estrutura cúbica de corpo centrado, e para o níquel, este possui uma estrutura cúbica de face centrada. Na Figura 3, mostramos a distribuição espacial de energia magnetocristalina cúbica para o ferro e o níquel, sendo que a constante $K_c < 0$ é negativa, para o níquel. Estas expressões para a energia magnetocristalina têm origem puramente fenomenológica, as quais descrevem efeitos anisotrópicos com boa exatidão.

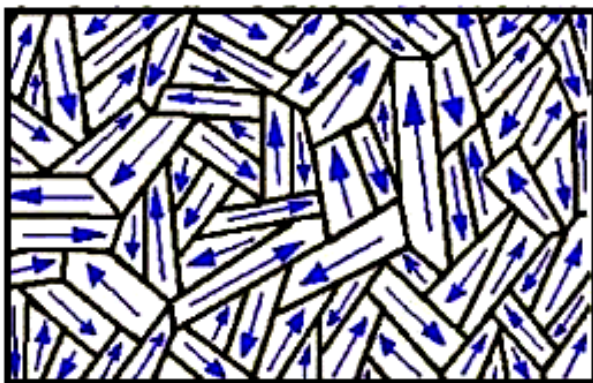
Figura 3 – Distribuição espacial de energia para cristais cúbicos, representação do eixo fácil ($K_c < 0$). A figura da esquerda representa o ferro e a direita o níquel.



Fonte: Produzida por [45].

A formação dos domínios magnéticos, Figura 4 surge do balanço entre a energia de troca e a energia magnetostática [46], sendo os domínios separados por uma espessura maior que o comprimento de troca, que será descrito na seção 2.3.2, equação 2.38. Esta espessura é influenciada pela energia magnetocristalina, a qual força os momentos magnéticos a se alinhar ao longo de um eixo ou de um plano de fácil magnetização. Como um exemplo, podemos mencionar que se temos dois domínios antiparalelos, um ao longo do eixo fácil da amostra, os dipolos na parede de domínio rotacionam fora do eixo de fácil magnetização, pelo qual a energia magnetocristalina tenta criar paredes menos espessas, enquanto a energia de troca vai tentar ampliá-las.

Figura 4 – Esquema de dois materiais ferromagnéticos exibindo estrutura de multidomínios (a) e de monodomínio (b).



(a) Multidomínio



(b) Monodomínio

Fonte: Produzida pelo autor.

2.2.4 Energia Zeeman

O campo Zeeman é conhecido em micromagnetismo como o campo aplicado e que pode ser usado para magnetizar a amostra em qualquer direção. A contribuição de um campo externo, $\vec{H}_{ext}$ é analisada pelo termo da densidade de energia Zeeman:

$$e_{Zee} = -\mu_0(\vec{H}_{ext} \cdot \vec{M}), \quad (2.21)$$

que depende da orientação relativa do campo externo e a magnetização local. O valor mínimo de e_{Zee} é alcançado quando o campo e a magnetização têm a mesma orientação. Para encontrar a expressão da energia Zeeman, basta integrar e_{Zee} em todo o volume da amostra:

$$E_{Zee} = -\mu_0 \int_{\Omega} (\vec{H}_{ext} \cdot \vec{M}) dV. \quad (2.22)$$

Os cálculos referentes à energia Zeeman podem ser encontrados nas referências [33, 40, 47].

2.3 DINÂMICA DE MAGNETIZAÇÃO

Nesta seção, introduz-se o estudo do comportamento dinâmico da magnetização utilizando a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, assim para o caso em que $\vec{M} \times \vec{H}_{eff} \neq 0$, o sistema evoluirá no tempo, exigindo uma descrição dinâmica da magnetização.

2.3.1 Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert

A descrição da dinâmica da magnetização pode ser dada pela equação de Landau-Lifshitz. Nesta abordagem, supõe-se que o campo efetivo $\vec{H}_{eff}$ gera um movimento de precessão sobre a magnetização local $\vec{M}(\vec{r}, t)$ da seguinte forma:

$$\vec{\tau} = \frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{M} \times \vec{H}_{eff}, \quad (2.23)$$

em que $\vec{L}$ é o momento angular associado ao vetor magnetização, o qual é descrito por:

$$\vec{L} = -\frac{\vec{M}}{\gamma_0}. \quad (2.24)$$

A constante é o fator giromagnético, dado por $\gamma_0 = \frac{ge\mu_0}{2m}$, em que e e m são a carga e a massa do elétron, respectivamente. O fator de Landé g [48] é igual a 2, isto quando o momento é do *spin* do elétron. Em muitos materiais ferromagnéticos, $g \simeq 2$, indicando que a contribuição orbital para o momento magnético é negligenciada [46]. Por exemplo, para o ferro, $g = 2$, 1 na ausência de um campo externo [49]. A taxa de variação da magnetização é relacionada ao torque pela expressão:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma_0 \vec{\tau} = -\gamma_0 [\vec{M} \times \vec{H}_{eff}]. \quad (2.25)$$

A magnetização precessiona ao redor de um campo efetivo com frequência $\omega = \gamma_0 \vec{H}_{eff}$, cujo valor está em torno de 17,6 GHz num campo de 1 Tesla. Em adição a esta precessão, processos

dissipativos amortecem o movimento da magnetização. Para explicar estes processos, Gilbert [37, 50], introduziu um termo de amortecimento fenomenológico (*damping*), o qual depende da magnetização de saturação e da taxa de variação do vetor magnetização, com isso:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma_0 \left[\vec{M} \times \left(\vec{H}_{eff} - \frac{\alpha}{\gamma_0 M_S} \frac{d\vec{M}}{dt} \right) \right], \quad (2.26)$$

α é considerada uma constante. Nota-se que ao multiplicar, escalarmente, a equação 2.26, por $\vec{M}$, o lado direito se anula, e o movimento conserva o valor da magnetização, $|\vec{M}| = M_S^2$:

$$\vec{M} \cdot \frac{d\vec{M}}{dt} = 0. \quad (2.27)$$

Na equação 2.26, a taxa de variação da magnetização é observada em ambos os membros. No entanto, fazendo a substituição de $\frac{d\vec{M}}{dt}$ no membro direito da equação 2.26, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{M}}{dt} &= -\gamma_0(\vec{M} \times \vec{H}_{eff}) + \frac{\alpha}{M_S} \vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \\ &= -\gamma_0(\vec{M} \times \vec{H}_{eff}) + \frac{\alpha}{M_S} \vec{M} \times \left[-\gamma_0(\vec{M} \times \vec{H}_{eff}) + \frac{\alpha}{M_S} \vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \right] \\ &= -\gamma_0(\vec{M} \times \vec{H}_{eff}) - \frac{\alpha\gamma_0}{M_S} \vec{M} \times [\vec{M} \times \vec{H}_{eff}] + \frac{\alpha^2}{M_S^2} \vec{M} \times \left(\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \right), \\ &= -\gamma_0(\vec{M} \times \vec{H}_{eff}) - \frac{\alpha\gamma_0}{M_S} \vec{M} \times [\vec{M} \times \vec{H}_{eff}] - \alpha^2 \frac{d\vec{M}}{dt} \end{aligned} \quad (2.28)$$

onde o termo com α^2 foi obtido utilizando a equação 2.27 e a identidade vetorial:

$$\vec{a} \times [\vec{b} \times \vec{c}] = [\vec{a} \cdot \vec{c}] \vec{b} - [\vec{a} \cdot \vec{b}] \vec{c}. \quad (2.29)$$

Ao se organizar os termos, obtem-se a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG):

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma' [\vec{M} \times \vec{H}_{eff}] - \frac{\alpha'}{M_S} \vec{M} \times [\vec{M} \times \vec{H}_{eff}], \quad (2.30)$$

em que γ' e α' são:

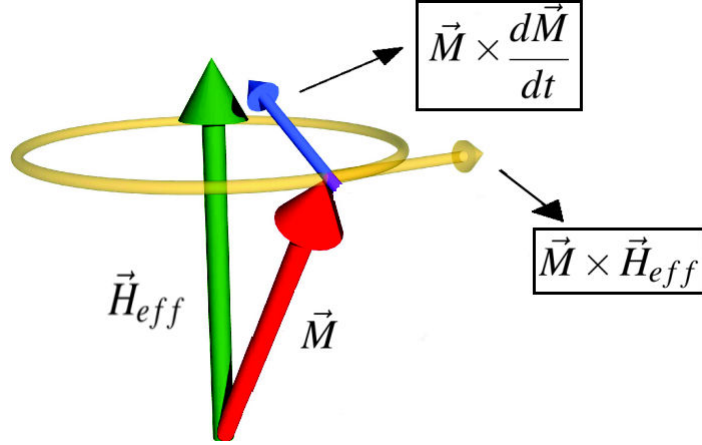
$$\gamma' = \frac{\gamma_0}{1 + \alpha^2} \quad (2.31)$$

e

$$\alpha' = \frac{\alpha\gamma_0}{1 + \alpha^2}. \quad (2.32)$$

Podemos analisar, de forma esquemática, a dinâmica da magnetização devido à presença do campo magnético efetivo, Figura 5.

Figura 5 – Dinâmica da magnetização em presença de um campo magnético efetivo. A Figura esquematiza o movimento de precessão amortecido do vetor magnetização em direção ao campo magnético efetivo $\vec{H}_{eff}$ de acordo com a equação de Gilbert do movimento.



Fonte: Produzido pelo autor.

A principal vantagem da forma da equação LLG, é que não contém dependência implícita da taxa de variação da magnetização, $\frac{d\vec{M}}{dt}$, e pode ser utilizada para cálculos por simulação numérica para dinâmica da magnetização. Abaixo discorreremos sobre o campo efetivo $\vec{H}_{eff}$.

2.3.2 Campo efetivo

A energia total do sistema magnético com os termos de Troca (exchange), Magnetostático, Magnetocristalino e Zeeman é dada por:

$$E_{total} = \int_V (e_{exc} + e_{dem} + e_{Zee} + e_{an}) dV. \quad (2.33)$$

Esta energia depende da distribuição espacial da magnetização e consequentemente, a minimização da E_{total} possibilita uma configuração de equilíbrio [51, 52]. Esta minimização é obtida matematicamente através do método variacional, introduzido por Brown [53]:

$$\frac{\delta E_{total}}{\delta \vec{m}} = 0, \quad (2.34)$$

que é a derivada funcional da energia total com relação à magnetização. Isto leva à equação do torque [54]:

$$\vec{m} \times \vec{H}_{eff} = 0. \quad (2.35)$$

A configuração de equilíbrio da magnetização é alcançada quando a magnetização, $\vec{m}$, está alinhada com o campo efetivo, que é resultante das contribuições dos termos de troca, magnetostático, magnetocristalino e Zeeman:

$$\vec{H}_{eff} = \frac{2A}{\mu_0 M_S} \nabla^2 \vec{m} + \vec{H}_{dem} - \frac{1}{\mu_0 M_S} \frac{\delta E_{total}}{\delta \vec{m}} + \vec{H}_{ext}. \quad (2.36)$$

A densidade de energia magnética também é conhecida como energia livre micromagnética [55].

Tabela 1 – Dados para os parâmetros micromagnéticos de alguns materiais.

<i>Materiais</i>	$M_s(A/m)$	$A(J/m)$	$K_1(J/m^3)$	$l_{ex}(nm)$
Ni	490×10^3	9×10^{-12}	$-5,7 \times 10^3$	7,72
Fe	1710×10^3	$8,3 \times 10^{-12}$	50×10^3	1,5
Co	1400×10^3	30×10^{-12}	520×10^3	4,94

Fonte: Produzido por [55].

Na Tabela 1, temos os parâmetros antes mencionados à temperatura ambiente. Ao analisar, dimensionalmente, a expressão da densidade de energia, viu-se que há duas escalas de comprimento, a saber, o parâmetro de largura da parede:

$$\delta_0 = \sqrt{\frac{A}{K_{u1}}}, \quad (2.37)$$

e o comprimento de troca,

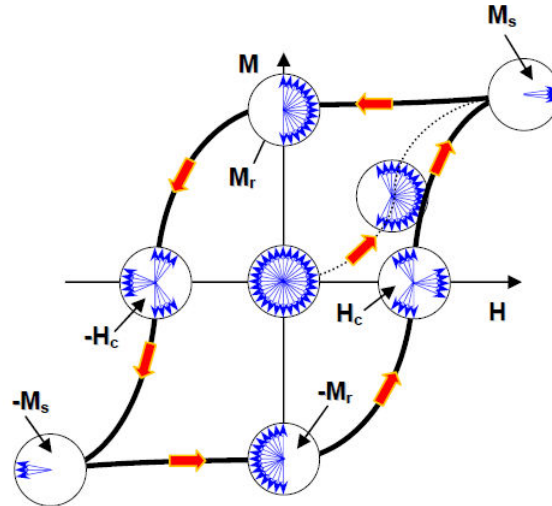
$$l_{ex} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}}. \quad (2.38)$$

A largura da parede determina a espessura mínima da parede de domínio que separa domínios magnéticos [56]. O comprimento de troca é o comprimento abaixo do qual as interações atômicas de troca dominam sobre campos magnetostáticos típicos [57]. A magnetização local, $\vec{M}(\vec{r})$, é determinada pela competição entre as interações de Troca (*exchange*), Magnetocristalina, Magnetostática e Zeeman. Estas contribuições energéticas estabelecem um complicado problema não linear, envolvendo mínimos múltiplos de energia magnética.

2.4 CURVA DE HISTERESE MAGNÉTICA

A curva de histerese completa (quando se leva o material até a magnetização de saturação (M_s) em ambos os sentidos do campo H) é uma espécie de resumo das propriedades magnéticas de um material ferromagnético ordenado, e é o que melhor caracteriza o material, Figura 6, [38, 47]. Quando um material ferromagnético é submetido a um ciclo de varredura de campo magnetizante H , ocorre um reordenamento da distribuição dos momentos magnéticos para minimizar a energia do sistema. Existem dois mecanismos relevantes que atuam para compensar o efeito do campo magnético externo: o movimento das paredes que separam os domínios e a rotação dos momentos. O primeiro, atua aumentando as regiões com as direções de magnetização mais alinhadas com o campo aplicado. Este processo acaba suprimindo as demais paredes de

Figura 6 – Ilustração da curva de histerese magnética. A Figura apresenta a Magnetização (M), a Magnetização de Saturação (M_s), a Magnetização remanente (M_r) e o Campo coercivo (H_c).



Fonte: Produzida por [47] e modificada pelo autor.

domínios. Quando este mecanismo não é mais possível, ocorre então, a rotação dos momentos magnéticos que tendem ao alinhamento com o campo magnético externo. Estes processos são dissipativos, resultando na curva de histerese magnética M versus H . A área interna do ciclo de histerese representa a energia para realizar um ciclo de histerese. Este é um, entre os vários métodos possíveis, para determinar o valor das perdas magnéticas. Na Figura 6 é mostrada uma curva típica de um material ferromagnético policristalino de alta permeabilidade, sendo que alguns parâmetros importantes podem ser obtidos desta curva, tais como o campo coercivo (H_c), a magnetização remanente (M_r), a magnetização de saturação (M_s) e a permeabilidade (B/H). Além disso, note que, inicialmente, a magnetização é nula a campo nulo. A curva interna (primeiro ramo) do primeiro quadrante é chamada de magnetização inicial, começando com uma inclinação que define a susceptibilidade inicial, χ_0 , e atingindo a magnetização de saturação M_s . A partir daí, observa-se a irreversibilidade da curva M versus H , com os demais ramos completando o "loop" de histerese. M_r é a magnetização remanente, ou simplesmente remanência, e H_c é o campo coercivo, ou coercividade. Estes parâmetros são utilizados para indicar que tipo de modo predomina na reversão, mas sabemos que não são suficientes. Sendo assim, na próxima seção, abordaremos os cálculos analíticos destes possíveis modos de reversão num nanotubo magnético isolado.

3 ESTUDO ANALÍTICO DOS MODOS DE REVERSÃO DA MAGNETIZAÇÃO PARA NANOTUBOS MAGNÉTICOS

Mesmo que o objetivo deste trabalho seja o estudo de arranjos hexagonais de nanotubos, é importante estudar as soluções para um único nanotubo. Com a finalidade de entender as soluções de mínima energia para um único nanotubo ferromagnético, realizamos estes cálculos para analisar cada modo de reversão da magnetização, podendo obter as energias envolvidas no processo como função de seus parâmetros geométricos. Assim, pode-se construir um diagrama de fase para os modos de reversão. Iniciamos este Capítulo citando as energias de Troca (exchange) e Magnetostática, as quais já foram explicadas no Capítulo anterior, pois, como veremos, os principais cálculos são baseados nestas contribuições:

1. Energia Magnetostática com origem em interação dipolar:

$$E_{dip} = \frac{\mu_0}{2} \int \vec{M}(\vec{r}) \cdot \nabla U(\vec{r}) dV, \quad (3.1)$$

onde o potencial magnetostático é dado por:

$$U(\vec{r}) = \frac{-1}{4\pi\mu} \int \frac{\nabla \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV' + \frac{1}{4\pi\mu} \int \frac{\hat{n} \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS', \quad (3.2)$$

e os termos do integrando podem ser interpretados de acordo com:

$$\begin{aligned} \rho_m(\vec{r}) &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{M}(\vec{r}) \\ \sigma_m(\vec{r}) &= \vec{M}(\vec{r}) \cdot \vec{n} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Na equação 3.3, temos as densidades superficial (σ_m) e volumétrica de carga magnética (ρ_m), respectivamente, além do vetor unitário normal à superfície (S), $\hat{n}$.

2. Energia de Troca (exchange): Fisicamente a energia de troca tende a alinhar os momentos magnéticos, permitindo que os átomos de uma certa distância permaneçam paralelos, se $A > 0$. A configuração de mínima energia se obtém quando a magnetização é uniforme e não varia dentro do material, com isso:

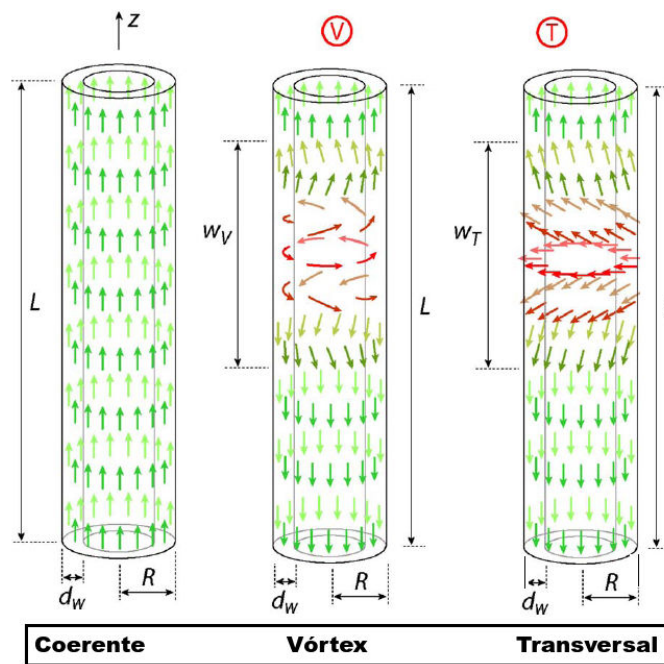
$$E_{exc} = A \int [(\nabla m_x)^2 + (\nabla m_y)^2 + (\nabla m_z)^2] dV, \quad (3.4)$$

em que A é a constante de stiffness do material, proporcional à constante de troca entre os pares dos átomos magnéticos.

Para os cálculos apresentados neste Capítulo, é preciso fazer propostas para as configurações da magnetização no material, que neste estudo envolve nanotubos magnéticos de Ni. Uma nanoestrutura cilíndrica, cuja magnetização aponta para a direção $-z$, inverterá (ou reverterá) sua magnetização quando se aplicar um campo magnético externo na direção $+z$. Este processo

de reversão pode ocorrer através de diferentes mecanismos, envolvendo parâmetros geométricos, como raios interno e externo, comprimento, além do ângulo de aplicação do campo magnético. Várias pesquisas acerca de nanofios [58–61] e nanotubos [62, 63] descrevem três modos de reversão da magnetização, definidos como: Rotação coerente, vórtex e transversal. Estes modos de reversão podem ser vistos nos esquemas da Figura 7.

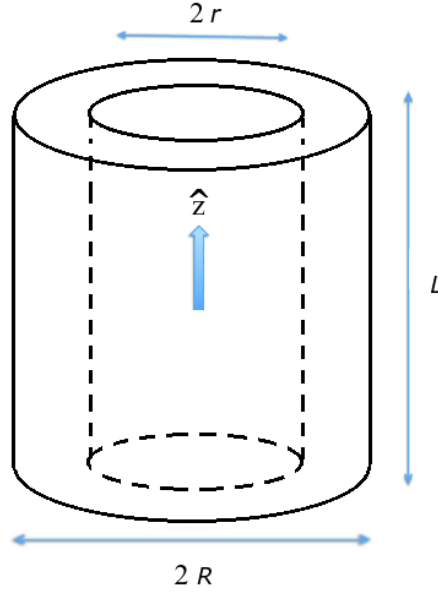
Figura 7 – Esquema dos modos de reversão da magnetização em nanoestruturas cilíndricas: (esquerda) rotação coerente, (centro) parede de domínio do tipo vórtex e (direita) parede de domínio do tipo transversal, para o campo externo paralelo ao eixo do nanotubo.



Fonte: Produzido por [64].

Através da teoria semiclássica do ferromagnetismo [40] é possível encontrar a energia total correspondente a cada modo de reversão da magnetização. Para obter a energia total correspondente a cada modo de reversão coerente, vórtex ou transversal, considera-se a contribuição de cada energia envolvida no sistema, Energia de Troca (E_{exc}), Energia Magnetostática (E_{dip}), Energia Magnetocristalina uniaxial e cúbica (E_U/E_C) e Energia Zeeman (E_Z).

Figura 8 – Descrição dos parâmetros geométricos de uma nanoestrutura cilíndrica; r é o raio interno do tubo, R o raio externo, L o comprimento do cilindro e $\beta = r / R$, um parâmetro adimensional.



Fonte: Produzido pelo autor.

Consideramos como base inicial destes cálculos o artigo de Landeros et al.[63], que descreve a magnetização e avalia a energia total para cada um dos modos de reversão descritos. Para os cálculos analíticos, definimos parâmetros geométricos, úteis para calcular as energias. Na Figura 8, mostramos estes parâmetros numa estrutura tubular de comprimento L e $2r$ diâmetro interno e externo $2R$.

3.1 MODO DE REVERSÃO COERENTE

Seja a magnetização normalizada, $\vec{m} = \frac{\vec{M}_i}{M_S}$, de um nanotubo para o modo de reversão coerente:

$$\vec{m} = m_x \hat{x} + m_y \hat{y} + m_z \hat{z}. \quad (3.5)$$

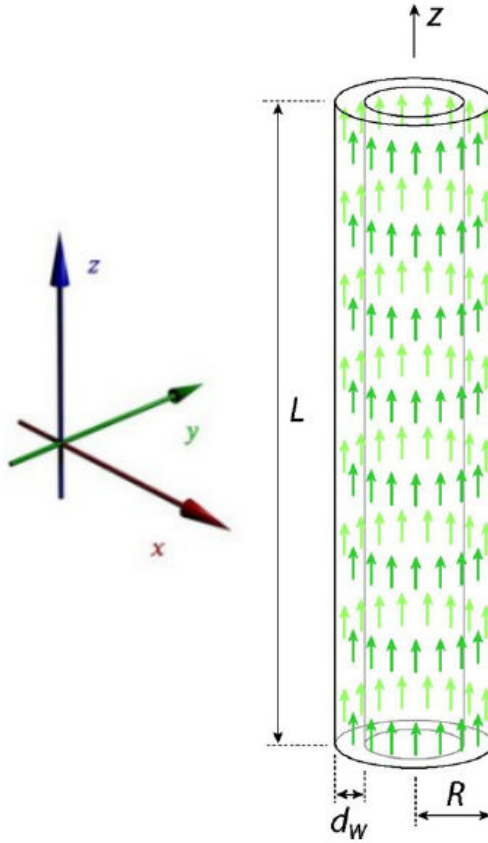
Na Figura 9 mostramos esquematicamente um nanotubo com modo de reversão coerente, na qual todos os momentos são paralelos. Considerando que a rotação coerente ocorre no plano XZ , a magnetização é dada por:

$$m_x^C = \sin(\Theta(z)), \quad (3.6)$$

$$m_z^C = \cos(\Theta(z)). \quad (3.7)$$

Nas equações 3.6 e 3.7, Θ é um funcional, que possui dependência com a coordenada z e é definido de acordo com a equação 3.8:

Figura 9 – Representação esquemática de um nanotubo, os momentos magnéticos na configuração de modo de reversão coerente (L é o comprimento do nanotubo, d_w é a espessura da parede e R o raio externo).



Fonte: Produzido por [64]

$$\Theta(z) = \pi \left(\frac{z - z_w}{w} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.8)$$

Desta forma, a energia de troca é sempre constante, já que os momentos são paralelos, equação (3.4). Para o cálculo da energia dipolar (3.1), temos que o termo do campo dipolar ($\vec{H}_{dip}$) é descrito como:

$$\vec{H}_{dip} = N \frac{\vec{I}}{\mu_0} = \frac{N}{\mu_0} (\mu_0 \vec{m}) = N \vec{m}, \quad (3.9)$$

onde N é o fator desmagnetizante, que depende da forma da amostra. A densidade de energia desmagnetizante é,

$$\vec{H}_{dip} \cdot \vec{M} = M_0 [N_x m_x^2 + N_y m_y^2 + N_z m_z^2]. \quad (3.10)$$

Da equação (3.1), pode-se encontrar a energia dipolar, da seguinte forma:

$$E_{dip} = \frac{\mu_0}{2} \int \vec{H}_{dip} \cdot \vec{M} dV, \quad (3.11)$$

onde,

$$\nabla U(\vec{r}) = \vec{H}_{dip}. \quad (3.12)$$

Então:

$$E_{dip} = \frac{\mu_0}{2} \int M_0 [N_x m_x^2 + N_y m_y^2 + N_z m_z^2] dV, \quad (3.13)$$

organizando os termos,

$$E_{dip} = \frac{\mu_0}{2} M_0 [N_x m_x^2 + N_y m_y^2 + N_z m_z^2] \int dV. \quad (3.14)$$

Resolvendo a integral em todo o volume, temos:

$$\int dV = \pi(R^2 - r^2)L = \pi R^2(1 - \beta^2)L. \quad (3.15)$$

Substituindo a integral na equação 3.14:

$$E_{dip} = \frac{\mu_0 \pi R^2 (1 - \beta^2) L}{2} M_0 [N_x m_x^2 + N_y m_y^2 + N_z m_z^2]. \quad (3.16)$$

As componentes da diagonal do tensor desmagnetizante seguem a condição:

$$N_x + N_y + N_z = 1. \quad (3.17)$$

Tendo simetria no plano XY , temos que:

$$N_x = N_y \Rightarrow 2N_x + N_z = 1 \Rightarrow N_x = \frac{1 - N_z}{2}, \quad (3.18)$$

e lembrando que $m_y = 0$ e utilizando as equações (3.6) e (3.7), encontramos para a equação 3.16 que:

$$E_{dip} = \frac{\mu_0 \pi M_0 R^2 (1 - \beta^2) L}{2} \left[\frac{1 - N_z}{2} \sin^2(\Theta) + N_z \cos^2(\Theta) \right], \quad (3.19)$$

$$E_{dip} = \frac{\mu_0 \pi M_0 R^2 (1 - \beta^2) L}{4} [(1 - N_z) \sin^2(\Theta) + 2N_z \cos^2(\Theta)], \quad (3.20)$$

$$E_{dip} = \frac{\mu_0 \pi M_0 R^2 (1 - \beta^2) L}{4} [\sin^2(\Theta) - N_z(1 - \cos^2(\Theta)) + 2N_z \cos^2(\Theta)]. \quad (3.21)$$

Sendo assim, a energia dipolar para o modo de reversão coerente para um tubo cilíndrico é dada por:

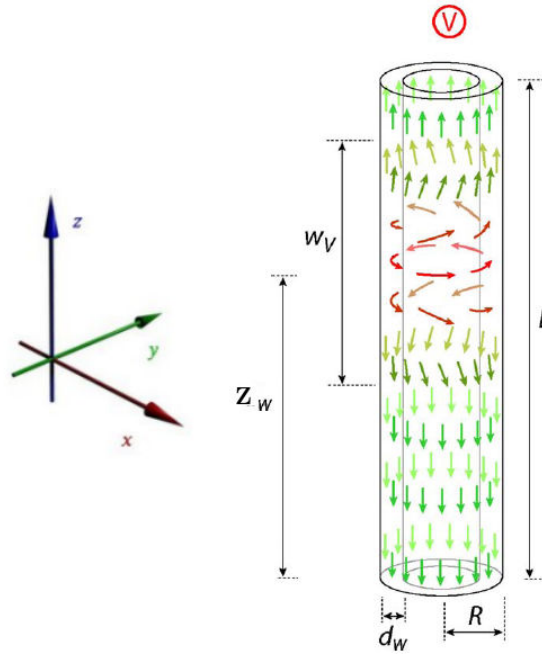
$$E_{dip}^C = \frac{\mu_0 \pi M_0 R^2 (1 - \beta^2) L}{4} [\sin^2(\Theta) + N_z(3 \cos^2(\Theta) - 1)]. \quad (3.22)$$

Este termo energético é de fundamental importância, pois o modo Coerente é sempre referência para estudos comparativos.

3.2 MODO DE REVERSÃO VÓRTEX

No caso em que ocorre a reversão da magnetização através da propagação de uma parede do tipo vórtex, o processo será caracterizado por dois parâmetros. O primeiro é a posição do centro da parede de domínio (z_w), onde a magnetização está orientada sobre o plano XY , descrevendo um vórtex perfeito, e o segundo é a largura da parede de domínio (w_V).

Figura 10 – Representação esquemática do nanotubo, os momentos magnéticos e o modo de reversão do tipo vórtex, em que a largura da parede de domínio é representada por w_V e a posição do centro da parede de domínio por z_w .



Fonte: [64]

A magnetização neste caso é descrita por:

$$\begin{cases} \hat{z}, & 0 \leq z \leq z_w - \frac{w}{2} \\ m_\phi(z)\hat{\phi} + m_z(z)\hat{z}, & z_w - \frac{w}{2} \leq z \leq z_w + \frac{w}{2} \\ -\hat{z}, & z_w + \frac{w}{2} \leq z \leq L \end{cases} \quad (3.23)$$

Utilizando a representação da magnetização descrita em (3.23), podemos calcular as energias envolvidas neste processo. Inicialmente, começando pela energia de troca E_{exc} :

$$E_{exc}^V = A \int (\nabla \cdot \vec{m})^2 dV, \quad (3.24)$$

que neste caso, é a equação da energia de troca para o modo vórtex de um tubo magnético isolado. Lembrando que em coordenadas cilíndricas:

$$\begin{cases} \hat{x} = \hat{\rho} \cos(\phi) - \hat{\phi} \sin(\phi) \\ \hat{y} = \hat{\rho} \sin(\phi) + \hat{\phi} \cos(\phi) \\ \hat{z} = \hat{z} \end{cases} \quad (3.25)$$

Podemos expressar o divergente de uma função vetorial $\vec{F}$ em coordenadas cilíndricas como:

$$\nabla \cdot \vec{F} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho}(\rho F_\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi}(F_\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(F_z), \quad (3.26)$$

e tomando o divergente da magnetização nestas coordenadas, teremos:

$$\nabla \cdot \vec{m} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho}(\rho m_\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi}(m_\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(m_z). \quad (3.27)$$

Representando $\vec{m} = m_\phi(z)\hat{\phi} + m_z(z)\hat{z}$, no intervalo $z_w - \frac{w}{2} \leq z \leq z_w + \frac{w}{2}$, teremos:

$$\nabla \cdot \vec{m} = \frac{-m_\phi}{\rho}(\sin(\phi) + \cos(\phi)) - \frac{\pi}{w} \sin \left[\pi \left(\frac{z - z_w}{w} + \frac{1}{2} \right) \right], \quad (3.28)$$

ou seja:

$$(\nabla \cdot \vec{m})^2 = \frac{m_\phi^2}{\rho^2}(1 + \sin(2\phi)) + \frac{\pi^2}{w^2} \sin^2 \left[\pi \left(\frac{z - z_w}{w} + \frac{1}{2} \right) \right], \quad (3.29)$$

então, a energia de troca para o modo vórtex é dada por:

$$E_{ex}^V = A \int_{\beta R}^R \int_0^{2\pi} \int_{z_w - \frac{w}{2}}^{z_w + \frac{w}{2}} \left\{ \frac{m_\phi^2}{\rho^2}(1 + \sin(2\phi)) + \frac{\pi^2}{w^2} \sin^2 \left[\pi \left(\frac{z - z_w}{w} + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} \rho d\rho d\phi dz, \quad (3.30)$$

lembrando que

$$m_\phi^2 = 1 - m_z^2. \quad (3.31)$$

Resolvendo as integrais da equação (3.30), separadamente, chegamos a uma expressão para a energia de troca:

$$E_{ex}^V = A \left\{ \pi w \ln \left(\frac{1}{\beta} \right) + \frac{\pi^3 R^2}{2w^2} (1 - \beta^2) \right\}. \quad (3.32)$$

Os cálculos referentes à energia dipolar (magnetostática, E_{dip}^V) para a reversão da magnetização no modo vórtex, são feitos considerando as equações (3.1) e (3.2), além disso, vamos organizá-los utilizando $U = U_S + U_v$, onde U_S representa o potencial superficial e U_v , o potencial volumétrico. Para o cálculo da energia dipolar, é utilizada a equação:

$$E_{dip}^V = \int_V \left\{ M_\rho(z) \frac{\partial U}{\partial \rho} + M_z(z) \frac{\partial U}{\partial z} \right\} dV, \quad (3.33)$$

sabendo-se que:

$$\begin{cases} U_S = \hat{n} \cdot \vec{M} \\ U_v = \nabla \cdot \vec{M} \end{cases}. \quad (3.34)$$

Para o potencial associado à energia superficial, temos:

$$U_S = \frac{1}{4\pi} \int dz' d\phi' \left\{ \frac{RM_\rho(z')}{|\vec{r} - \vec{r}'|_{\rho'=R}} - \frac{\beta RM_\rho(z')}{|\vec{r} - \vec{r}'|_{\rho'=\beta R}} \right\} + \frac{1}{4\pi} \int \rho' d\rho' d\phi' \left\{ \frac{M_z(L)}{|\vec{r} - \vec{r}'|_{z'=L}} - \frac{M_z(0)}{|\vec{r} - \vec{r}'|_{z'=0}} \right\}, \quad (3.35)$$

em que podemos representar as componentes da magnetização $\vec{M}$ como:

$$\begin{cases} M_\rho(z) = M \sin(p) \sin[\Theta(z)] \\ M_\phi(z) = M \cos(p) \sin[\Theta(z)], \\ M_z(z) = M \cos[\Theta(z)] \end{cases} \quad (3.36)$$

p é a medida da componente fora do plano xy (componente radial da magnetização). Levando em consideração um cilindro muito longo ($L \rightarrow \infty$), obtem-se uma casca cilíndrica. Utilizando apenas os dois primeiros termos da expressão de U_S e utilizando a função de Green em coordenadas cilíndricas:

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp[il(\phi - \phi')] \int_0^{\infty} \{J_l(K\rho)J_l(K\rho') \exp(-k|z - z'|)\} dk, \quad (3.37)$$

em que $J_l(K\rho)$ são funções de Bessel [65]. Substituindo a equação 3.37 na 3.35, teremos:

$$\begin{aligned} U_S = & \frac{1}{4\pi} \int_0^{\infty} dk \int dz' R M_\rho(z') \int_0^{2\pi} d\phi' \sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp[il(\phi - \phi')] J_l(K\rho) J_l(K\rho') \exp(-k|z - z'|) |_{\rho'=R} \\ & - \frac{1}{4\pi} \int_0^{\infty} dk \int dz' M_\rho(z') \int_0^{2\pi} d\phi' \sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp[il(\phi - \phi')] R \beta J_l(K\rho) J_l(K\rho') \exp(-k|z - z'|) |_{\rho'=\beta R} \end{aligned} \quad (3.38)$$

,

$$U_S = \frac{R}{2} \int_0^{\infty} dk \left\{ \int dz' M_\rho(z') [\exp(-k|z - z'|) (J_0(K\rho)J_0(KR) - \beta J_0(K\rho)J_0(K\beta R))] \right\}. \quad (3.39)$$

Organizando os termos,

$$U_S = \frac{R}{2} \int_0^{\infty} dk J_0(K\rho) \left\{ \int dz' M_\rho(z') [\exp(-k|z - z'|) (J_0(KR) - \beta J_0(K\beta R))] \right\}. \quad (3.40)$$

Podemos aqui definir uma função f_0 tal que:

$$f_0(k) = J_0(kR) - \beta J_0(k\beta R), \quad (3.41)$$

com isso

$$U_S = \frac{R}{2} \int_0^{\infty} dk J_0(K\rho) f_0(k) \int dz' M_\rho(z') \exp(-k|z - z'|). \quad (3.42)$$

O potencial possui simetria axial, ou seja, $U_S = U_S(\rho, z)$ e portanto:

$$\frac{\partial U_S}{\partial \phi} = 0. \quad (3.43)$$

Podemos encontrar a energia dipolar, com a contribuição superficial, substituindo a equação (3.43) na (3.33). E calculando as integrais radial e angular, teremos:

$$E_{dip} = \frac{\mu_0 R \pi}{2} \int_0^\infty dk f_0(k) \left\{ \int_{\beta R}^R \rho d\rho \frac{\partial J_0(K\rho)}{\partial \rho} \int dz M_\rho(z) \int dz' M_\rho(z') \exp(-k|z - z'|) \right\} +$$

$$+ \left\{ \int_{\beta R}^R J_0(k\rho) \rho d\rho \int dz M_z(z) \frac{\partial}{\partial z} \left(\int dz' M_\rho(z') \exp(-k|z - z'|) \right) \right\} .$$
(3.44)

Observemos que uma das propriedades da função de Bessel é:

$$\frac{\partial J_0(k\rho)}{\partial \rho} = (-1)kJ_1(k\rho). \quad (3.45)$$

Dessa forma:

$$E_{dip} = \frac{\mu_0 R \pi}{2} \int_0^\infty dk f_0(k) \left\{ \int_{\beta R}^R \rho d\rho (-1)kJ_1(k\rho) \int dz M_\rho(z) \int dz' M_\rho(z') \exp(-k|z - z'|) \right\} +$$

$$+ \left\{ \int_{\beta R}^R J_0(k\rho) \rho d\rho \int dz M_z(z) \frac{\partial}{\partial z} \left(\int dz' M_\rho(z') \exp(-k|z - z'|) \right) \right\} .$$
(3.46)

Podemos usar ainda as relações:

$$G_n(k) = \int_{\beta R}^R J_n(k\rho) \rho d\rho \quad (3.47)$$

$$\Lambda_1(k) = \int dz M_\rho(z) \int dz' M_\rho(z') \exp(-k|z - z'|) \quad (3.48)$$

$$\Lambda_2(k) = \int dz M_z(z) \frac{\partial}{\partial z} \left(\int dz' M_\rho(z') \exp(-k|z - z'|) \right). \quad (3.49)$$

e

$$E_{dip} = \frac{\mu_0 R \pi}{2} \int_0^\infty dk f_0(k) \{ G_0(k) \Lambda_2(k) - k G_1(k) \Lambda_1(k) \}. \quad (3.50)$$

A função $G_1(k)$ pode ser escrita em termos de **funções hipergeométricas**. As funções $\Lambda_1(k)$ e $\Lambda_2(k)$, nas equações (3.48) e (3.49), dependem do campo de magnetização. Nos próximos cálculos, utiliza-se a representação explícita para o campo de magnetização usando no *ansatz* variacional. Logo, calculando as integrais explicitamente, obtem-se:

$$\Lambda_1(k) = M^2 \sin^2(p) Q(k), \quad (3.51)$$

$$\Lambda_2(k) = M^2 \sin^2(p) \left(\frac{\pi}{w} \right) [Q(k) - K(k)]. \quad (3.52)$$

Sendo:

$$Q(k) = \frac{kw^3}{\pi^2 + k^2w^2} + \frac{2\pi^2w^2(1 + \exp(-kw))}{(\pi^2 + k^2w^2)^2}, \quad (3.53)$$

$$K(k) = \exp\left(\frac{-kL}{2}\right) \cdot \frac{4w^2 \cosh\left(\frac{kw}{2}\right)}{\pi^2 + k^2w^2} \cdot \cosh(kz_w). \quad (3.54)$$

Substituindo as expressões (3.51), (3.52), (3.53) e (3.54) na (3.50), obtemos a energia dipolar superficial:

$$E_S^{dip} = \frac{\mu_0 R \pi M^2}{2} \int_0^\infty \left\{ \sin\left(\frac{\pi R}{kw}\right) f_1(k) [Q(k) - K(k)] - \sin^2(p) k G_1(k) Q(k) \right\} f_0(k) dk. \quad (3.55)$$

Para a contribuição volumétrica, temos que considerar as relações do divergente de uma função (3.26) e as expressões para as componentes da magnetização (3.36). Logo, aplicando o divergente no vetor magnetização $\vec{M}$, temos:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{M} &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho M_\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} (M_\phi) + \frac{\partial}{\partial z} (M_z) \\ &= \frac{M_\rho}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial \rho} + \frac{\partial M_z}{\partial z} \\ &= \frac{M_\rho}{\rho} + \frac{\partial M_z}{\partial z} \\ &= \frac{M}{\rho} \sin(p) \sin[\Theta(z)] + \frac{\partial [M \cos[\Theta(z)]]}{\partial z}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Assim, o divergente da magnetização é:

$$\nabla \cdot \vec{M} = M \sin[\Theta(z)] \left\{ \frac{\sin(p)}{\rho} - \frac{d\theta(z)}{dz} \right\}. \quad (3.57)$$

Lembrando que o funcional $\Theta(z)$ é expressa como:

$$\Theta(z) = \pi \left[\frac{z - z_w}{w} + \frac{1}{2} \right], \quad (3.58)$$

e sua derivada com relação a z é,

$$\frac{d\Theta(z)}{dz} = \frac{\pi}{w}. \quad (3.59)$$

Substituindo a equação (3.59) na (3.57), teremos:

$$\nabla \cdot \vec{M} = M \sin[\Theta(z)] \left\{ \frac{\sin(p)}{\rho} - \frac{\pi}{w} \right\}. \quad (3.60)$$

Esta "carga" magnética volumétrica está localizada na região da parede de domínio, onde $M_\rho \neq 0$ e M_z muda de M a $-M$, e usando a expansão da função de Green em coordenadas cilíndricas, (3.37), no potencial magnético da equação 3.2, teremos:

$$U(\vec{r}) = \frac{-1}{4\pi} \int \frac{\nabla \cdot \vec{M}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV'. \quad (3.61)$$

Assim:

$$U_v = \frac{-1}{4\pi} \int \left\{ \sum_{l=-\infty}^{\infty} \exp[il(\phi - \phi')] \int_0^{\infty} M \cdot \sin[\Theta(z)] \left\{ \frac{\sin(p)}{\rho} - \frac{\pi}{w} \right\} J_l(k\rho) J_l(k\rho') \exp(-k|z - z'|) \right\} dV'. \quad (3.62)$$

O elemento infinitesimal do volume em coordenadas cilíndricas é:

$$dV' = \rho d\rho' d\phi' dz'. \quad (3.63)$$

Resolvendo as integrais em ρ' e ϕ' e definindo:

$$B(k) = \int_{\beta R}^R J_0(k\rho') d\rho', \quad (3.64)$$

fazendo $l = 0$ no somatório, teremos a expressão para o potencial volumétrico:

$$U_v = \frac{-M}{2} \int_0^{\infty} dk \left\{ B(k) \sin(p) - \frac{\pi}{w} G_0(k) \right\} J_0(k\rho) \int dz' \sin[\Theta(z')] \exp(-k|z - z'|). \quad (3.65)$$

E que,

$$G_n(k) = \int_{\beta R}^R J_n(k\rho') \rho' d\rho'. \quad (3.66)$$

É observado que o potencial possui simetria axial, $U_v = U_S(\rho, z)$, como consequência $\frac{\partial U_v}{\partial \phi} = 0$. Substituindo U_v na expressão da energia (3.33), e calculando as integrais:

$$\begin{aligned} E_v^{dip} = & \frac{-\mu_0 M}{4} \int_{\beta R}^R \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^L dz \times \\ & \times \left\{ M_\rho(z) \frac{\partial}{\partial \rho} \left[\int_0^{\infty} dk \left(B(k) \sin(p) - \frac{\pi G_0(k)}{w} \right) J_0(k\rho) \int dz' \sin \Theta(z') \exp(-k|z - z'|) \right] \right\} \\ & - \frac{\mu_0 M}{4} \int_{\beta R}^R \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^L dz \times \\ & \times M_z(z) \frac{\partial}{\partial z} \left[\int_0^{\infty} dk \left(B(k) \sin(p) - \frac{\pi G_0(k)}{w} \right) J_0(k\rho) \int dz' \sin \Theta(z') \exp(-k|z - z'|) \right]. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Organizando os termos na equação (3.67), teremos:

$$\begin{aligned}
 E_v^{dip} = & \frac{-\mu_0 M \pi}{2} \int_0^L dz M_\rho(z) \int_0^\infty dk \left[B(k) \sin(p) - \frac{\pi}{w} G_0(k) \right] \int dz' \sin \Theta(z') \exp(-k|z - z'|) \times \\
 & \times \int_{\beta R}^R \rho d\rho \frac{\partial J_0(k\rho)}{\partial \rho} - \frac{\mu_0 M \pi}{2} \int_0^L dz M_z(z) \int_0^\infty dk \left[B(k) \sin(p) - \frac{\pi}{w} G_0(k) \right] \int_{\beta R}^R J_0(k\rho) \rho d\rho \times \\
 & \times \frac{\partial}{\partial z} \left[\int dz' \sin \Theta(z') \exp(-k|z - z'|) \right].
 \end{aligned} \tag{3.68}$$

e utilizando $\Lambda_1(k)$ e $\Lambda_2(k)$, (3.51) e (3.52) a energia dipolar será dada por:

$$E_v^{dip} = \frac{\mu_0 \pi}{2} \int_0^\infty dk \left[B(k) \cdot \sin(p) - \frac{\pi}{w \sin(p)} G_0(k) \right] \{ \Lambda_1(k) k G_1(k) - \Lambda_2(k) G_0(k) \}. \tag{3.69}$$

Com isso, a contribuição volumétrica final para a energia dipolar, reduzindo-se a:

$$\begin{aligned}
 E_v^{dip} = & \frac{\mu_0 \pi M^2}{2} \int_0^\infty dk \left\{ \frac{\pi^2}{w^2} \cdot G_0^2[kQ(k) - K(k)] \right\} - \\
 & - \frac{\mu_0 \pi M^2}{2} \int_0^\infty dk \frac{\pi G_0(k)}{w} \times \{ B(k) \cdot [Q(k) - K(k)] + k \cdot G_1(k) \cdot Q(k) \} \cdot \sin(p) + \\
 & + \frac{\mu_0 \pi M^2}{2} \int_0^\infty dk B(k) \cdot k \cdot G_1(k) Q(k) \sin^2(p).
 \end{aligned} \tag{3.70}$$

Assim, a expressão para a energia dipolar total no modo vórtex, pode ser dada por:

$$E_{dip}^V = \pi \cdot \mu_0 \cdot M^2 \cdot R^2 \cdot \int_0^\infty \frac{dk}{k^2} [J_1(kR) - \beta J_1(\beta kR)] (f_S + f_v), \tag{3.71}$$

em que $f_S = f_S(w, z_w)$ e $f_v = f_v(w, z_w)$, são expressões relacionadas aos termos superficial e volumétrico, definidos por:

$$f_S = 1 + \exp(-kL) - \frac{\exp[-k(L - z_w)] + \exp(-kz_w)}{1 + \frac{k^2 w^2}{\pi^2}} \cosh\left(\frac{k w}{2}\right), \tag{3.72}$$

e,

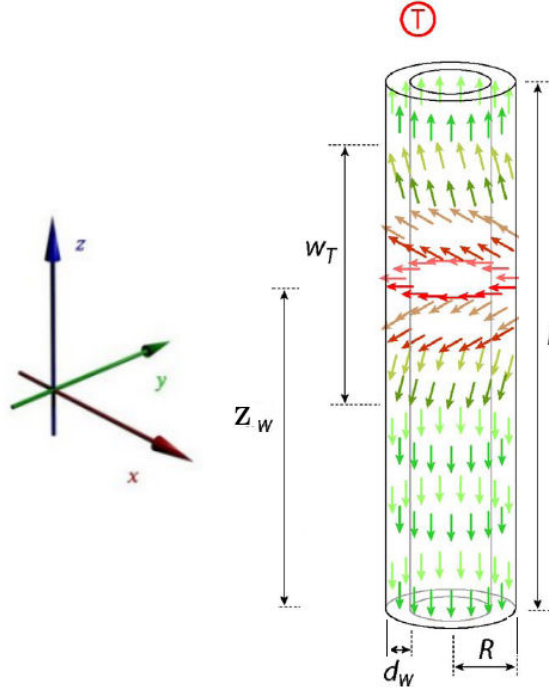
$$f_v = \frac{\frac{k w}{2} - [\exp[-k(L - z_w)] + \exp(-kz_w)] \cosh\left(\frac{k w}{2}\right)}{1 + \frac{k^2 w^2}{\pi^2}} + \frac{1 + \exp(-k w)}{\left(1 + \frac{k^2 w^2}{\pi^2}\right)^2}. \tag{3.73}$$

No decorrer das explicações, iremos verificar outras contribuições energéticas para o modo de reversão do tipo coerente e vórtex. Na próxima seção, abordaremos o modo de reversão da magnetização do tipo transversal.

3.3 MODO DE REVERSÃO TRANSVERSAL

A diferença do caso anterior para a parede de domínio do tipo transversal, é que se deve considerar uma componente da magnetização total no eixo x , m_x . A esquematização para o nanotubo apresenta o modo de reversão do tipo transversal, que se encontra na Figura 11.

Figura 11 – Representação esquemática do nanotubo, os momentos magnéticos e o modo de reversão transversal.



Fonte: Produzido por [64].

A magnetização da parede de domínio Transversal, $\vec{m}^T(z)$, pode ser definida de acordo com:

$$\begin{cases} \hat{z}, & 0 \leq z \leq z_w - \frac{w}{2} \\ m_x(z)\hat{x} + m_z(z)\hat{z}, & z_w - \frac{w}{2} \leq z \leq z_w + \frac{w}{2}, \\ -\hat{z}, & z_w + \frac{w}{2} \leq z \leq L \end{cases} \quad (3.74)$$

em que w_T é a largura da parede transversal e $m_z(z) = \cos[\Theta(z)]$, igualmente ao modo vórtex. Neste caso, é conveniente escrever a magnetização em coordenadas cilíndricas:

$$\begin{cases} \hat{x} = \hat{\rho}\cos(\phi) - \hat{\phi}\sin(\phi) \\ \hat{y} = \hat{\rho}\sin(\phi) + \hat{\phi}\cos(\phi) \\ \hat{z} = \hat{z} \end{cases} \quad (3.75)$$

de forma que a magnetização dentro da parede de domínio seja representada:

$$\vec{m} = \hat{\rho}(m_x(z)\cos(\phi)) - \hat{\phi}(m_x(z)\sin(\phi)) + \hat{z}m_z(z). \quad (3.76)$$

Calculando a energia de troca, temos que tomar o divergente em coordenadas cilíndricas.

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{m} &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho m_\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} (m_\phi) + \frac{\partial}{\partial z} (m_z) \\ &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho m_x \cos(\phi)) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} (-m_x \sin(\phi)) + \frac{\partial}{\partial z} (m_z). \\ &= \frac{1}{\rho} (\rho m_x \cos(\phi)) - m_x \cos(\phi) + \frac{\partial (m_z)}{\partial z}\end{aligned}\quad (3.77)$$

Assim, teremos:

$$\nabla \cdot \vec{m} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \cos \left[\pi \left(\frac{z - z_w}{w} + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} \quad (3.78)$$

$$= -\frac{\pi}{w} \sin \Theta(z). \quad (3.79)$$

Por conseguinte,

$$(\nabla \cdot \vec{m})^2 = \frac{\pi^2}{w^2} \sin^2 \Theta(z). \quad (3.80)$$

A energia de troca:

$$E_{exc}^T = A \int_0^{2\pi} \int_{\beta R}^R \int_{z_w - \frac{w}{2}}^{z_w + \frac{w}{2}} \frac{\pi^2}{w^2} \sin^2 \Theta(z) \rho d\rho d\phi dz \quad (3.81)$$

$$E_{exc}^T = A \frac{\pi^2}{w^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\beta R}^R \rho d\rho \int_{z_w - \frac{w}{2}}^{z_w + \frac{w}{2}} \sin^2 \Theta(z) dz. \quad (3.82)$$

Calculando a integral em z , temos:

$$\int_{z_w - \frac{w}{2}}^{z_w + \frac{w}{2}} \sin^2 \Theta(z) dz = \frac{w}{2}. \quad (3.83)$$

Desta forma, a expressão para a energia de troca é:

$$E_{exc}^T = \frac{A\pi^3 R^2}{2w} (1 - \beta^2). \quad (3.84)$$

O cálculo para a contribuição da energia dipolar para o modo transversal é idêntico ao realizado anteriormente para o modo vórtex. A equação resultante será:

$$E_{dip}^T = \pi\mu_0 M^2 R^2 \int_0^\infty \frac{dk}{k^2} [J_1(kR) - \beta J_1(\beta kR)] (g_S + g_V), \quad (3.85)$$

com:

$$\begin{aligned}g_S(w, z_w) &= \frac{\frac{k^2 w^2}{2\pi^2}}{1 + \frac{k^2 w^2}{\pi^2}} \left\{ \frac{kw}{2} + \frac{1 + \exp(-kw)}{1 + \frac{k^2 w^2}{\pi^2}} \right\} + f_S. \\ g_V(w, z_w) &= f_V(w, z_w)\end{aligned}\quad (3.86)$$

A contribuição dipolar volumétrica das paredes dos modos Vórtex e Transversal, são descritas pela mesma expressão, mas não necessariamente terão o mesmo valor, devido às diferentes localizações das paredes de cada modo. Na próxima seção, abordaremos outras contribuições; energia de anisotropia magnetocristalina e energia Zeeman, para cada modo de reversão.

3.4 CÁLCULO DA ENERGIA MAGNETOCRISTALINA

Os cálculos da energia de anisotropia magnetocristalina são feitos para duas simetrias, a cúbica e a uniaxial. A expressão para energia magnetocristalina cúbica até segunda ordem é:

$$E_{anis.c} = K_c \int_V \{m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2\} dV, \quad (3.87)$$

e a expressão para energia magnetocristalina uniaxial é:

$$E_{anis.u} = K_u \int_V m_z^2 dV, \quad (3.88)$$

onde, K_c e K_u são as constantes de anisotropia cúbica e uniaxial, respectivamente. Vamos obter as expressões para cada modo de reversão, iniciando com o modo Transversal, em que a energia é dada pela equação:

$$E_{anis.u}^T = -K_u \int_V m_z^2 dV. \quad (3.89)$$

Utilizando a magnetização para este modo de reversão, (3.74) e as relações das coordenadas cilíndricas, (3.75), representamos a integral volumétrica como:

$$E_{anis.u}^T = -K_u \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\beta R}^R \rho d\rho \int_{z_w - \frac{w}{2}}^{z_w + \frac{w}{2}} \cos^2 \Theta(z) dz \quad (3.90)$$

$$E_{anis.u}^T = -K_u 2\pi \left[\frac{R^2 - \beta^2 R^2}{2} \right] \int_{z_w - \frac{w}{2}}^{z_w + \frac{w}{2}} \cos^2 \left\{ \pi \left[\frac{z - z_w}{w} + \frac{1}{2} \right] \right\} dz, \quad (3.91)$$

em que a última integral resulta:

$$\int_{z_w - \frac{w}{2}}^{z_w + \frac{w}{2}} \cos^2 \left\{ \pi \left[\frac{z - z_w}{w} + \frac{1}{2} \right] \right\} dz = \frac{w}{2}. \quad (3.92)$$

A expressão para a anisotropia uniaxial para o modo Transversal é:

$$E_{anis.u}^T = -K_u \pi R^2 (1 - \beta^2) \frac{w}{2}. \quad (3.93)$$

No caso do modo Coerente, efetuamos o cálculo da energia magnetocristalina uniaxial utilizando a equação (3.5):

$$E_{anis.u}^C = -K_u \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\beta R}^R \rho d\rho \int_0^L \cos^2 \Theta(z) dz \quad (3.94)$$

$$E_{anis.u}^C = -K_u 2 \cdot \pi \left[\frac{R^2 - \beta^2 R^2}{2} \right] \int_0^L \cos^2 \left\{ \pi \left[\frac{z - z_w}{w} + \frac{1}{2} \right] \right\} dz. \quad (3.95)$$

Neste modo de reversão, o tamanho da parede de domínio, w , é igual ao comprimento do nanotubo, L . Utilizando a equação (3.92), teremos:

$$E_{anis.u}^C = -K_u 2\pi \left[\frac{R^2 - \beta^2 R^2}{2} \right] \frac{L}{2}. \quad (3.96)$$

Encontramos que a energia magnetocristalina uniaxial para o modo coerente é dada por:

$$E_{anis.u}^C = -K_u \frac{\pi L R^2}{2} [1 - \beta^2]. \quad (3.97)$$

Para obtenção da energia magnetocristalina cúbica, temos que utilizar sua magnetização, a qual é dada pela equação (3.23), substituindo os versores descritos na equação (3.98), no vetor magnetização, teremos a equação (3.99):

$$\begin{cases} \hat{\rho} = \hat{x} \cos(\phi) + \hat{y} \sin(\phi) \\ \hat{\phi} = -\hat{x} \sin(\phi) + \hat{y} \cos(\phi). \\ \hat{z} = \hat{z} \end{cases} \quad (3.98)$$

Dessa forma:

$$\vec{m} = -m_\phi(z) \sin(\phi) \hat{x} + m_\phi(z) \cos(\phi) \hat{y} + m_z(z) \hat{z}, \quad (3.99)$$

e os produtos entre cada componente da magnetização resultam em:

$$\begin{cases} m_x^2 m_y^2 = m_\phi^4 \sin^2(\phi) \cos^2(\phi) \\ m_y^2 m_z^2 = m_\phi^2 m_z^2 \cos^2(\phi). \\ m_z^2 m_x^2 = m_\phi^2 m_z^2 \sin^2(\phi) \end{cases} \quad (3.100)$$

Portanto a expressão para $m_\phi(z)$ é dada por:

$$m_\phi(z) = \sin \left\{ \pi \left(\frac{z - z_w}{w} + \frac{1}{2} \right) \right\}. \quad (3.101)$$

Do cálculo da energia magnetocristalina cúbica em coordenadas cilíndricas, teremos:

$$E_{anis.c}^V = K_c \int_{\beta R}^R \rho d\rho \int_{z_w - \frac{w}{2}}^{z_w + \frac{w}{2}} \int_0^{2\pi} \left\{ m_\phi^4 \sin^2(\phi) \cos^2(\phi) + m_\phi^2 m_z^2 [\sin^2(\phi) + \cos^2(\phi)] \right\} d\phi dz. \quad (3.102)$$

Substituindo as expressões para $m_\phi(z)$ e $m_z(z)$ na equação acima:

$$E_{anis.c}^V = K_c \frac{R^2 - \beta^2 R^2}{2} \left\{ \frac{1}{4} \int \int \sin^4(\Theta(z)) \sin^2(2\phi) dz d\phi + \int \int \sin^2(\Theta(z)) \cos^2(\Theta(z)) d\phi dz \right\}. \quad (3.103)$$

Os resultados para cada integral são dados por:

$$\frac{1}{4} \int_0^{2\pi} \sin^2(2\phi) d\phi \int_{z_w - \frac{w}{2}}^{z_w + \frac{w}{2}} \sin^4(\Theta(z)) dz = \frac{3w\pi}{32} \quad (3.104)$$

e

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{z_w - \frac{w}{2}}^{z_w + \frac{w}{2}} \sin^2(\Theta(z)) \cos^2(\Theta(z)) dz = \frac{w\pi}{4}. \quad (3.105)$$

Então:

$$E_{anis.c}^V = K_c R^2 \frac{(1 - \beta^2)}{2} \left\{ \frac{3w\pi}{32} + \frac{w\pi}{4} \right\}. \quad (3.106)$$

Organizando os termos na expressão da energia magnetocristalina cúbica, teremos:

$$E_{anis.c}^V = K_c R^2 w \pi (1 - \beta^2) \left\{ \frac{11}{64} \right\}. \quad (3.107)$$

Sendo assim, os termos cúbico e uniaxial podem ser incluídos na teoria micromagnética. Nos cálculos desta última seção, obtivemos as energias uniaxial e cúbica, as quais foram definidas para cada modo de reversão. Nas equações 3.108 e 3.109, vemos as expressões para os modos vórtex e transversal, estes são idênticos aos acima relatados. Com isso:

$$E_{anis.u}^V = E_{anis.u}^T = -K_u \frac{\pi w R^2}{2} [1 - \beta^2]. \quad (3.108)$$

E a anisotropia magnetocristalina cúbica é dada pela seguinte expressão:

$$E_{anis.c}^V = \frac{11}{8} E_{anis.c}^T = K_c R^2 w \pi (1 - \beta^2) \left\{ \frac{11}{64} \right\}. \quad (3.109)$$

Vemos que alguns termos de energia são semelhantes na forma para ambos os modos de reversão, mas não são numericamente iguais, pois a largura da parede de domínio, para ambos os modos, é geralmente diferentes. Finalizando as contribuições energéticas, temos a energia Zeeman, a qual é a mesma para ambos os tipos de parede de domínio e não depende do comprimento (largura) da parede (w).

3.5 CÁLCULO DA ENERGIA ZEEMAN

Para os cálculos da energia Zeeman é utilizada a expressão:

$$E_Z = -\mu_0 \int_V \vec{M} \cdot \vec{H} dV. \quad (3.110)$$

Na equação 3.111, vemos o momento magnético e o campo aplicado definidos como:

$$\begin{cases} \vec{M} = M_0 \hat{z} \\ \vec{H} = H \hat{z} \end{cases} \quad (3.111)$$

Tomando a integral volumétrica em coordenadas cilíndricas:

$$E_Z = -\mu_0 M_0 H \int_{\beta R}^R \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\frac{L}{2}}^{z_w} dz. \quad (3.112)$$

Resolvendo as integrais e fazendo algumas manipulações algébricas, a energia Zeeman é dada pela expressão:

$$E_Z = \frac{\mu_0 M_0 H R^2}{2} (1 - \beta^2) (L - 2z_w). \quad (3.113)$$

A equação (3.113) mostra que esta energia apenas direciona a parede de domínio, em que, para um campo externo $\vec{H}$ positivo, a energia Zeeman é minimizada se $z_w \rightarrow L$. Após todos os cálculos, a energia total para cada modo de reversão da magnetização, terá a contribuição de cada uma destas energias. Assim, teremos que:

Modo Coerente:

$$E_{total}^C = E_{dip}^C + E_{anis}^C + E_Z^C \quad (3.114)$$

Modo Vórtex:

$$E_{total}^V = E_{exc}^V + E_{dip}^V + E_{anis}^V + E_Z^V \quad (3.115)$$

Modo Transversal:

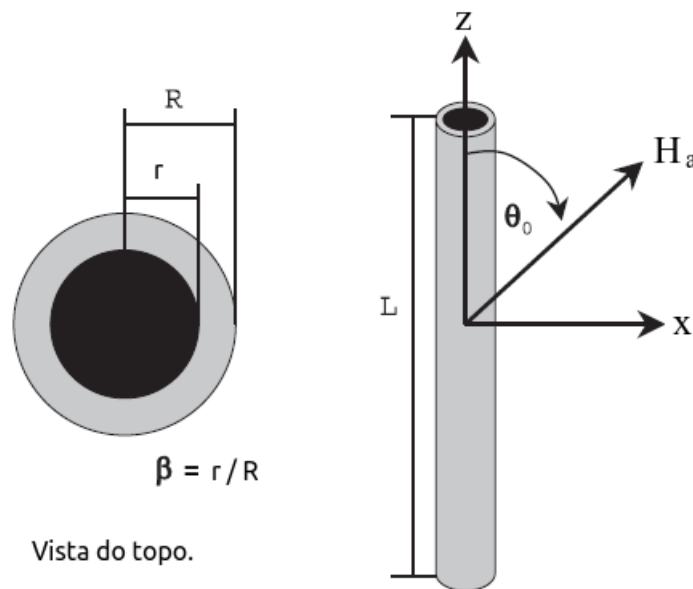
$$E_{total}^T = E_{exc}^T + E_{dip}^T + E_{anis}^T + E_Z^T. \quad (3.116)$$

De forma geral, o objetivo de estudar estes cálculos das energias envolvidas em cada modo de reversão, está vinculado à análise de um diagrama de fase mostrando os respectivos modos em função de β . Como já relatado durante este Capítulo, todas as energias envolvidas foram obtidas para um único nanotubo isolado, e os cálculos foram demasiadamente complicados, mas utilizando as propostas pré-determinadas, os cálculos se tornaram de fácil dedução. Para os cálculos das energias de um arranjo hexagonal de nanotubos, a dificuldade encontrada é bastante alta devido as diversas interações que ocorrem no arranjo de nanotubos magnéticos. Na literatura, foram observados dois artigos que demonstram apenas interações entre dois nanotubos, pode-se observar as dificuldades encontradas pelos autores [66,67]. Por isso, a implementação de simulações micromagnéticas, nestes casos, são necessárias, pois as análises das interações ocorridas em um arranjo de nanotubos podem ser bastante complicadas. No próximo Capítulo, apresentaremos os principais estudos sobre nanotubos magnéticos, com ênfase nos materiais ferromagnéticos níquel e cobalto. Serão analisados resultados obtidos através de simulação micromagnética, cálculos numéricos e dados experimentais.

4 NANOTUBOS MAGNÉTICOS

Desde a descoberta dos nanotubos de carbono por Iijima em 1991 [68], uma grande atenção tem sido voltada às nanoestruturas tubulares ocas, devido à sua importância particular em diversas aplicações. Mais recentemente, nanotubos magnéticos foram crescidos [2, 10, 69–71] motivando intensa pesquisa. A compreensão dos processos de magnetização dessas nanoestruturas, torna-se uma questão importante para suas aplicações em dispositivos spintrônicos [72, 73]. As aplicações tecnológicas desses sistemas requerem um profundo conhecimento de seu comportamento magnético. Por exemplo, Figura 12, espera-se que mudanças no raio interno dos nanotubos afetem fortemente o mecanismo de reversão da magnetização [63] e como consequência, a resposta magnética global [63, 69]. Os nanotubos têm propriedades magnéticas, as quais possibilitam analisá-los utilizando ressonância magnética, com isso, tornam-se úteis em aplicações de diagnóstico [74]. E além destas aplicações, os nanotubos podem se adequar a aplicações em biotecnologia, pois sabe-se que sua estrutura possui baixa densidade, possibilitando a flutuação em diversas soluções [2].

Figura 12 – Esquema dos parâmetros geométricos do nanotubo magnético. Seção reta, com seus raios interno r , externo R , razão β , o comprimento L e o ângulo θ entre o eixo do nanotubo e o campo aplicado H_a .



Fonte: Produzida por [75] e modificada pelo autor.

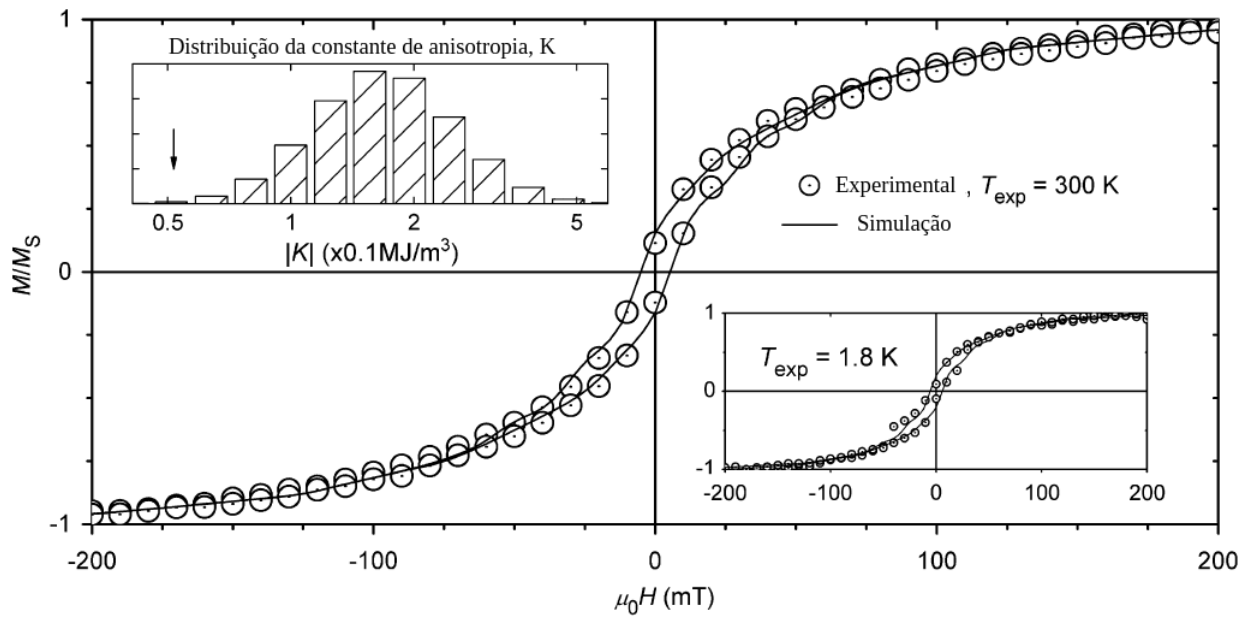
As propriedades magnéticas dos nanotubos, como o campo coercitivo e sua dependência angular, os mecanismos de reversão da magnetização e a configuração dos momentos magnéticos, são as principais fontes de estudos atualmente [20, 63, 76]. Sabe-se, da literatura científica, que

a coercividade e os mecanismos de reversão da magnetização são propriedades importantes dos materiais magnéticos, devido à muitas aplicações, como em ímãs permanentes, gravação magnética e eletrônica de *spin*. Com isso, sua compreensão é um desafio permanente para os pesquisadores envolvidos no estudo das propriedades desses materiais. E estas propriedades magnéticas podem ser modificadas pela mudança de alguns dos parâmetros geométricos dos nanotubos, como seus raios interno e externo (r , R), comprimento (L) e campo magnético aplicado ($\vec{H}_a$) numa direção definida por θ , sendo o ângulo do campo aplicado com o eixo do nanotubo [17, 77, 78], observamos na Figura 12, esquematicamente, os parâmetros geométricos.

Como já citado, coercividade e remanência são importantes propriedades de materiais magnéticos, por isso iremos abordar resultados relacionados a essas propriedades magnéticas e outras encontradas na literatura. Vários autores se utilizam de *softwares* como *OOMMF*, *NMag*, *MuMax*, etc, para estudar estas propriedades magnéticas. Dentre muitos, *Lebecki et.al.* [27] utilizam o *OOMMF* para obter curvas de histerese em um arranjo de nanotubos de Cobalto, em que na simulação, realizada pelos autores, a temperatura usada foi obtida, anteriormente, através de experimentos. Neste artigo, os autores abordam um arranjo de nanotubos que possuem um diâmetro externo de 50 nm e comprimento de 90 μm . A simulação negligencia as interações entre partículas na matriz, seguindo a rotina descrita em [2], e assim pode-se modelar um único nanotubo tridimensional isolado. Na Figura 13, observa-se o perfil suave do ciclo de histerese experimental, a baixa coercividade e remanência não podem ser explicadas nem pela forma do nanotubo nem por sua anisotropia cristalina. Entretanto, a menor dimensão da espessura pode indicar uma mudança na direção do eixo de fácil magnetização do tubo e a estrutura FCC-Co apresenta uma pequena anisotropia cristalina, cujo valor é $-0,055 \text{ MJ}/\text{m}^3$. Com isso, os autores explicam os dados experimentais sugerindo a presença de uma forte anisotropia com o eixo do nanotubo, assim analisam como sendo de origem magnetoelástica. Além desta explanação, outra possibilidade seria o efeito *exchange bias* resultante da interface entre cobalto ferromagnético e a camada de óxido de cobalto anti-ferromagnético. Outros autores, como *J. Escrig et. al.* [29], relatam os efeitos da anisotropia em nanotubos.

No decorrer do artigo da referência [29], os autores calculam expressões analíticas para a energia magnética total de duas configurações internas de tubos nanométricos, além disso, apresentam uma análise de um diagrama de fases magnético como função de vários parâmetros geométricos, tais como raio externo, comprimento e a razão β definida na Figura 12, obtendo este diagrama ao considerar propriedades de anisotropia de quatro materiais: ferro, cobalto, permalloy e níquel.

Figura 13 – Curva de histerese de um conjunto de nanotubos paralelos de Co rodeados por uma matriz porosa não magnética. O campo externo é aplicado ao longo do eixo do tubo. O sinal ferromagnético (pontos) é extraído dos dados experimentais, $T_{exp} = 300$ K. A linha contínua representa os resultados das simulações numéricas. Lado direito: dados experimentais junto com a simulação micromagnética em $T_{exp} = 1,8$ K. Lado esquerdo: distribuição log-normal dos coeficientes de anisotropia, K , obtida por ajuste dos dados experimentais. A seta indica o valor de anisotropia cristalina para FCC-Co [1].

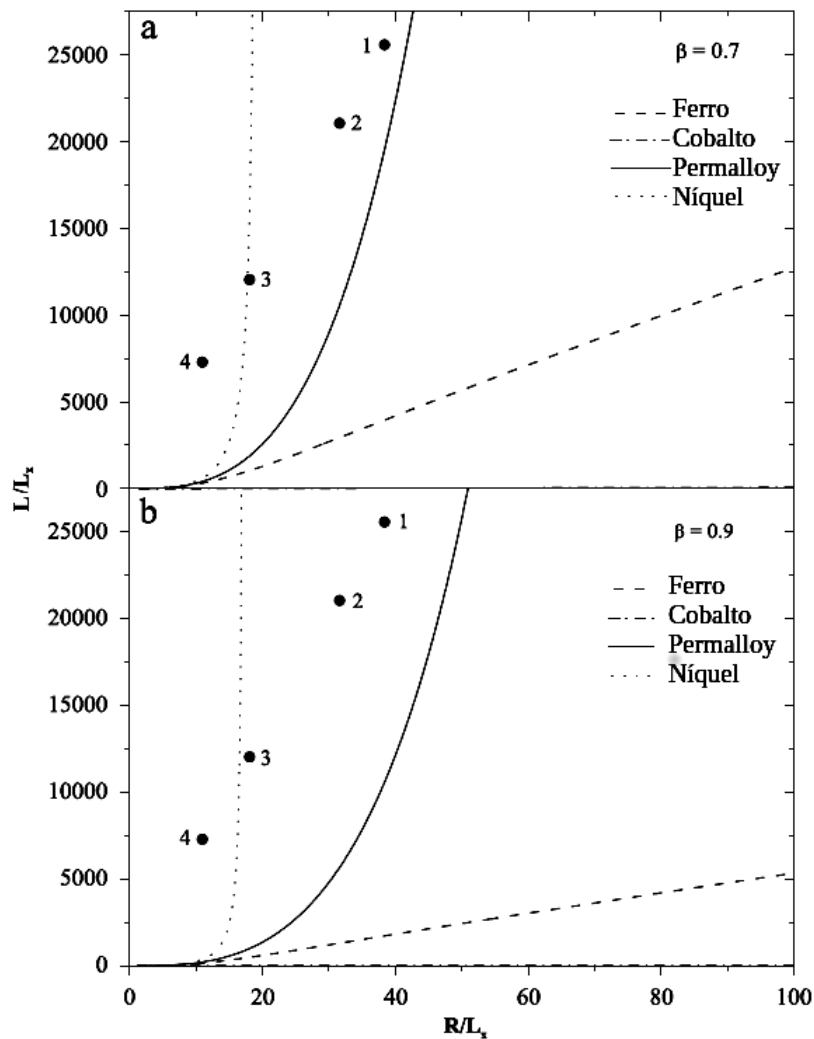


Fonte: Produzida por [27] e modificada pelo autor.

As expressões para as energias (troca E_{exc} , dipolar E_{dip} e magnetocristalina E_C) foram obtidas e escritas como função dos parâmetros característicos do nanotubo, como raio interno e externo, r e R , o seu comprimento L , o comprimento de troca ($L_{exc} = \sqrt{2A/\mu_0 M_s^2}$) e as razões $\beta = r/R$ e $\gamma = L/R$. Estes cálculos foram realizados para cada modo de reversão da magnetização, podendo aparecer no nanotubo um modo vórtex (V) ou coerente (F). Sendo assim, pode-se observar na Figura 14 os diagramas de fase, fazendo-se L/L_{exc} como função de R/L_{exc} , em que foram apresentados dois valores da razão entre os raios, $\beta = 0,7$ e $0,9$. No diagrama da Figura 14 cada linha separa a configuração do modo F (superior esquerda) do modo V (inferior direita). Os autores observaram que, para o Cobalto, a linha de transição entre os modos de reversão se encontra muito próxima ao eixo das abcissas, com isso, o modo F está presente em quase toda a faixa estudada, além disso, os autores consideraram que devido à anisotropia ser muito baixa para o permalloy, os resultados estão em concordância com um material cuja anisotropia é praticamente nula.

Para especificar os resultados, os cálculos foram feitos para nanotubos magnéticos com os seguintes parâmetros, $R = 90$ nm e $L = 60$ μ m [2], com isso, os resultados são apresentados na Figura 14 como pontos: para Fe (1), Co (2), permalloy (3) e Ni (4).

Figura 14 – Diagrama de fases para nanotubos magnéticos dando as regiões no plano RH onde uma das configurações tem menor energia: fase F para a esquerda superior, fase V para a parte inferior direita. Os pontos 1, 2, 3 e 4 são resultados obtidos para $R = 90$ nm e $L = 60$ μ m [2].



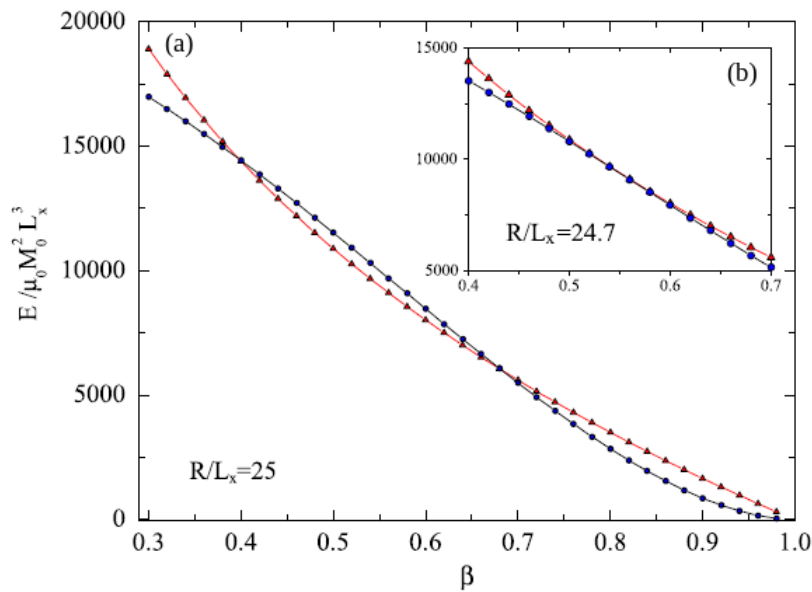
Fonte: Produzida por [29] e modificada pelo autor.

Observa-se no diagrama, Figura 14, que dentre todos os pontos, o número (4) está mais próximo da linha de transição entre os modos de reversão, esta análise é feita quando comparada aos outros pontos. Os autores supuseram que este fato indica um resultado para o campo coercitivo mais baixo (inferior aos outros estudados no artigo). Mas para os outros casos, os quais se encontram dentro da fase F (modo coerente), devem possuir o campo coercitivo mais alto. Com isso, *Escrig et al.* mostraram que a anisotropia desempenha um papel fundamental no

estado fundamental dos tubos magnéticos, em que o estado magnético dos nanotubos depende fortemente do material utilizado, bem como de cada um dos parâmetros geométricos que o definem. E considerando a análise da coercividade, tem-se que o melhor material para dispositivos de baixa coerção, mostrados no diagrama da Figura 14 é o Níquel, com R/L_{exc} em torno de 10 e para quase qualquer valor de L/L_x . Esta condição é favorecida para nanotubos com espessura pequena (β próximo à 1,0), caso contrário, o Cobalto sempre apresentará alta coercividade, tornando-se quase independente da razão β do nanotubo.

Seguindo o estudo de diagrama de fases, outro artigo na literatura, que relata este tipo de análise, foi publicado pelos mesmos autores *Escrig et. al.* [17]. Neste artigo, faz-se uma abordagem de um diagrama baseado na energia total reduzida para cada modo de reversão da magnetização, configurações vórtex (V) e coerente (F), como função de β para $L/L_x = 5000$ e $R/L_x = 25$. Para estes parâmetros dos nanotubos, observou-se a existência de dois pontos de transição, em que corresponde a, aproximadamente, $\beta \approx 0,4$ e $\beta \approx 0,68$, Figura 15 (a). Dentro destes dois valores, o modo vórtex é preferencial, diminuindo-se o raio externo, os dois pontos de transição colapsam em um único ponto, o qual corresponde a $\beta \approx 0,55$, Figura 15 (b).

Figura 15 – Energia magnética das configurações coerente (círculos em azul) e vórtex (triângulos em vermelho) de um tubo em unidades de $\mu_0 M_0^2 L_x^3$, em função de β .

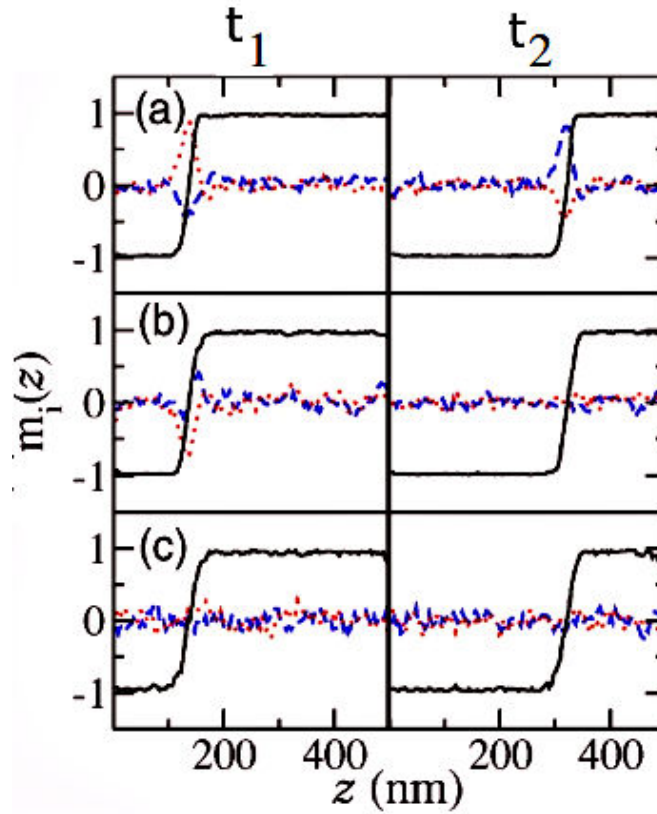


Fonte: Produzida por [17] e modificada pelo autor.

Para valores menores de R/L_x , nenhum ponto de transição é encontrado, e somente o modo paralelo (coerente F) é o mais estável. No artigo escrito por *Landeros et. al.* [63], os autores abordam este problema utilizando simulações computacionais. Na Figura 16, foi apresentado dois estágios temporais diferentes do processo de reversão, os quais mostram a propagação da parede ao longo do tubo para os valores da razão (a) $\beta = 0,17$, (b) $\beta = 0,33$ e (c) $\beta = 0,5$. A linha

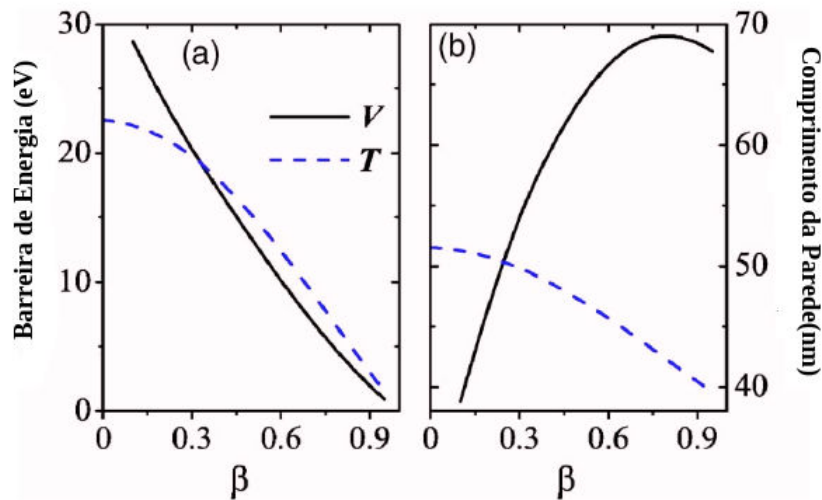
contínua representa a componente axial média da magnetização (m_z), enquanto que as outras duas componentes, no plano xy , são dadas pelas linhas pontilhadas (em vermelho) e tracejadas (em azul). Quando ambas as médias de m_x e m_y são nulas, aparece o modo Vórtex (V), quando um ou outro é nulo o mecanismo do modo Transversal (T) é observado. A Figura 16 (a) mostra um claro comportamento do modo de reversão T, com uma rotação helicoidal da magnetização ao longo do eixo do nanotubo. Na Figura 16 (b), observou-se um comportamento no modo T no estágio inicial (t_1), que é perdido no estágio (t_2) em que o modo de reversão V está presente. Por fim, o caso (c) ilustra um modo V ao longo do nanotubo. A Figura 17 mostra os cálculos analíticos para os resultados obtidos da simulação feita acima. A Figura 17 (a) representa as barreiras energéticas para os modos V e T como função de β . Foi observado que para $\beta = 0,33$ ocorre uma mudança no modo de reversão de T para V, estando de acordo com as simulações. No caso da Figura 17 (b), é analisado as larguras de parede correspondentes aos modos T e V, que se encontram dadas em nanômetros (nm). Então para tubos muito curtos, $L \approx w$, não é possível acomodar uma parede transversal (T) ou de vórtex (V), dando origem a um modo coerente de reversão da magnetização, como visto nos artigos supra citados.

Figura 16 – Instantâneos da reversão nos nanotubos definido por (a) $\beta = 0,17$, (b) $\beta = 0,33$ e (c) $\beta = 0,5$, nas duas fases diferentes do processo. A abscissa representa a coordenada axial, z , ao longo do tubo e as ordenadas dão os componentes médios da magnetização. m_x linha tracejada (azul), m_y linha pontilhada (vermelha) e m_z linha sólida (preta), t_1 e t_2 são os estágios temporais no processo de reversão dos momentos magnéticos.



Fonte: Produzida por [63] e modificada pelo autor.

Figura 17 – As linhas contínuas pretas ilustram: (a) as barreiras energéticas e (b) a largura da parede para o modo V e as linhas a tracejado azul correspondem ao modo T.

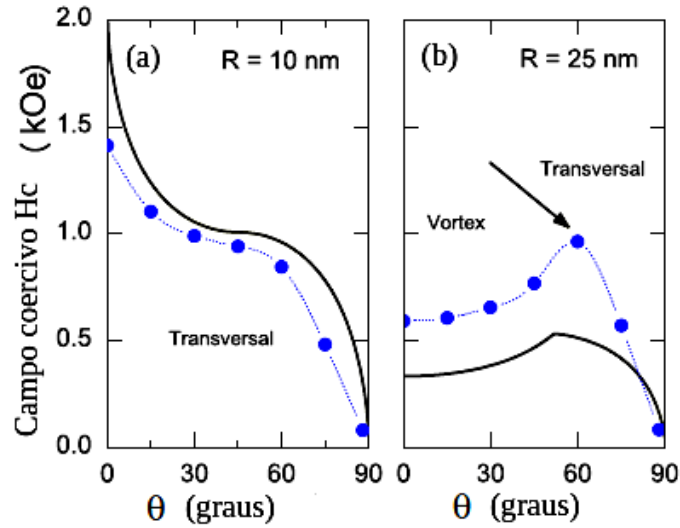


Fonte: Produzida por [63] e modificada pelo autor.

Analisando a literatura, há várias formas de se estudar as propriedades dos nanotubos, neste momento serão abordadas as propriedades magnéticas dos nanotubos como função da dependência angular. O artigo produzido por *S. Allende et. al.* [79], em que se apresenta a dependência angular dos modos transversal e vórtex em nanotubos magnéticos. Os autores consideram seus estudos através de expressões para o campo coercitivo obtidos analiticamente, possibilitando entender a influência da geometria nos processos de reversão, para diferentes valores dos ângulos. Inicialmente, ao observar a coercividade dos diferentes modos, foi encontrado o que impulsiona a reversão para cada ângulo. Na Figura 18, é ilustrado os resultados para um nanotubo de níquel com $L = 0,5 \mu\text{m}$, a razão $\beta = 14/30$, além disso é apresentado na Figura 18 (a) $R = 10 \text{ nm}$ e em (b) $R = 25 \text{ nm}$. Na Figura 18, os pontos em azul e as linhas sólidas representam a coercividade obtidos por simulação numérica e por cálculos analíticos, respectivamente. Conforme ilustrado na Figura 18 (a), em um nanotubo de diâmetro pequeno, o modo Transversal (T) será preferencial. Mas, ao aumentar o raio do nanotubo, Figura 18 (b), é observada uma transição entre os modos Transversal (T) e Vórtex (V) como função do ângulo θ . Nos cálculos analíticos, a transição entre os modos T e V ocorre de forma abrupta, uma vez que a inclinação das curvas da coercividade no ponto de cruzamento é diferente. Já para o caso das simulações numéricas, é mostrada uma transição suave. Na Figura 18 (b), observa-se que em torno do ponto de cruzamento, que se encontra em $\theta = 60^\circ$, o processo de inversão começa nas extremidades do nanotubo com uma rotação no modo V, propaga-se e termina no centro do nanotubo com uma rotação em modo T. Foi observado que além dos modos T e V existe o modo Coerente (C), e que a partir dos cálculos analíticos para ambos os raios, $R = 10$ e 25 nm , a coercividade é sempre maior para o modo Coerente (C) que no modo transversal (T).

Este fato está de acordo com as simulações numéricas feitas neste artigo, pois para o caso em que $\theta = 88^\circ$, foi observado pelos autores um modo Coerente (C).

Figura 18 – Dependência angular da coercividade, H_c , de um nanotubo de níquel com $L = 0,5 \mu\text{m}$, $\beta = 14/30$ e (a) $R = 10\text{nm}$ e em (b) $R = 25\text{nm}$.



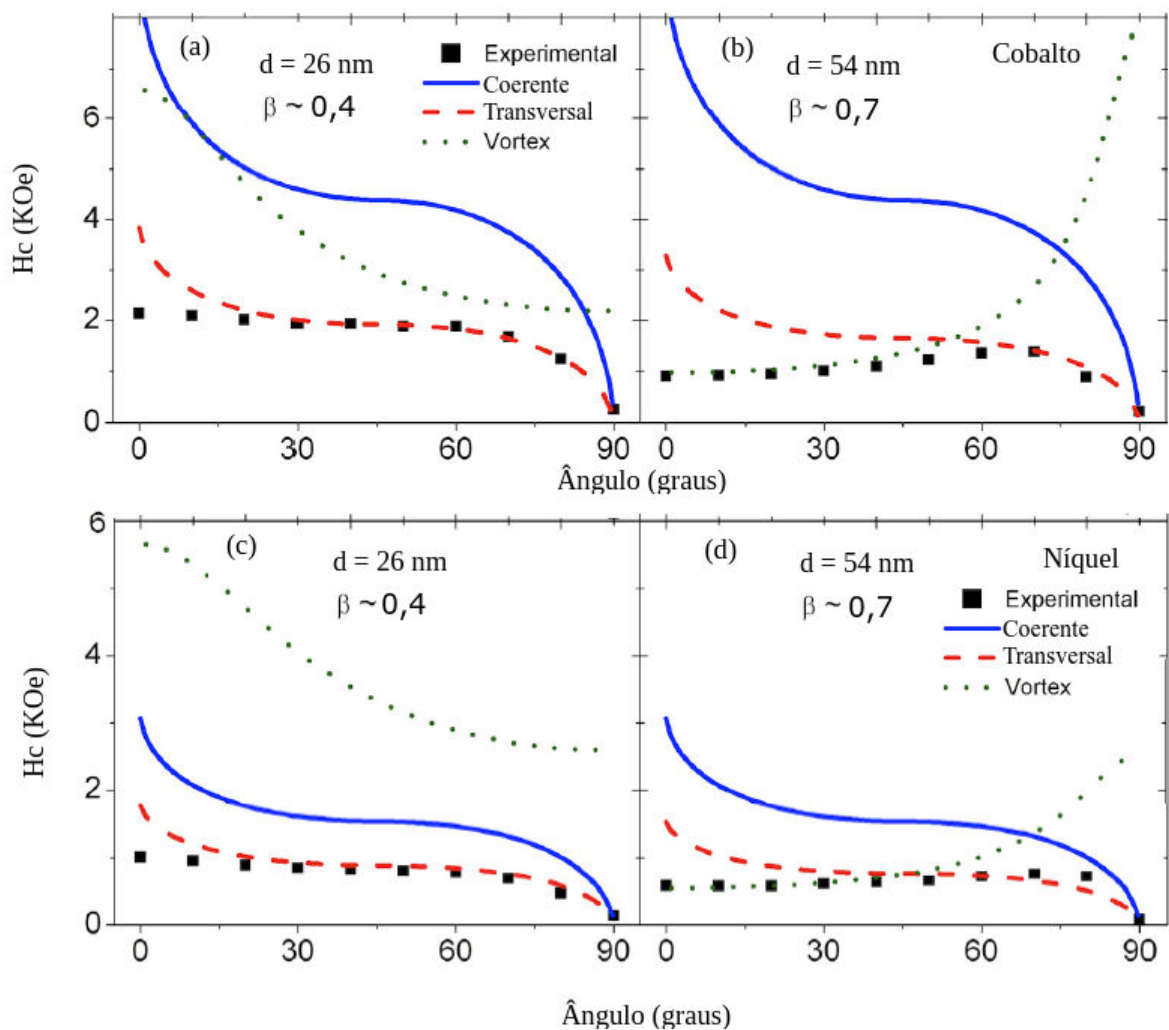
Fonte: Produzida por [79] e modificada pelo autor.

Seguindo este mesmo raciocínio da dependência angular da coercividade, *M. P. Proença et. al.* [30] observaram esta dependência em um arranjo ordenado para os materiais níquel e cobalto, através de cálculos analíticos. Na Figura 19, os autores mostram a dependência angular da coercividade para amostras de cobalto, Figuras 19(a) e (b), e níquel, 19(c) e (d), respectivamente.

Os autores analisaram através de seus resultados que, no arranjo de nanotubos, a coercividade sempre diminui com o aumento do ângulo θ , mostrando assim um comportamento monotônico, e a coercividade estimada utilizando o modo de inversão de magnetização coerente (C), obtêm valores muito mais altos que os obtidos experimentalmente, Figura 19. Com os cálculos analíticos, os autores confirmaram a presença de um modo de reversão de magnetização transversal no arranjo de nanotubos com diâmetros exteriores muito pequenos, para o cobalto, Figura 19 (a), e para o níquel, Figura 19 (c). No entanto, os nanotubos com diâmetros maiores, $d \gtrsim 50 \text{ nm}$, apresentam um comportamento não monotônico, em que H_c começa aumentando com o θ , atingindo um valor máximo $\theta_T \neq 0$, e então diminui para $\theta > \theta_T$, Figuras 19 (b) e (d). Esse comportamento não-homogêneo evidencia uma transição de dois processos diferentes de reversão de magnetização (modos transversal e vórtex). Nestes casos, $d \gtrsim 50 \text{ nm}$, tem-se que uma vez que o sistema inverte sua magnetização pelo modo que oferece a menor coercividade, os cálculos analíticos permitem a identificação dos modos de reversão de magnetização esperados para cada sistema, e o bom acordo encontrado entre os cálculos analíticos e os dados experimen-

tais da dependência angular da coercividade, Figuras 19 (b) e (d), evidencia a existência de um cruzamento entre os modos de reversão vórtex e transversal, este cruzamento ocorrendo para ângulos, teoricamente, preditos estando próximos aos máximos obtidos de forma experimental. Logo, os autores finalizam o artigo observando que, as pequenas diferenças entre os dados experimentais e os cálculos analíticos podem ser explicadas por desvios das interações dipolares que ocorrem entre nanotubos vizinhos. Sendo estas diferenças o motivo para nosso estudo.

Figura 19 – Dependência angular do campo coercitivo medido experimentalmente (quadrados) e calculado analiticamente (modo C: sólido azul, modo T: vermelho tracejado e modo V: verde pontilhado) para arranjos Co (a) e (b), e para arranjos de Ni (c) e (d).

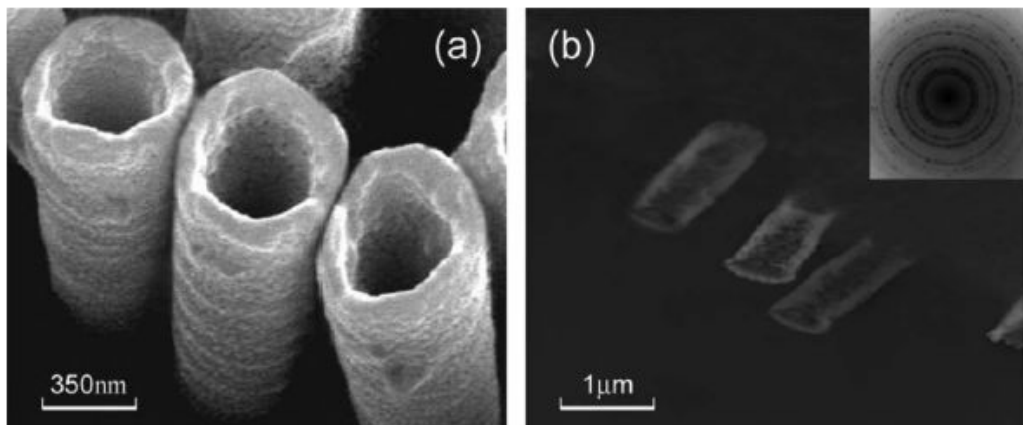


Fonte: Produzida por [30] e modificada pelo autor.

Considerando um estudo experimental sobre nanotubos, utilizamos o artigo dos autores *R. Sharif et. al.* [76] para exemplificar, o qual aborda a mudança magnética de nanotubos ferromagnéticos em função de parâmetros geométricos. Neste artigo, foram apresentados os resultados experimentais relativos às medições das curvas de $H_c(\theta)$ e $SQ(\theta)$, em que SQ é a

remanência ou quadratura, isto para vários nanotubos ferromagnéticos (Ni, Fe e Co) eletrodepositados em membranas de polycarbonato gravadas em um trilho e com isso estudar como as mudanças na espessura, $e = R - r$, R o raio externo e r o raio interno, dos nanotubos alteram as formas das curvas H_c e SQ . Para o experimento, o comprimento dos nanotubos é de $6\ \mu\text{m}$ igual à espessura das membranas de polycarbonato. A morfologia e propriedades estruturais são observadas utilizando microscopia eletrônica de varredura por emissão de campo (FESEM) e microscopia

Figura 20 – Morfologia dos nanotubos de cobalto: (a) imagens em FESEM dos nanotubos de espessura e_2 e (b) imagens em TEM dos nanotubos de espessura e_1 . A inserção mostra o padrão de difração dos nanotubos mostrando sua estrutura cristalina fcc .

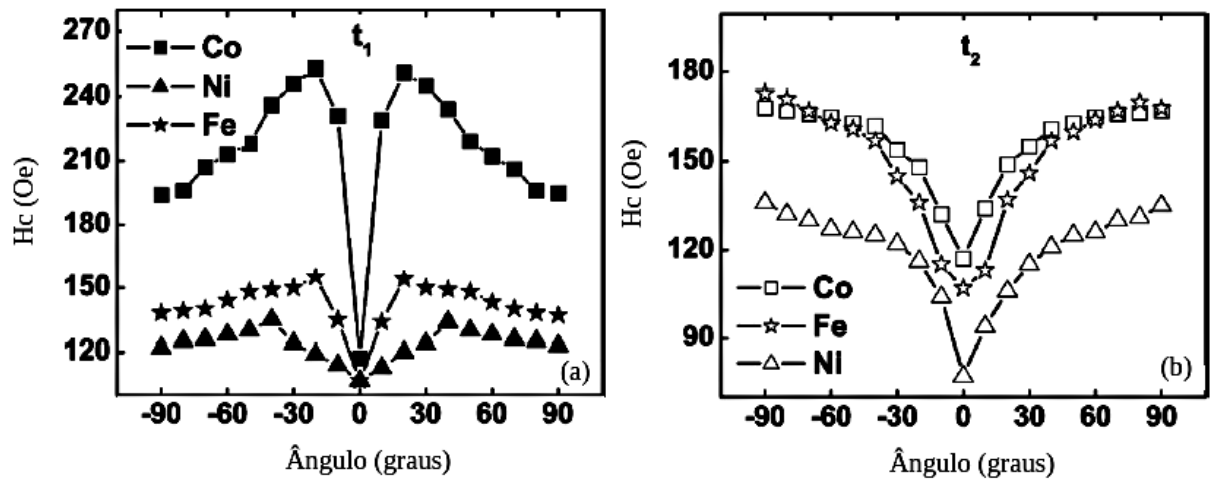


Fonte: Produzida por [76] e modificada pelo autor.

eletrônica de transmissão (TEM). Para a análise por TEM, as amostras são dissolvidas em clorofórmio. Para medidas magnéticas dependentes do tempo de nanotubos de Co de espessura e_2 , a temperatura é fixada em $300\ \text{K}$ e a amostra é saturada com um campo aplicado positivo, então o campo reverso negativo desejado é ajustado e mantido constante, e as medições de decaimento da magnetização $M(t)$ são calculadas para milhares de segundos. As propriedades magnéticas são investigadas usando magnetômetro de amostra vibrante e dispositivo interferômetro quântico supercondutor (*SQUID*). A Figura 20 (a) mostra imagens FESEM do arranjo de nanotubos de cobalto de espessura $e_2 \sim 150\ \text{nm}$. No artigo foi observado que, os nanotubos de espessura $e_1 \sim 50\ \text{nm}$, são muito finos para serem analisados por FESEM, por isso, para obter resultados, as amostras foram dissolvidas e depois examinadas utilizando TEM. A Figura 20 (b) mostra as imagens dos nanotubos de cobalto através do TEM. É apresentada na Figura 20 (b) uma inserção, canto direito da Figura, em que aparece o padrão de difração de nanotubos e sua estrutura cristalina fcc . A Figura 21 exhibe a dependência angular da coercividade (H_c) para arranjos de nanotubos de Co, Fe e Ni, espessuras (a) e_1 e (b) e_2 . Na Figura 22, tem-se a dependência angular da remanência, SQ (*remanence squareness*), para arranjos de nanotubos de Co, Fe e Ni,

espessuras (a) e_1 e (b) e_2 .

Figura 21 – Dependência angular do campo coercitivo para o arranjo de nanotubos de Co, Fe e Ni, (a) espessura e_1 e (b) e_2 .

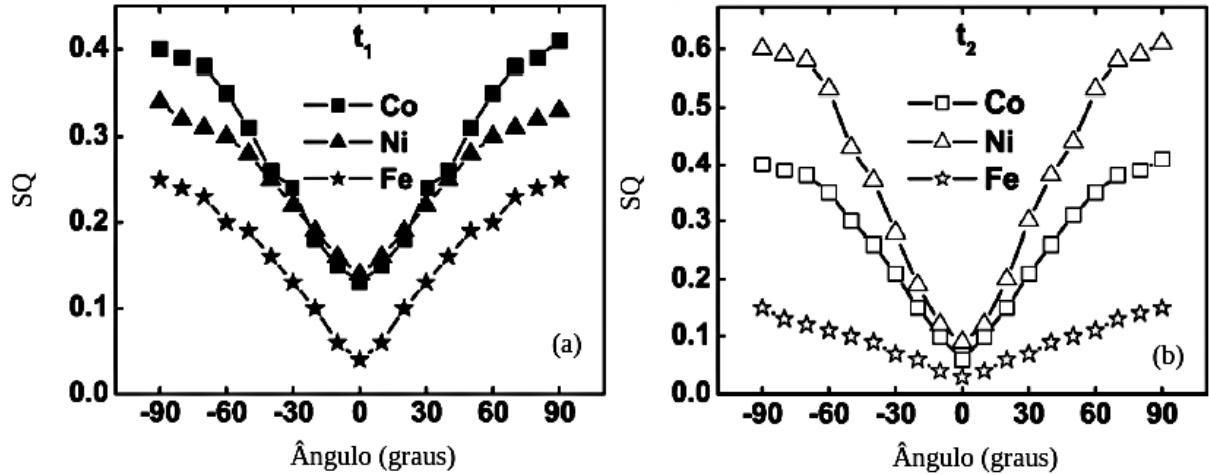


Fonte: Produzida por [76] e modificada pelo autor.

Da Figura 21 (a), fica bastante claro que a coercividade de todos os arranjos de nanotubos com espessura t_1 , primeiramente aumenta com o ângulo e depois diminui para ângulos mais altos até $\theta = \pm 90^\circ$, representando uma variação no tipo de magnetização (M). Além disso, os autores indicam que este comportamento da curva de coercividade é similar aos já observados em nanofios de níquel [80]. No caso da Figura 21 (b) é verificado que a coercividade (H_c) do Co, Fe e Ni de espessura t_2 aumenta com o aumento do ângulo (θ) de 0° até $\pm 90^\circ$. E como já explicado neste texto, este comportamento também tem sido observado em nanofios de Co, NiFe, e CoNiFe [80]. Nesta análise, os autores observaram que para a espessura t_2 , Figura 21 (b), representa que a magnetização é, principalmente, determinada pelo modo de reversão Vórtex. Enquanto que a variação do tipo de reversão para a espessura t_1 , Figura 21 (a), representa que em grandes valores de ângulos, a rotação Coerente é dominante, enquanto o modo Vórtex acontece para ângulos pequenos ($\theta \leq \pm 40^\circ$). Além do mais, a geometria dos nanotubos apresentam duas características de configurações internas ideais de acordo com sua magnetização: Paralelo ao eixo do tubo e concêntrico ao eixo do tubo. Para as amostras utilizadas no artigo, o diâmetro dos nanotubos é de 600 nm, que é suficientemente grande para concluir que o modo Vórtex é o estado mais favorável, como observado no artigo [81]. No estudo da remanência, os autores abordam a Figura 22 analisando as formas das curvas de SQ (*remanence squareness*), as quais são determinadas de acordo com o eixo de fácil magnetização dos arranjos. Pode-se notar que, a partir das Figuras 22 (a) e (b), os valores de SQ para todos os arranjos de nanotubos de espessuras t_1 e t_2 aumentam com o aumento do ângulo com maior valor em $\theta = \pm 90^\circ$, que é o eixo fácil dos arranjos, como observado a partir das curvas de magnetização (não mostradas no artigo).

Além desta análise, os autores observam que a inversão de magnetização do modo Coerente para

Figura 22 – Dependência angular do SQ (remanência) para o arranjo de nanotubos de Co, Fe e Ni, (a) espessura e_1 e (b) e_2 .



Fonte: Produzida por [76] e modificada pelo autor.

o modo Vórtex, sobre uma certa barreira de energia, também aparece devido às flutuações térmicas [82]. Assim, os autores confirmam que, se esses efeitos forem considerados, espera-se que a magnetização varie exponencialmente com o tempo, $M(t) = M(0)\exp(t/\tau)$, em que $\tau = \tau_0 \exp(-\Delta E/k_B T)$, e a dependência exponencial do tempo de magnetização é devido a uma altura de barreira de energia, entretanto, em sistemas reais esse comportamento exponencial raramente é observado devido às diferentes barreiras de energia provenientes da distribuição da anisotropia e tamanho [83].

Com isso, têm-se que as estruturas reais possuem irregularidades e são formadas por nanotubos muito próximos. As interações dipolares são fortes e podem quebrar a simetria gerando uma reversão inesperada. Logo, o formato das curvas, $H_c \times \phi$ e $SQ \times \phi$, não são suficientes para estimar o modo de reversão da magnetização que será formado. Sendo assim, a simulação micromagnética pode ser uma boa ferramenta de estudo, pois em arranjos de tubos magnéticos medir, diretamente, mapas de momentos magnéticos ao longo de cada nanotubo é bastante complicado. Com isso, na próxima seção, serão feitas explanações sobre simulação micromagnética utilizando os softwares *OOMMF* e *MuMax3* para simular nanotubos magnéticos de Níquel.

5 SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA UTILIZANDO *OBJECT ORIENTED MICROMAGNETIC FRAMEWORK* (OOMMF) E MUMAX3

5.1 *SIMULADORES MICROMAGNÉTICOS*

Como relatado no final do Capítulo 4, o estudo das propriedades magnéticas de um arranjo de nanotubos é muito complicado devido às várias interações existentes. Sendo assim, a análise dessas propriedades é mais fácil ao se utilizar simulação computacional. Com isso, 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 de amostras magnéticas. Existe uma variedade de simuladores micromagnéticos que podem ser classificados pelo método de discretização utilizado: simuladores baseados no Método de Diferença Finita (MDF) e no Método de Elemento Finito (MEF). Podem também ser classificados pela licença de uso: de código aberto ou comerciais [32, 52, 84–87]. De maneira geral, dentre muitos simuladores, têm-se o OOMMF, MuMax3, Magpar, Nmag e SimulMag. Na discretização, os simuladores baseados em MDF como o OOMMF e MuMax3 [31, 32] são, em geral, mais rápidos e precisam de menos memória que os baseados em MEF [35], como Magpar [88] e Nmag [87]. Por outra parte, os simuladores baseados em MDF são utilizados para amostras cuja 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. Além do método de discretização e a licença de usuário, outros fatores influenciam na escolha de um simulador. O suporte para scripts, suporte para a execução em paralelo e a linguagem de programação utilizada, são outros critérios. Neste trabalho foram utilizados o simulador OOMMF e o MuMax3, que são *standart* em simulações micromagnéticas. Ambos são programas de domínio público que utilizam o método de discretização por diferenças finitas e calculam o campo de desmagnetização utilizando algoritmo da Transformada rápida de Fourier (do inglês, Fast Fourier Transform - FFT), e suportam a programação em paralelo *multithreads* em estações de trabalho multinúcleo (não suportam a paralelização em *clusters*), além disso possuem suporte para *scripts* e já foram citados em diversas publicações científicas [28, 31], comprovando que os resultados obtidos dos *softwares* são confiáveis. Nas seções seguintes, descreveremos um pouco sobre cada um destes simuladores micromagnéticos.

5.2 *OBJECT ORIENTED MICROMAGNETIC FRAMEWORK (OOMMF)*

O OOMMF acrônimo de (*Object Oriented Micromagnetic Framework*) é um simulador micromagnético desenvolvido e projetado na MCSD (*Mathematical and Computational Sciences Division*) do ITL (*Information Technology Laboratory*) no NIST (*National Institute of Standards and Technology*), em cooperação direta com o μ MAG (*Micromagnetic Modeling Activity Group*) [32], que é um grupo voltado a fazer programas portáteis de código aberto, além de ferramentas

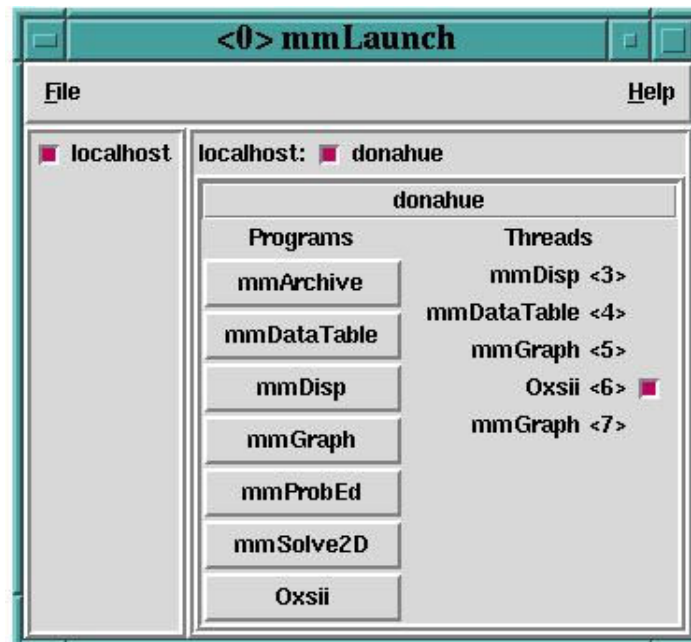
para simulações micromagnéticas de diversos tipos de amostras. É considerado um código micromagnético totalmente funcional, com uma interface simples, permitindo que programadores sejam capazes de mudar os códigos de entrada e de saída. Estes códigos são escritos na linguagem C++ com Tcl/Tk, em que: Tcl (*Tool Command Language*) é uma linguagem de programação dinâmica muito poderosa e fácil de aprender, sendo adequada para uma vasta gama aplicações, incluindo *web* e *desktop*, redes e administração. De código aberto, Tcl é uma linguagem madura, facilmente implantada e altamente extensível. Tk é um *toolkit* de interface gráfica do usuário que leva o desenvolvimento de aplicativos *desktop* para um nível superior ao das abordagens convencionais. Tk é a GUI padrão não só para Tcl, mas para muitas outras linguagens dinâmicas, e pode produzir ricas aplicações que funcionam inalteradas em Windows, Mac OS X e Linux. O programador não familiarizado com o código terá uma facilidade devido à linguagem C++, permitindo que modifique e crie funcionalidades novas. Já a interface escrita em Tcl/Tk, permite que o código seja "executado" em uma grande extensão de sistemas operacionais. Com isso, pode-se modificar o código em três níveis. No primeiro nível superior, programas individuais interagem via protocolos bem definidos através de uma rede de *sockets*. A partir disto, os usuários podem conectar os módulos de várias maneiras, logo novos módulos que seguem o mesmo protocolo podem ser adicionados. O segundo nível de modificação é de *script* no Tcl/Tk. Alguns módulos permitem que *scripts* do Tcl/Tk sejam importados e executados em tempo de execução, e os *scripts* de alto nível são relativamente fáceis de modificar ou substituir. O *mmsolve2D*, é responsável por resolver o problema micromagnético em duas dimensões, utilizando a equação diferencial (ED) de Landau-Lifshitz na dinâmica do vetor magnetização em uma malha quadrada 2D, além disso, utiliza FFT para calcular o campo desmagnetizante. A anisotropia, campo aplicado e magnetização inicial podem ser variados, e elementos com diversas geometrias podem ser estudados.

Nesta seção, será apresentado brevemente o *OOMMF*, primeiramente definiremos as variáveis do problema, às quais temos acesso através de uma janela do programa, *mmLaunch*, depois o problema é executado para que os cálculos sejam iniciados. Cada janela deste programa é descrita na seção. A janela *mmLaunch* lança, monitora e controla outras aplicações do *OOMMF*, com isso, acessamos outras janelas úteis, por exemplo:

1. *mmArchive* (salva automaticamente dados de campos escalar e vetorial),
2. *mmDataTable* (exibe os valores das variáveis escalares de saída),
3. *mmDisp* (exibe os campos vetoriais),
4. *mmGraph* (plota gráficos num plano 2D *XY*),
5. *mmProbEd* (define ou modifica um problema para que o *mmSolve2D* solucione),
6. *mmSolve2D* (monitora a resolução de problemas 2D),

7. *Oxsii* (monitora a resolução de problemas 3D).

Figura 23 – Janela *mmLaunch* que dá acesso a um conjunto de outras janelas cujas funções são: salvar, editar e executar o problema .



Fonte: Produzida por [28].

Comentaremos agora sobre cada uma das janelas úteis contidas no *mmLaunch*, Figura 23, e iniciaremos pela *mmArchive*.

1. *mmArchive* fornece um serviço de armazenamento automático do campo vetorial. À medida que o programa é "executado", os dados são salvos na pasta do programa como mostrado na Figura 24. O resultado é salvo como imagem com a extensão *.omf* e armazenados numa tabela com valores de todas as variáveis calculadas durante a simulação, como: campos, magnetizações, energias, número de iterações dentre outros no formato *.odt*. Todas estas saídas são geradas automaticamente.

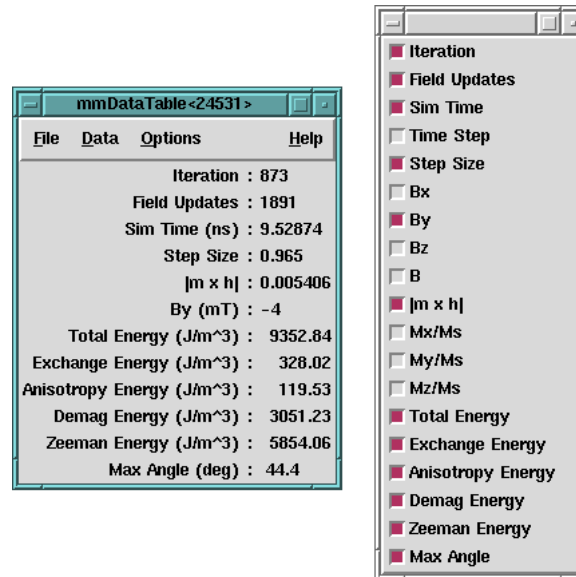
Figura 24 – Demonstração do *mmArchive* em execução.



Fonte: Produzida por [28].

2. *mmDataTable* fornece um *display* para exibir os dados calculados durante a execução. Os dados a serem visualizados são selecionados no topo da janela na opção *data*. Sua utilização indica a evolução das variáveis calculadas pelo simulador micromagnético. Na Figura 25, mostra-se a janela *data* do lado esquerdo e ao seu lado direito, a escolha das variáveis B_y , m_x , m_y e m_z a serem exibidas no *display*.

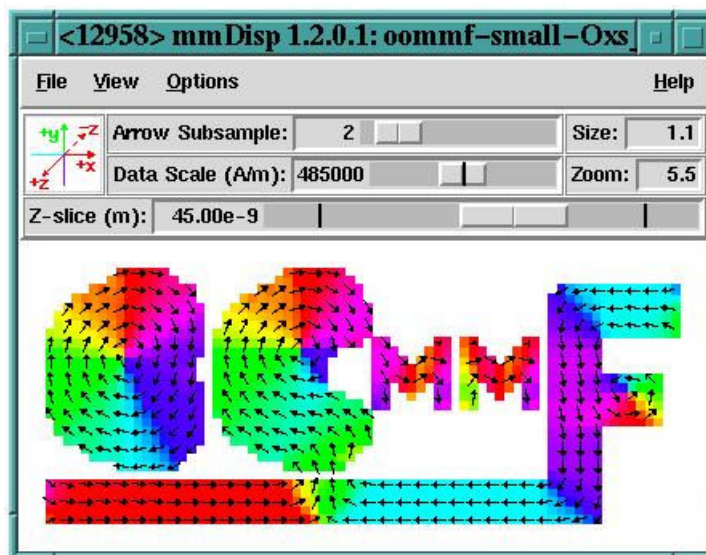
Figura 25 – Ilustração do *mmDataTable*, mostrando os dados que foram calculados, lado esquerdo mostrando a janela e do lado direito as variáveis micromagnéticas.



Fonte: Produzida por [28].

3. *mmDisp* mostra as distribuições espaciais em duas dimensões para o campo de momentos, na Figura 26 é observado, através das cores, a orientação 3D dos *spins*. Esta janela também aceita dados do *mmSolver2D*, mostrando dessa forma a evolução do campo vetorial à medida que o programa é executado.

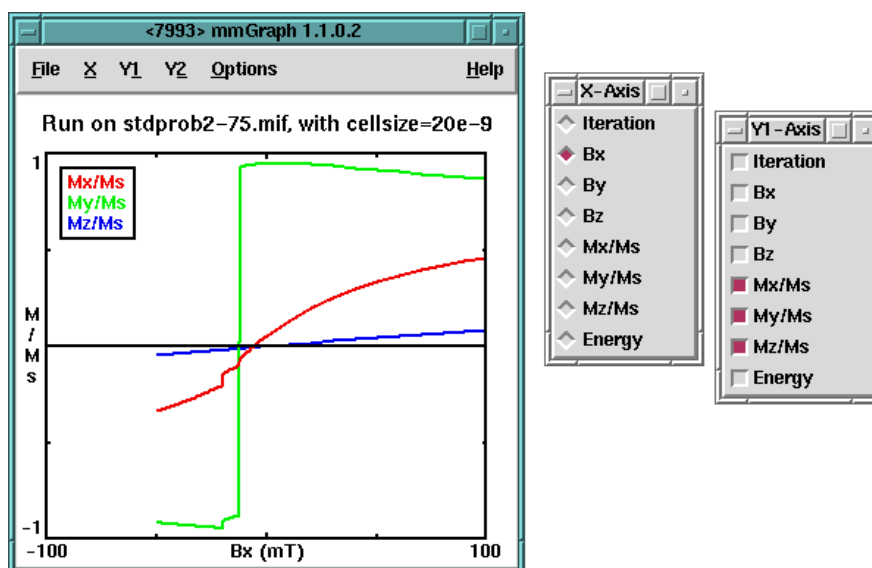
Figura 26 – A janela *mmDisp* mostra graficamente a evolução do campo dos momentos da amostra em estudo. Neste caso, a amostra tem o formato do próprio nome do simulador, e a proporção é de um *spin* (setas pretas) para cada duas células. O padrão colorido está de acordo com o sistema de eixos, de maneira a indicar a direção 3D dos *spins* de cada célula.



Fonte: Produzida por [28].

4. *mmGraph* é um *display* que apresenta semelhança com a Figura 25, *mmDataTable*.

Figura 27 – Ilustração da Janela *mmGraph*, que mostra um gráfico da magnetização em função do campo aplicado, à esquerda, e seus respectivos eixos, X-Axis e Y₁-Axis, à direita.



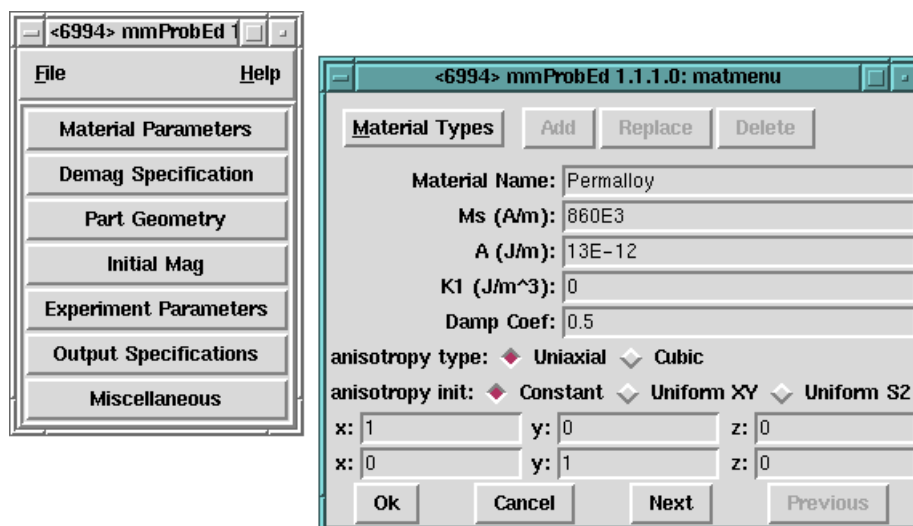
Fonte: Produzida por [28].

A diferença entre *mmDisp* e *mmGraph* está nos dados, que estão evoluindo num gráfico.

Os dados são fornecidos ao *mmGraph* conforme são calculados pelo programa. Com isso, há a possibilidade de selecionar as variáveis, que serão plotadas nas opções X , Y_1 e Y_2 desta janela, Figura 27.

5. *mmProbEd* oferece ao usuário uma interface de criação e edição dos problemas micromagnéticos no formato: *Micromagnetic Input format* (MIF). Também pode funcionar como servidor, em que são definidos os parâmetros do problema para executar o *mmSolve2D*. Na Figura 28, são mostradas as janelas do *mmProbEd* utilizadas para definir o tipo de problema.

Figura 28 – Janela *mmProbEd*, à esquerda, e a janela acoplada, à direita, para a definição do problema magnético.

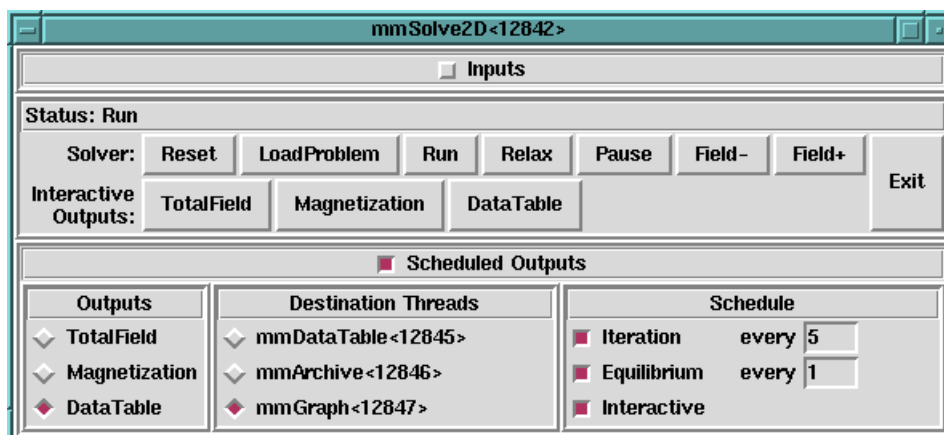


Fonte: [28].

É necessário informar os parâmetros do material, como: magnetização de saturação (M_S), constante de *exchange* (A) e constante de anisotropia (K), que dependem do tipo de simetria e material utilizado, sendo necessário definir o tipo de anisotropia magnetocristalina (uniaxial, cúbica) e os eixos.

6. *mmSolve2D* resolve o problema em uma grade bi-dimensional de células quadradas, esquematizada na Figura 29. Dentro da arquitetura *OOMMF*, *mmSolve2D* é tanto um servidor quanto um cliente. O *mmSolve2D* é um cliente do servidor de descrição de problemas, aplicativos de exibição e armazenamento de tabela de dados, além dos aplicativos de exibição e armazenamento de campos vetoriais. *mmSolve2D* é o servidor de controle de *solver* e é através deste serviço que *mmLaunch* fornece uma janela de interface do usuário (Figura 29) no *mmSolve2D*.

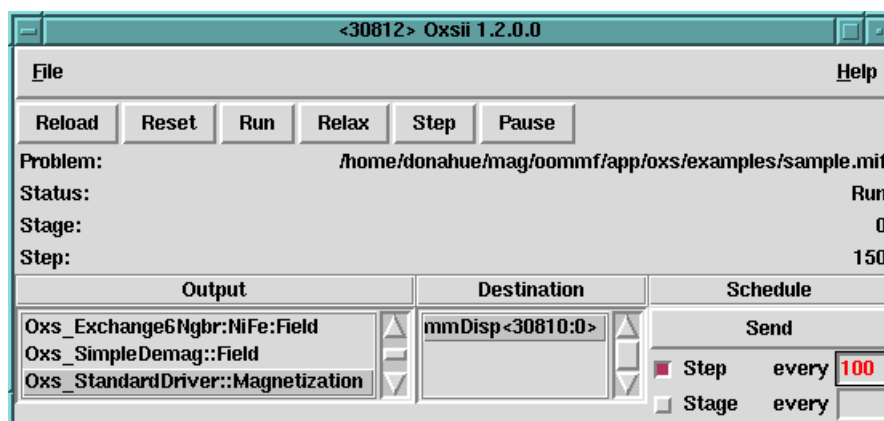
Figura 29 – Janela *mmSolve2D* usada na resolução do problema micromagnético.



Fonte: Produzida por [28].

7. O aplicativo *OXSii* é a interface de usuário gráfica e interativa para o mecanismo de computação micromagnética *Oxs*. Dentro da arquitetura *OOMMF*, o *Oxsii* é tanto um servidor como um aplicativo cliente. Na Figura 30 aparece uma esquematização do *OXSii*.

Figura 30 – Janela *OXSii* usada na resolução de problemas 3D.



Fonte: Produzida por [28].

O movimento da magnetização de cada região é governado pela equação de Landau, Lifshitz e Gilbert em conjunto com as equações de Maxwell, como discutido em seções anteriores, de maneira que o comportamento da amostra é resultado da solução de um sistema de várias equações. Com isso, este procedimento se trata de uma simulação das propriedades magnéticas de uma amostra, ou seja, uma simulação micromagnética [89]. As linhas de comando, escritas no *script* para o OOMMF, encontram-se organizadas no Apêndice A desta tese.

Na próxima seção, será abordado e comentado detalhes sobre outro simulador utilizado neste trabalho, o software de simulação micromagnética *MuMax3*.

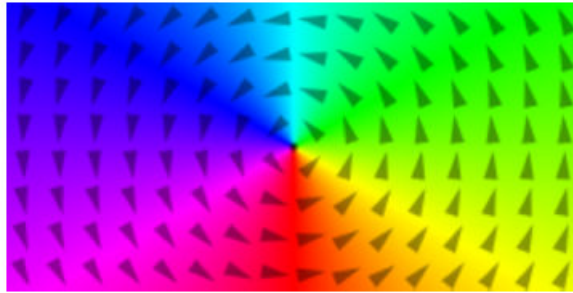
5.3 MUMAX3 - SIMULADOR BASEADO EM GPU

Como mencionado na seção anterior, as simulações micromagnéticas resolvem a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert numericamente através de métodos, como o de diferenças finitas. Como visto, o *OOMMF* é um simulador muito utilizado, por processar os cálculos na CPU, o que limita a quantidade de cálculos que podem ser executados. Sendo assim, têm surgido, recentemente, *softwares* de simulação micromagnética, que processam os dados utilizando GPU (unidade de processamento gráfico). Um destes programas de simulação micromagnética é o *MuMax3*, desenvolvido pelo grupo DyNaMat (Dynamics of Functional Nano Materials) na Universidade de Ghent, Bélgica. O *MuMax3* fornece uma linguagem de *script*, que se torna simples para simulações complexas. Para o propósito das simulações realizadas nesta tese, os parâmetros mais relevantes são: constante de *stiffness* A (*Exchange stiffness*), magnetização de saturação M_s , constantes de anisotropia magnetocristalina uniaxial K_u ou cúbica K_c .

5.3.1 Executando a Simulação

O *MuMax3* oferece algumas opções para executar uma simulação, por exemplo, para uma evolução temporal da magnetização, basta introduzir a função *run (time)*, esta função é utilizada para determinar o intervalo de tempo da simulação.

Figura 31 – Campo vetorial de *output* (saída) numa simulação do *MuMax3*. As cores representam as diferentes orientações do campo vetorial.



Fonte: Produzida por [31].

Para o caso em que a simulação da magnetização seja feita para procurar um estado de mínima energia, a função utilizada é *relax()*. Além disso, a função *relax()* desabilita o termo de precessão na equação de LLG, não havendo a necessidade de definir um alto valor do *damping* (amortecimento). Outras funções podem ser utilizadas; *minimize()* e *runwhile(condition)*. A função *minimize()* se comporta como a *relax()*, mas utiliza o gradiente conjugado para encontrar o mínimo de energia, geralmente, sua utilização torna a simulação mais rápida que no caso de usar *relax()*. A função *minimize* está muito bem adaptada para cálculos de curvas de histerese. O *MuMax3* fornece várias opções para gravar os dados de uma simulação, por exemplo: uma tabela de dados contendo, o tempo e a magnetização (normalizada) nas direções x , y e z . Outras quantidades, como campo efetivo $\vec{H}_{eff}$ ou termos de energia, podem ser adicionados como coluna

na tabela. Todas as quantidades dependentes da posição, como $\vec{m}(\vec{r})$, podem ser salvos como campos vetoriais individuais no formato de dados *.ovf* (*OOMMF Vector Field*). Além disso, a saída definida pelo usuário pode ser gerada livremente, por exemplo, um arquivo *.txt*, armazena os parâmetros. Também é possível tomar *snapshots* instantâneos da magnetização, gerando arquivos *.jpg* diretamente, ou utilizar a opção *mumax3-convert* para gerar imagens a partir dos arquivos *.ovf*. Um arquivo *.ovf* pode ser apresentado como um campo de vetores, como mostra a Figura 31. Áreas com coloração uniforme, implicam uma configuração em que todos os momentos estão alinhados um em relação ao outro. Uma estrutura de mono domínio irá aparecer como única cor uniforme em toda a amostra. Em princípio, qualquer cor pode ser escolhida para indicar a direção da magnetização. Para efeito de comparação com os resultados experimentais, um esquema de cores preto-branco-acinzentado é comumente escolhido, isto ocorre da mesma forma se a magnetização for sondada com técnicas de imagem como Microscopia de Força Magnética (MFM). No entanto, este efeito torna mais difícil diferenciar as direções de magnetização de vários domínios, por exemplo, áreas magnetizadas na direção *y*, negativas e positivas, terão o mesmo tom de cinza.

5.3.2 Script para Simular no MuMax3

O MuMax3 inclui uma interface de usuário baseada em navegador, que possibilita o acompanhamento da simulação, além de poder modificar no próprio navegador.

Figura 32 – Interface da *web* do MuMax3, pode-se visualizar os parâmetros micromagnéticos usados numa simulação.

The screenshot displays the 'mumax3 web interface' with three main sections: geometry, solver, and parameters.

geometry

gridsize:	256	× 64	× 1
cellsize:	1.953125	× 1.953125	× 3 nm³
worldsize:	500	× 125	× 3 nm³

solver

break	status: paused	step:	49107	time:	5.751513e-09s
run	1e-9 s	dt:	4.747699e-14s	fixdt:	0 s
steps	1000	mindt:	0 s	maxdt:	0 s
		err/step:	5.716481e-05	maxerr:	0.0001 /step

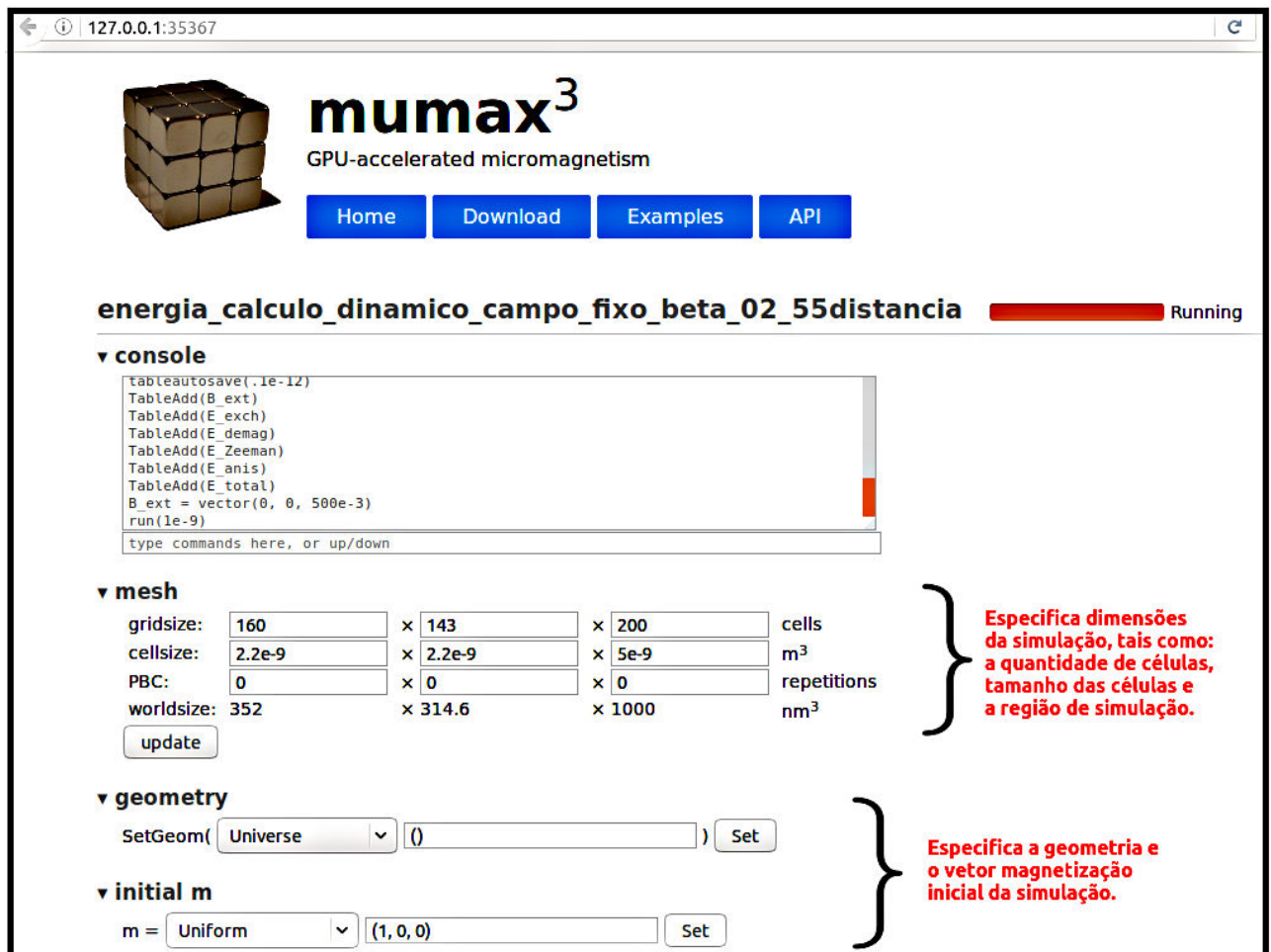
parameters

Region	0		
Aex	1.3e-11	J/m	
B_ext	0.0246	0.0043	0 T
B_ext_perRegion	0.0246	0.0043	0 T
Dex	0	J/m²	
JPol	0	0	0 A/m²
JPol_perRegion	0	0	0 A/m²
Kc1	0	J/m³	
Ku1	0	J/m³	
Msat	800000	A/m	
alpha	0.02		

Fonte: Produzida por [31] e modificada pelo autor.

Na Figura 32, podemos visualizar a interface *web* para manipular os parâmetros micromagnéticos. Assim, nas Figuras 33 e 34, temos as especificações de cada parâmetro na interface, para isso, foi utilizado exemplo de um cálculo dinâmico feito para tubos de níquel, num arranjo hexagonal. A Figura 33 apresenta a interface principal do MuMax3, que mostra os parâmetros micromagnéticos, a geometria, além do estado inicial da magnetização. Na Figura são especificados cada um destes parâmetros.

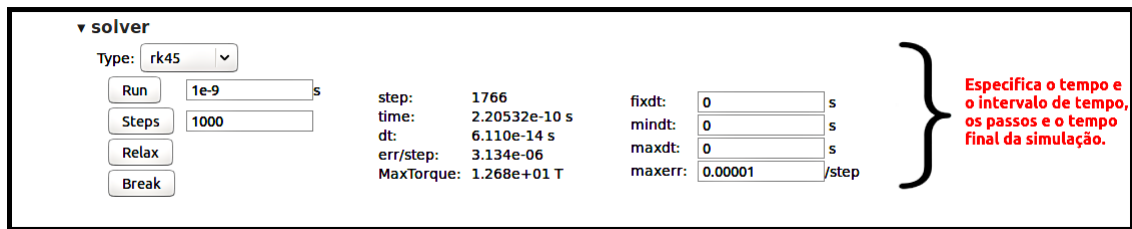
Figura 33 – Interface mostrando parâmetros, como, quantidade e tamanho de células.



Fonte: Produzida por [31] e modificada pelo autor.

A Figura 34, mostra a janela do *solver*. No *script* são definidos os valores que podem depois ser observados no *solver*. Esta janela apresenta os dados referentes ao intervalo de tempo e aos passos para a simulação.

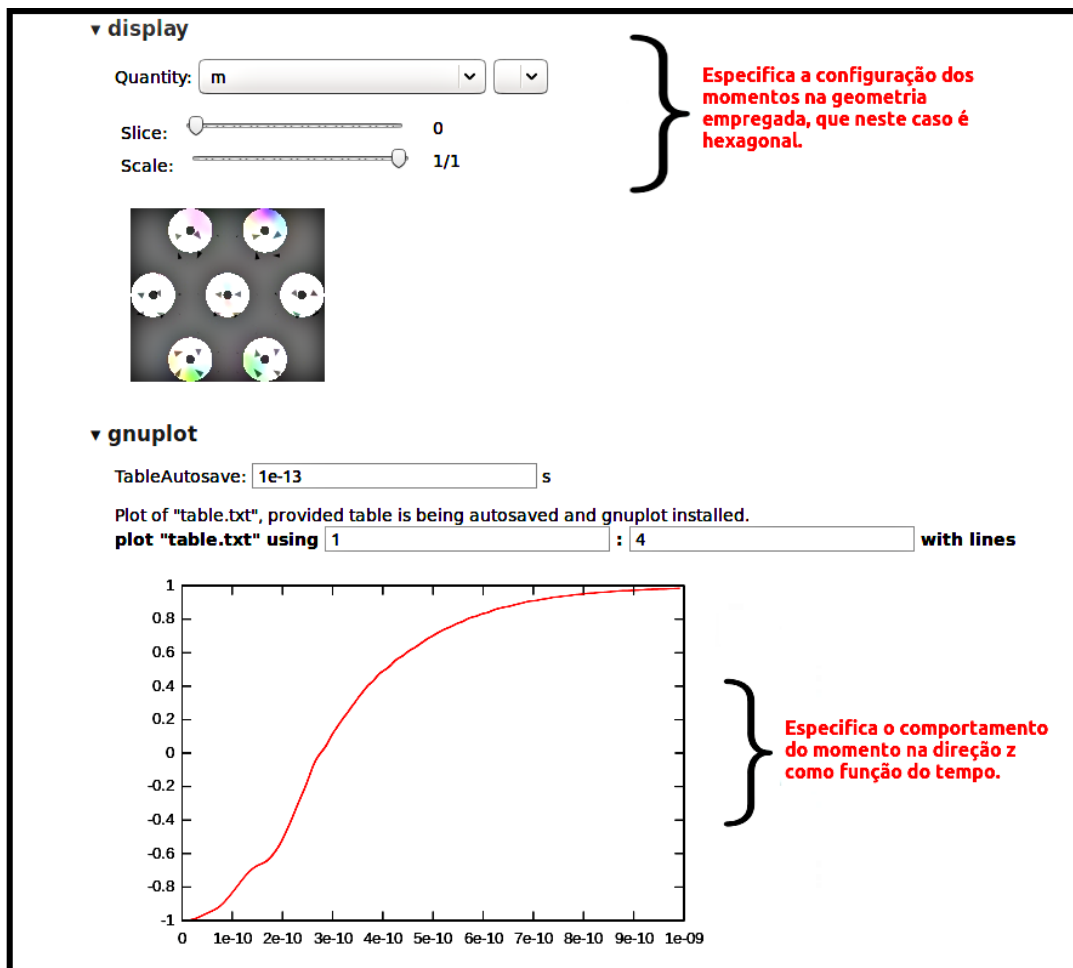
Figura 34 – Interface mostrando o *solver* do MuMax3, especificando parâmetros como o tempo da simulação.



Fonte: Produzida por [31] e modificada pelo autor.

Na Figura 35, observa-se a configuração dos momentos para um arranjo hexagonal e o gráfico do comportamento do momento resultante na direção z como função do tempo. Nesta interface, pode-se plotar também os termos das energias envolvidas no processo de reversão já descritas no Capítulo 3.

Figura 35 – Interface descrevendo a geometria, comportamento dos momentos e gráfico da magnetização como função do tempo.



Fonte: Produzida por [31] e modificada pelo autor.

No gráfico, observa-se a saturação da magnetização para o eixo z em função do tempo, sugerindo que houve reversão da magnetização.

Na Figura 36, têm-se a esquematização dos parâmetros micromagnéticos utilizados na simulação, que especificam o tipo, ou tipos de materiais estudados, além de se poder definir regiões com diferentes materiais.

Figura 36 – Parâmetros micromagnéticos envolvidos na execução da simulação.

▼ parameters

Region: -1

Aex	9e-12	J/m
alpha	0.02	
anisC1	(1, 0, 0)	
anisC2	(0, 1, 0)	
anisU	(0, 0, 0)	
B_ext	(0, 0, 0.5)	T
Dbulk	0	J/m ²
Dind	0	J/m ²
EpsilonPrime	0	
FixedLayer	(0, 0, 0)	
frozenSpins	0	
J	(0, 0, 0)	A/m ²
Kc1	-5700	J/m ³
Kc2	0	J/m ³
Kc3	0	J/m ³
Ku1	0	J/m ³
Ku2	0	J/m ³
Lambda	1	
MFMDipole	0.001	m
MFMLift	5e-8	m
Msat	490000	A/m
NoDemagSpins	0	
Pol	1	
Temp	0	K
xi	0	

Especifica os parâmetros micromagnéticos que caracterizam cada material, neste caso é utilizado parâmetros para o níquel, tais como: constante de troca e amortecimento, direções da anisotropia e campo externo.

Constante de anisotropia cúbica e magnetização de saturação.

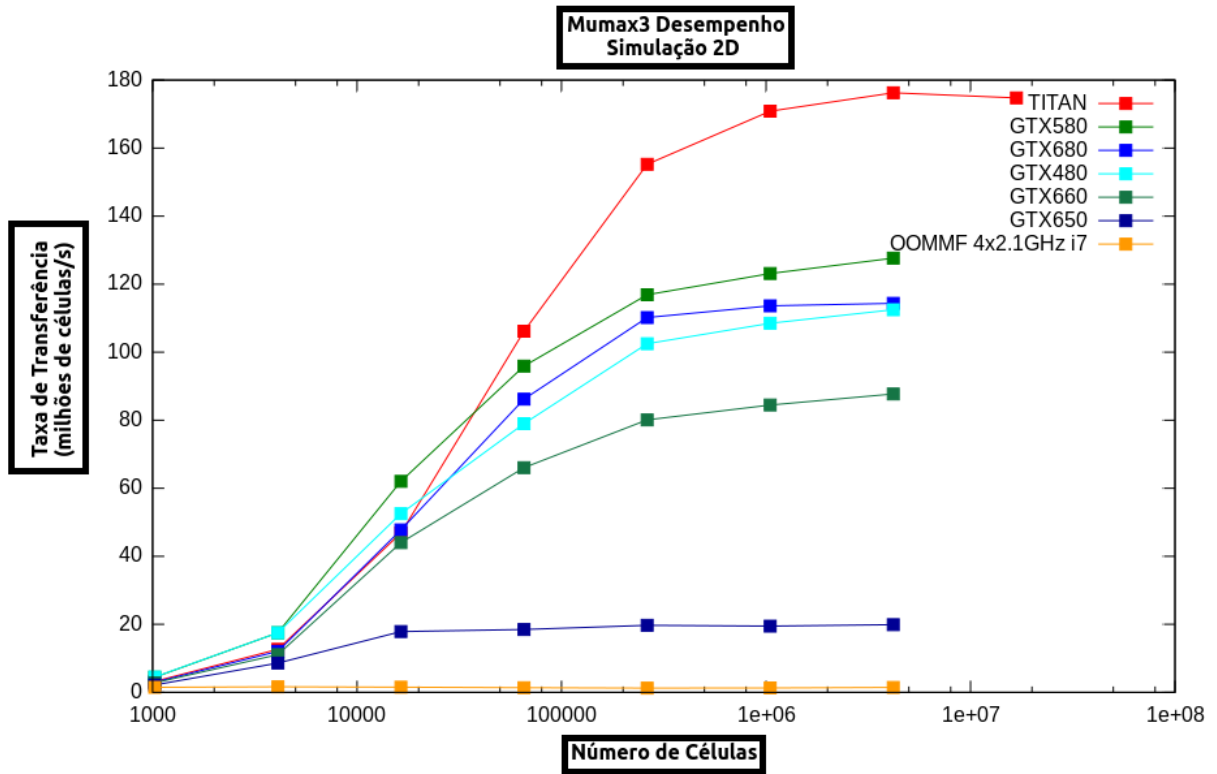
mumax 3.9.1c linux amd64 go1.5.1 (gc)
 CUDA 6050 GeForce GTX 660 Ti(2047MB) cc3.0 (23 MB free)
 © 2013 Arne Vansteenkiste, DyNaMat LAB, UGent.

Fonte: Produzida por [31] e modificada pelo autor.

Os dois simuladores apresentados até aqui podem ser comparados desde muitos aspectos, como por exemplo, o rendimento (taxa de transferência) das células processadas por segundo. Na Figura 37, é observado o desempenho da simulação micromagnética, em que a taxa de transferência possui uma dependência do número de células, que ao comparar dois dos gráficos, o TITAN e o OOMMF, o TITAN possui maior taxa de transferência, possibilitando um desempenho muito melhor.

Para executar simulações no *MuMax3*, precisa-se usar um *driver* gráfico patentado pela NVIDIA [90], em que o critério de referência, observado na Figura 37, pode orientar a escolha da GPU, sendo que quanto maior o rendimento da GPU, maior é seu preço no mercado.

Figura 37 – Esquematisação do desempenho da simulação do OOMMF e MuMax3.



Fonte: Figura produzida por [31] e modificada pelo autor.

5.3.2.1 Rotina de cálculo para os *softwares* OOMMF e MuMax3

Após as explicações sobre os códigos e *scripts* dos *softwares* OOMMF e o MuMax3, é possível estruturar a rotina dos cálculos computacionais realizados neste trabalho.

1. Definindo o Sistema Físico - construção do sistema físico de interesse e suas características. Nesse ponto, torna-se necessária a definição da geometria e dos parâmetros do material, bem como as condições iniciais da magnetização.
2. Caracterização do Estado Magnético de Equilíbrio - Obtida através dos cálculos do campo interno e externo que atuam sobre o sistema.
3. Integração temporal da equação LLG - Campo efetivo, descrito no item 2, é incluído na equação LLG, e submetido ao método de integração e normalizado.
4. Critérios de Equilíbrio - Devemos verificar se o estado atingido pelo sistema no término da evolução é estável. A verificação pode ser feita de diferentes maneiras; permitir que o sistema evolua até um limite temporal de cálculo ou utilizar um critério, que verifica o

torque resultante atuando sobre cada célula magnética. Esse critério de equilíbrio é descrito mediante o termo:

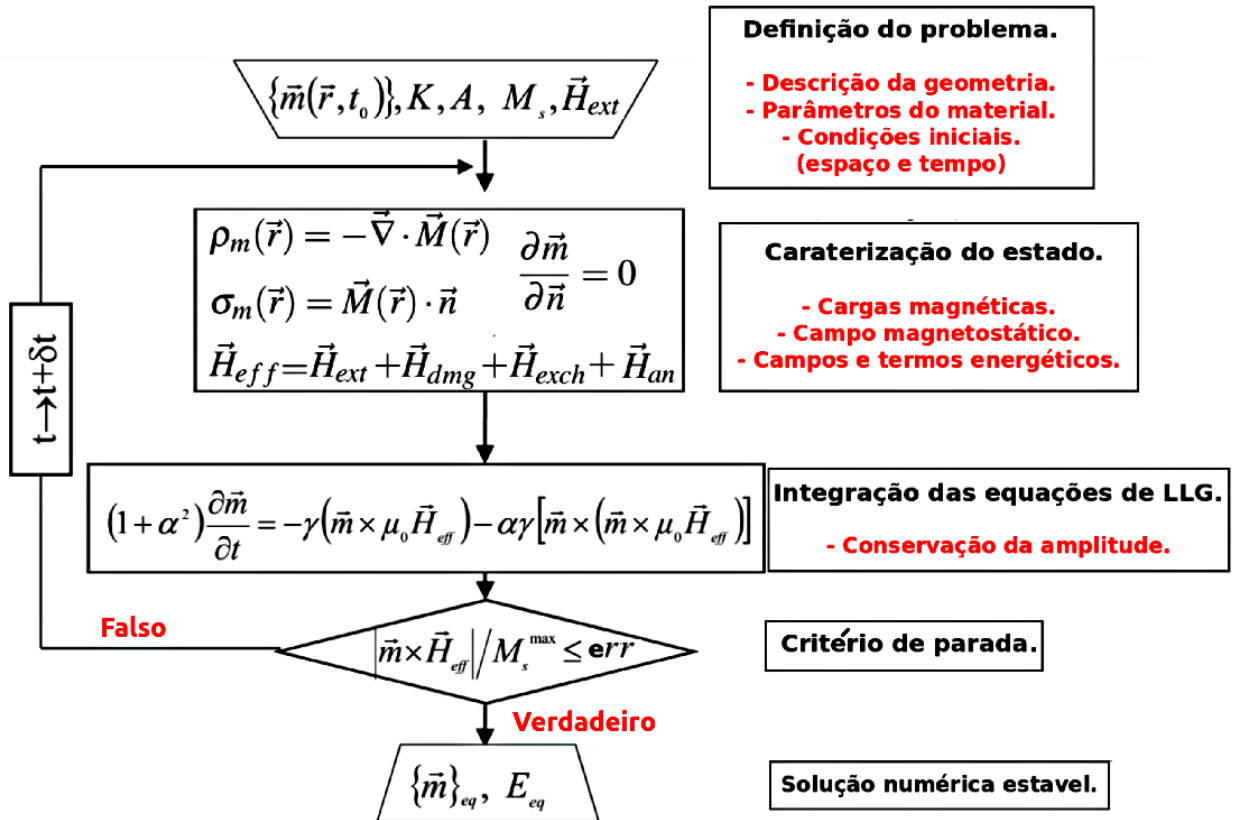
$$\left| \frac{\vec{m} \times \vec{H}_{eff}}{M_s} \right| \leq err, \quad (5.1)$$

em que err deve ser predeterminado com valores no intervalo $[0,001 : 0,00001]$.

5. Estado estável - Caso o item 4 seja satisfeito, o estado atingido é tratado como estável e a evolução temporal não é mais necessária. Finalizando, o simulador calcula a soma da magnetização de cada uma das células magnéticas que compõem o sistema.

Após a definição da rotina de cálculo, podemos esquematizar um fluxograma, Figura 38, da simulação computacional que foi utilizada nos *softwares* OOMMF e *MuMax3*. Neste fluxograma, mostra-se como são as etapas do processo de simulação micromagnética.

Figura 38 – Fluxograma da simulação computacional é usado para os *softwares* OOMMF e *MuMax3*.



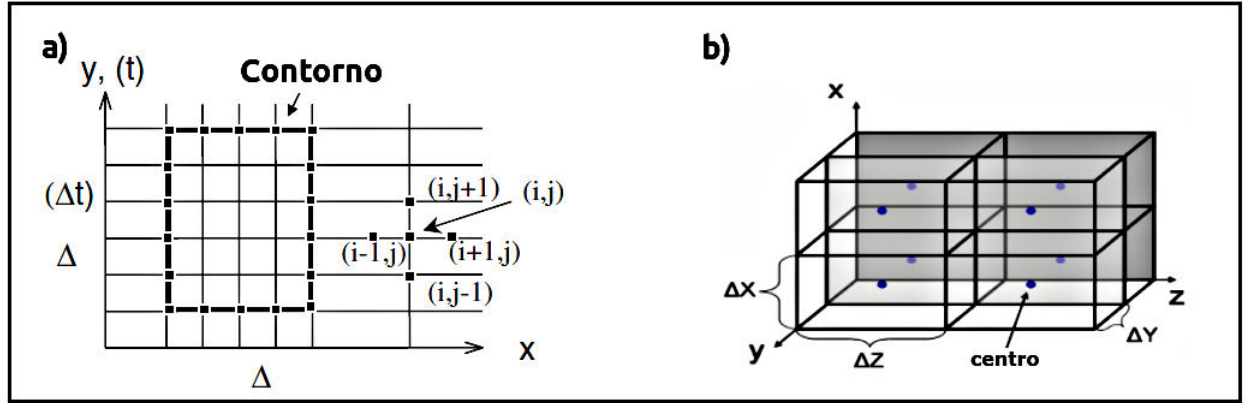
Fonte: Produzida pelo autor.

As linhas de comando da simulação micromagnética do *MuMax3*, encontram-se detalhadas no Apêndice B. O *OOMMF* e *MuMax3* utilizam diferença finita, sendo assim, iremos apresentar na próxima seção o método aplicado ao micromagnetismo.

5.4 MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS E DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DO MICROMAGNETISMO

O método de diferenças finitas (MDF) é amplamente utilizado para resolver e encontrar valores aproximados de soluções de problemas envolvendo equações diferenciais parciais. A ideia fundamental do MDF é discretizar uma função $f(x)$ e o seu domínio espacial em pontos da malha x_i e assim substituir as derivadas espaciais por diferenças finitas [35] entre os pontos da malha. Uma representação da malha regular bi e tridimensional é mostrada na Figura 39 dividida em cubóides de volume ΔV . O espaço é subdividido em uma malha regular, bi e tri-dimensional, em que o valor da função no centro é a média de todos os pontos do interior de ΔV .

Figura 39 – Esquematisação da malha regular de um cubóide usando o MDF. Para a figura (a), tem-se a representação bi-dimensional da malha regular e na (b) a representação tri-dimensional.



Fonte: Produzida por [91] e modificada pelo autor.

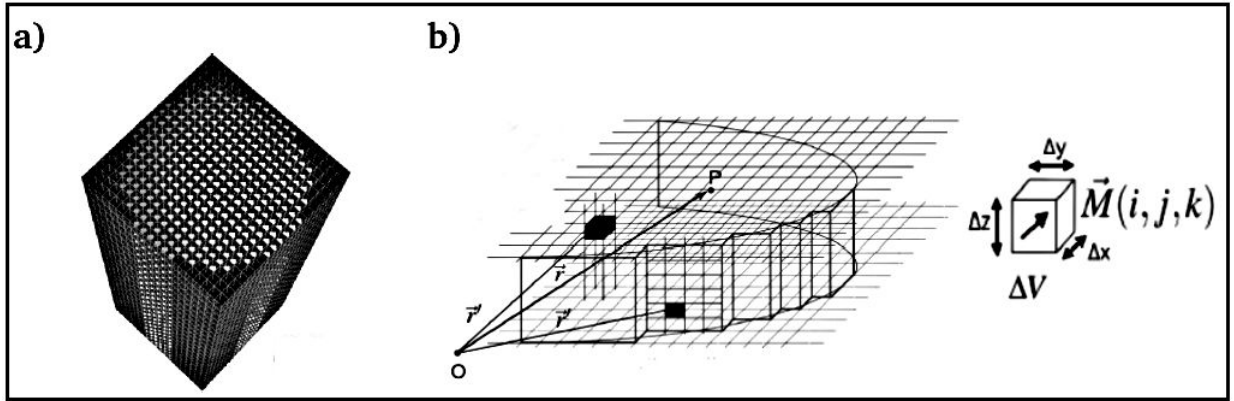
O método consiste em aproximar as derivadas parciais de uma função $f(r,t)$ por quocientes de diferenças finitas δx , δy , δz e δt de acordo com a equação:

$$f(x + \Delta x, y, z, t) = f(x, y, z, t) + (\Delta x) \frac{\partial f(x, y, z, t)}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 f(x, y, z, t)}{\partial x^2} \quad (5.2)$$

O processo de substituir derivadas parciais por quocientes MDF é conhecido como processo de discretização, e o erro associado é conhecido como erro de discretização. Uma equação diferencial parcial pode ser transformada em um sistema de equações algébricas, substituindo as derivadas parciais por aproximações do MDF. O sistema de equações algébricas pode ser resolvido numericamente por um processo iterativo, com isso, obtém-se uma solução aproximada. O método é amplamente usado para resolver equações elípticas, hiperbólicas e parabólicas. A maior parte das simulações micromagnéticas conta com o método de diferenças finitas [92]. Em nosso trabalho é utilizado o MDF, uma vez que é feita a discretização espacial,

algumas considerações devem ser feitas, em relação ao tamanho de cada célula de volume ΔV (Figura 40). Essencialmente, o tamanho característico deve ser maior do que a escala atômica, mas não demasiado grande, a fim de cumprir com o formalismo do micromagnetismo. Em outras palavras, cada célula deve conter um número suficiente de átomos, a fim de considerar que o módulo da magnetização M_S é constante em cada célula, ou seja, a média em todos os pontos, 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 de comprimento de troca. Portanto, para resolver um problema numericamente, o tamanho de cada célula computacional, tem que ser suficientemente pequeno em relação ao comprimento de troca.

Figura 40 – Figura esquemática da malha para o MDF, em (a) vemos a configuração do método, em (b) a 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: Produzido por [35,93] e modificado pelo autor

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 parâmetros servem como critério. O comprimento de troca l_{ex} e a largura da parede l_w , são dadas respetivamente por:

$$l_{ex} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}} \quad (5.3)$$

e

$$l_w = \sqrt{\frac{A}{K}}, \quad (5.4)$$

em que A é a constante de troca e K é a constante de anisotropia magnetocristalina do material.

5.4.1 Discretização das Equações Micromagnéticas

Esta seção é dedicada a encontrar as contrapartes discretas das funções contínuas que descrevem as contribuições para o campo efetivo $\vec{H}_{eff}$, em cada célula computacional. A partir da função contínua da densidade de energia de troca é possível expressar para cada célula da malha computacional (i, j, k) :

$$e_{exc}(i, j, k) = A \left[(\nabla m_x(i, j, k))^2 + (\nabla m_y(i, j, k))^2 + (\nabla m_z(i, j, k))^2 \right], \quad (5.5)$$

sabendo,

$$(\nabla m_n)^2 = \left(\frac{\partial m_n}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_n}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial m_n}{\partial z} \right)^2. \quad (5.6)$$

Na aproximação usando MDF, as derivadas são substituídas por relações no centro de cada célula da malha, pelo que a expressão pode ser escrita como

$$(\nabla m_n)^2 = \left(\frac{\Delta_x m_n}{\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{\Delta_y m_n}{\Delta y} \right)^2 + \left(\frac{\Delta_z m_n}{\Delta z} \right)^2, \quad (5.7)$$

em que Δx , Δy e Δz são as distâncias, nas três dimensões, entre cada célula da malha, enquanto que Δ_x , Δ_y e Δ_z são os operadores de MDF em cada direção espacial. Considerando o vetor 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 da equação 5.7 pode ser escrito como,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\Delta_x m_n}{\Delta x} \right)^2 &= \left(\frac{m_x(i+1, j, k) - m_x(i, j, k)}{\Delta x} \right)^2 \\ \left(\frac{\Delta_x m_n}{\Delta x} \right)^2 &= \frac{m_x^2(i+1, j, k) - 2m_x(i+1, j, k)m_x(i, j, k) + m_x^2(i, j, k)}{\Delta x} \end{aligned} \quad (5.8)$$

O segundo e terceiro termos da equação 5.7 podem ser obtidos de um modo semelhante. Por outro lado, $|\vec{m}(i, j, k)| = 1$ para todas as células e a equação 5.8 assume a forma:

$$\left(\frac{\Delta_x m_x}{\Delta x} \right)^2 = \frac{1}{\Delta x^2} [2 - 2m_x(i+1, j, k)m_x(i, j, k)]. \quad (5.9)$$

Um cálculo semelhante pode ser realizado para obter as relações para os primeiros vizinhos nas orientações positivas dos eixos y e z . Naturalmente, os primeiros vizinhos no sentido negativo de cada componente cartesiana também devem ser considerados, e a partir da equação 5.7 com $n = x$,

$$\begin{aligned} (\nabla m_x)^2 &= \frac{1}{\Delta x^2} [(2 - 2m_x(i+1, j, k)m_x(i, j, k)) + (2 - 2m_x(i-1, j, k)m_x(i, j, k))] + \\ &+ \frac{1}{\Delta y^2} [(2 - 2m_x(i, j+1, k)m_x(i, j, k)) + (2 - 2m_x(i, j-1, k)m_x(i, j, k))] + \\ &+ \frac{1}{\Delta z^2} [(2 - 2m_x(i, j, k+1)m_x(i, j, k)) + (2 - 2m_x(i, j, k-1)m_x(i, j, k))] \end{aligned} \quad (5.10)$$

e da mesma forma para $(\nabla m_y)^2$ e $(\nabla m_z)^2$. A partir da equação 5.10 a densidade de energia de troca em cada ponto da malha pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} e_{exc}(i, j, k) = & \frac{2A}{(\Delta x)^2} \sum_{i', j', k'}^{fN} [1 - \vec{m}(i, j, k) \cdot \vec{m}(i', j', k')] + \\ & + \frac{2A}{(\Delta y)^2} \sum_{i', j', k'}^{fN} [1 - \vec{m}(i, j, k) \cdot \vec{m}(i', j', k')] + \\ & + \frac{2A}{(\Delta z)^2} \sum_{i', j', k'}^{fN} [1 - \vec{m}(i, j, k) \cdot \vec{m}(i', j', k')], \end{aligned} \quad (5.11)$$

em que fN é o número de primeiros vizinhos em cada direção cartesiana. A energia de troca total pode ser aproximada por meio de,

$$E_{exc} = \int_V e_{exc} dV \cong \sum_{i, j, k}^N e_{exc}(i, j, k) \Delta V, \quad (5.12)$$

sendo $N = N_x N_y N_z$ o número total de células do volume discretizado. A representação discreta da derivada funcional $(\frac{\delta}{\delta m})$ torna-se a derivada parcial $(\frac{\partial}{\partial m})$, se for considerado que os ângulos entre a magnetização de uma determinada célula e seus vizinhos são pequenos. Por conseguinte, a contribuição ao campo efetivo devido à interação de troca pode ser calculada a partir da seguinte equação:

$$\vec{H}_{exc}(i, j, k) = \frac{-1}{\mu_0 M_S} \frac{\partial e_{exc}(i, j, k)}{\partial \vec{m}(i, j, k)}. \quad (5.13)$$

Fazendo as substituições, encontra-se a expressão:

$$\begin{aligned} \vec{H}_{exc}(i, j, k) = & \frac{2A}{\mu_0 M_S} \left\{ \frac{\vec{m}(i+1, j, k) + \vec{m}(i-1, j, k)}{(\Delta x)^2} + \frac{\vec{m}(i, j+1, k) + \vec{m}(i, j-1, k)}{(\Delta y)^2} \right\} + \\ & + \frac{2A}{\mu_0 M_S} \left\{ \frac{\vec{m}(i, j, k+1) + \vec{m}(i, j, k-1)}{(\Delta z)^2} \right\}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Outro aspeto importante resultante da variação da energia de troca, além da contribuição para o campo efetivo, são as condições de fronteira (CF) sobre a superfície da amostra [35,91,94]. Nestas discretizações, a anisotropia de superfície e intercâmbio entre camadas não são consideradas, as CF usadas se reduzem a:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial \vec{n}} = 0. \quad (5.15)$$

Para o termo de anisotropia magnetocristalina, tem-se a discretização da função densidade de energia de anisotropia uniaxial

$$e_{an,u}(i, j, k) = K [1 - (\vec{m}(i, j, k) \cdot \vec{u}_k)^2], \quad (5.16)$$

em que $\vec{u}_k$ é o vetor unitário na direção de mínimo $e_{an,u}$. Com isso, a energia magnetocristalina em sua forma discretizada é,

$$E_{an,u} = \int_V e_{an,u} dV \cong \sum_{i, j, k}^N e_{an,u}(i, j, k) \Delta V. \quad (5.17)$$

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

$$\vec{H}_{an,u}(i, j, k) = \frac{-1}{\mu_0 M_S} \frac{\partial e_{an,u}(i, j, k)}{\partial \vec{m}(i, j, k)} = \frac{2K}{\mu_0 M_S} [\vec{m}(i, j, k) \cdot \vec{u}_k] \vec{u}_k. \quad (5.18)$$

No caso da anisotropia magnetocristalina cúbica, a discretização é:

$$E_{an,cub}(i, j, k) \cong \sum_{i,j,k}^N e_{an,cub}(i, j, k) \Delta V, \quad (5.19)$$

e sua contribuição para o campo efetivo é:

$$\vec{H}_{an,cub}(i, j, k) = \frac{-2D(i, j, k)m(i, j, k)}{\mu_0 M_S}, \quad (5.20)$$

em que $D(i, j, k)$ é uma matriz diagonal com os elementos:

$$\begin{aligned} D_{11} &= K_1 [m_y^2(i, j, k) + m_z^2(i, j, k)] \\ D_{22} &= K_1 [m_x^2(i, j, k) + m_z^2(i, j, k)] \\ D_{33} &= K_1 [m_x^2(i, j, k) + m_y^2(i, j, k)] \end{aligned} \quad (5.21)$$

Dando continuidade à discretização dos termos que contribuem para o campo efetivo, tratamos agora da discretização de outras contribuições energéticas. Para a discretização do campo magnetostático, $\vec{H}_{dmg}(\vec{r})$, considera-se o campo magnetostático em um ponto $\vec{r}(i, j, k)$, em que o vetor magnetização, $\vec{m}(\vec{r})$, possui dependência de todos os outros pontos, $\vec{r}(i'; j'; k')$, que se encontram no interior do volume da amostra. Com isso,

$$\vec{H}_{dmg}(i, j, k) = -M_S \sum_{\beta}^{(x,y,z)} \sum_{i'j'k'}^N \mathcal{N}_{\alpha\beta}(i - i', j - j', k - k') \cdot \vec{m}_{\beta}(i', j', k'), \quad (5.22)$$

sendo a soma sobre todas as células N e $\mathcal{N}_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}')$ é um tensor simétrico 3×3 , chamado tensor de desmagnetização definido pela relação:

$$\mathcal{N}_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \oint_{S_r} \oint_{S_{r'}} \frac{d\vec{S}_r d\vec{S}_{r'}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (5.23)$$

Para estes casos, têm-se que a magnetização $\vec{m}(i, j, k)$, em cada célula (i, j, k) , da malha é uniforme, o campo magnetostático médio em cada célula é igual a 5.22 [91]. Na equação 5.23 S_r e $S_{r'}$ representam as superfícies das células nas respectivas posições $\vec{r}$ e $\vec{r}'$. Como observado na equação 5.22, a avaliação do campo magnético estático, $\vec{H}_{dmg}$, exige a soma em todas as células da amostra, o que resulta em um total de N^2 operações. Os outros termos que contribuem para a equação que descreve a dinâmica requerem, apenas, de N operações, uma vez que são interações locais ou de curto alcance. Como resultado, simular uma grande quantidade de células computacionais, torna a avaliação da equação 5.22 muito complicada. No entanto, como o tensor desmagnetização $\mathcal{N}_{\alpha\beta}$ depende da posição relativa entre as células computacionais, $(\vec{r} - \vec{r}')$ e

da geometria da amostra utilizada, a equação 5.22 pode ser uma convolução discreta de $\mathcal{N}_{\alpha\beta}$ com o vetor magnetização $\vec{m}$. Com estas análises, tem-se que o campo magnetostático pode ser calculado de forma mais eficiente, utilizando as técnicas da Transformada Rápida de Fourier (*FFT*) [95], e utilizar *FFT* é mais eficaz, pois no espaço de Fourier, a convolução se torna um produto simples. Com isso, cada coordenada cartesiana $\vec{H}_{dmg,n}, (n = x, y, z)$ possui a forma de uma convolução discreta no espaço de Fourier:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[H_{dmg,x}(i, j, k)] &= \tilde{H}_{dmg,x}(k_x, k_y, k_z) = \mathcal{F}[\mathcal{N}(i, j, k)] \mathcal{F}[m_\beta(i, j, k)] = \\ &= \tilde{\mathcal{N}}_{\alpha\beta}(k_x, k_y, k_z) \tilde{m}_\beta(k_x, k_y, k_z). \end{aligned} \quad (5.24)$$

Neste caso (k_x, k_y, k_z) são as coordenadas no espaço de Fourier e de forma semelhante às componentes $\vec{H}_{dmg,y}$ e $\vec{H}_{dmg,z}$ podem ser calculadas. Portanto, para calcular o campo magnetostático, determina-se o tensor de desmagnetização, $\mathcal{N}_{\alpha\beta}$, e depois se aplica a Transformada de Fourier. Uma vez que a magnetização em cada posição da malha é conhecida, a FFT é realizada, seguido pelo produto no espaço de Fourier, como descrito na equação 5.24. Para obter o valor do campo magnetostático, no espaço "real", é realizada a FFT inversa da equação 5.24, com isso:

$$H_{dmg,x}(i, j, k) = \mathcal{F}^{-1}[\tilde{H}_{dmg,x}(k_x, k_y, k_z)]. \quad (5.25)$$

No cálculo final, têm-se seis FFT (três diretas e três inversas para cada componente cartesiana de $\vec{m}$), somado os três produtos para cada componente de $\vec{H}_{dmg}$. A densidade de energia magnetostática pode ser calculada, numericamente, a partir da equação 2.16, e em cada célula, teremos,

$$e_{dmg}(i, j, k) = \frac{-1}{2} \mu_0 M_S [\vec{H}_{dmg}(i, j, k) \cdot \vec{m}(i, j, k)] \quad (5.26)$$

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

$$E_{dmg} = \int_V e_{dmg}(\vec{r}) dV \simeq \sum_{i,j,k}^N e_{dmg}(\vec{r}) \Delta V. \quad (5.27)$$

Finalizando as análises da discretização para cada contribuição da energia no campo efetivo, tem-se a energia Zeeman. Como descrito no Capítulo 3, a energia Zeeman ocorre devido à aplicação de um campo magnético externo. Com isso, essa interação é considerada local, assim a discretização da densidade de energia e a contribuição ao campo efetivo são obtidas sem muita dificuldade. A densidade de energia Zeeman do sistema pode ser calculada numericamente a partir da equação:

$$E_{Zee} = \int_V e_{Zee}(\vec{r}) dV = -\mu_0 M_S \sum_{i,j,k}^N \vec{H}_{ext}(i, j, k) \cdot \vec{m}(i, j, k), \quad (5.28)$$

em que o módulo do campo magnético aplicado externamente, $\vec{H}_{ext}$, é um parâmetro inicial.

5.4.2 Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert

No estudo das soluções numéricas da equação de LLG, com as componentes de campo efetivo, pode-se implementar diferentes algoritmos para resoluções [96]. Um ponto importante

a ser considerado na tentativa de resolver a equação LLG é a exatidão tanto no espaço como no tempo. Nesta busca de obter soluções numéricas, encontram-se alguns algoritmos, como o esquema de integração semi-implícito de Crank-Nicholson [35] e os algoritmos preditor-corretor, o algoritmo de Runge-Kutta [96,97]. De todos os métodos mais utilizados para integrar equações diferenciais ordinárias, o método Runge-Kutta é o mais aplicado, pois representa um algoritmo iterativo de passo simples, e pode ser simbolizado como:

$$y_{n+1} = G(y_n), n \leq 0. \quad (5.29)$$

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 [97]. Por exemplo, num esquema de ordem 4 (em que são realizadas 4 avaliações da função $f(x, y)$) pode ser:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, y_n) \\ k_2 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right) \\ k_3 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right) \\ k_4 &= hf(x_n + h, y_n + k_3) \\ y_{n+1} &\approx y_n + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} + O(h^5) \end{aligned} \quad , \quad (5.30)$$

em que $f(x_n, y_n)$ 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 [97]:

$$e_h = \frac{y_h - y_{2h}}{15}. \quad (5.31)$$

Sendo assim, pode-se escrever este algoritmo com o formalismo micromagnético para a equação 2.30, como:

$$\begin{aligned} k_1 &= \delta t f(t, \vec{m}(t)) \\ k_2 &= \delta t f\left(t + \frac{\delta t}{2}, \vec{m}(t) + \frac{k_1}{2}\right) \\ k_3 &= \delta t f\left(t + \frac{\delta t}{2}, \vec{m}(t) + \frac{k_2}{2}\right) \\ k_4 &= \delta t f(t + \delta t, \vec{m}(t) + k_3) \\ \vec{m}(t + \delta t) &\approx \vec{m}(t) + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} + O(h^5) \end{aligned} \quad , \quad (5.32)$$

$f(t, \vec{m}(t))$ é o membro direito da equação 2.30. 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 $f(t, \vec{m}(t))$. Considerando que o método de Runge-Kutta não mantém o módulo da magnetização constante,

a magnetização deve ser renormalizada em cada passo k_n . Portanto, ao se Resolver a equação 5.32 para cada célula da amostra discretizada, obtem-se a solução numérica da equação dinâmica 2.30 para cada instante δt .

No próximo Capítulo, discutiremos os resultados encontrados para um único nanotubo isolado, e também para um arranjo hexagonal de nanotubos de níquel, utilizando os *softwares* de simulação micromagnética OOMMF e MuMax3.

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

6.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS DA SIMULAÇÃO

Por meio dos simuladores *OOMMF* e *MuMax3*, obtivemos novos resultados, para um nanotubo isolado e um arranjo hexagonal de nanotubos de níquel, referente a cálculos estáticos e dinâmicos. Utilizando *OOMMF*, foi feita a investigação do comportamento magnético de um nanotubo ferromagnético de Níquel isolado, e com o *MuMax3*, investigamos um arranjo hexagonal de nanotubos magnéticos do mesmo material. Em ambos os simuladores, foram obtidos laços de histerese, coercividade e remanência reduzida como função de parâmetros geométricos, além das energias e momentos em função do tempo. Consideramos interação de troca e contribuição magnetocristalina, no caso do Níquel esta contribuição é cúbica. Também incluímos interação *Zeeman* ao incidir um campo magnético externo e a contribuição magnetostática. Não se consideram efeitos térmicos nas simulações. As propriedades intrínsecas dos materiais e parâmetros da simulação serão apresentados em cada seção.

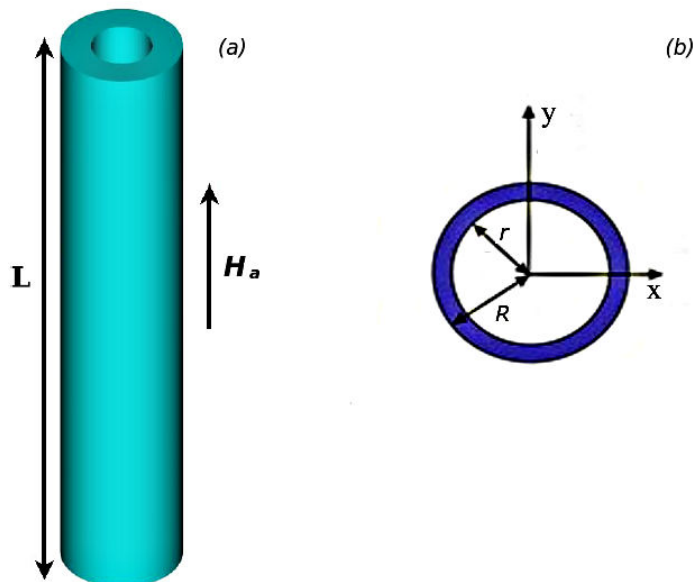
6.2 RESULTADOS DA SIMULAÇÃO COM OOMMF PARA UM NANOTUBO DE NI

Nesta seção estudamos um sistema formado por um único nanotubo, com raio externo (R) de 40 nm e comprimento (L) de 1 μm , sendo estes valores, R e L , enquadrados nos modos de reversão obtidos pelas equações do Capítulo 4, este valor para o raio externo foi utilizado por estar acima do valor crítico, como pode ser observado nas referências [19, 79]. Além dos valores do raio externo e comprimento, o raio interno (r) foi variado entre 0 nm e 30 nm, e com isso, pode-se utilizar a razão $\beta = \frac{r}{R}$ para os cálculos desta seção. O nanotubo ferromagnético é dividido em células cúbicas, que justifica a utilização do MDF, e dentro de cada célula a magnetização é uniforme e a temperatura do sistema é considerada nula [37, 50]. A simulação micromagnética é realizada usando os parâmetros típicos do Níquel: magnetização de saturação, $M_S = 4,85 \times 10^5$ A/m e constante de troca, $A = 9,0 \times 10^{-12}$ J/m. Foi encontrado na literatura que efeitos de discretização são inerentes à metodologia utilizada, por esta razão, o tamanho da célula usada se encontra em torno de valores menores que $5 \times 5 \times 5 \text{ nm}^3$, indicando que os resultados são independentes do tamanho [98–101]. Com isso, o tamanho da célula usada neste tópico é $2,5 \times 2,5 \times 5 \text{ nm}^3$, a eleição da malha na simulação é coerente com a capacidade de cálculo e com o *hardware* disponível, além de se enquadrar na teoria micromagnética, com o valor do tamanho das células menor que o comprimento de troca do Níquel, $l_{ex} = 7,72 \text{ nm}$ [40, 101]. Os resultados obtidos neste tópico são analisados mediante modificações no raio interno do nanotubo e no ângulo do campo magnético aplicado. O estudo foi realizado para se verificar se as soluções para um único tubo são válidas quando analisamos resultados referentes a um arranjo hexagonal de nanotubos.

6.2.1 Dependência angular da coercividade e da remanência reduzida para um nanotubo isolado

Iniciamos a investigação acerca do papel dos parâmetros geométricos, que influenciam a coercividade e a remanência reduzida. Neste tópico, foram modificados o raio interno e o ângulo que o campo aplicado H_a faz com o eixo do nanotubo, com isso, na Figura 41 mostramos a esquematização geométrica do nanotubo. Na Figura 41 (a) assumimos o campo aplicado paralelo ao eixo do nanotubo, eixo Z e na Figura 41 (b) a seção reta do nanotubo no plano XY.

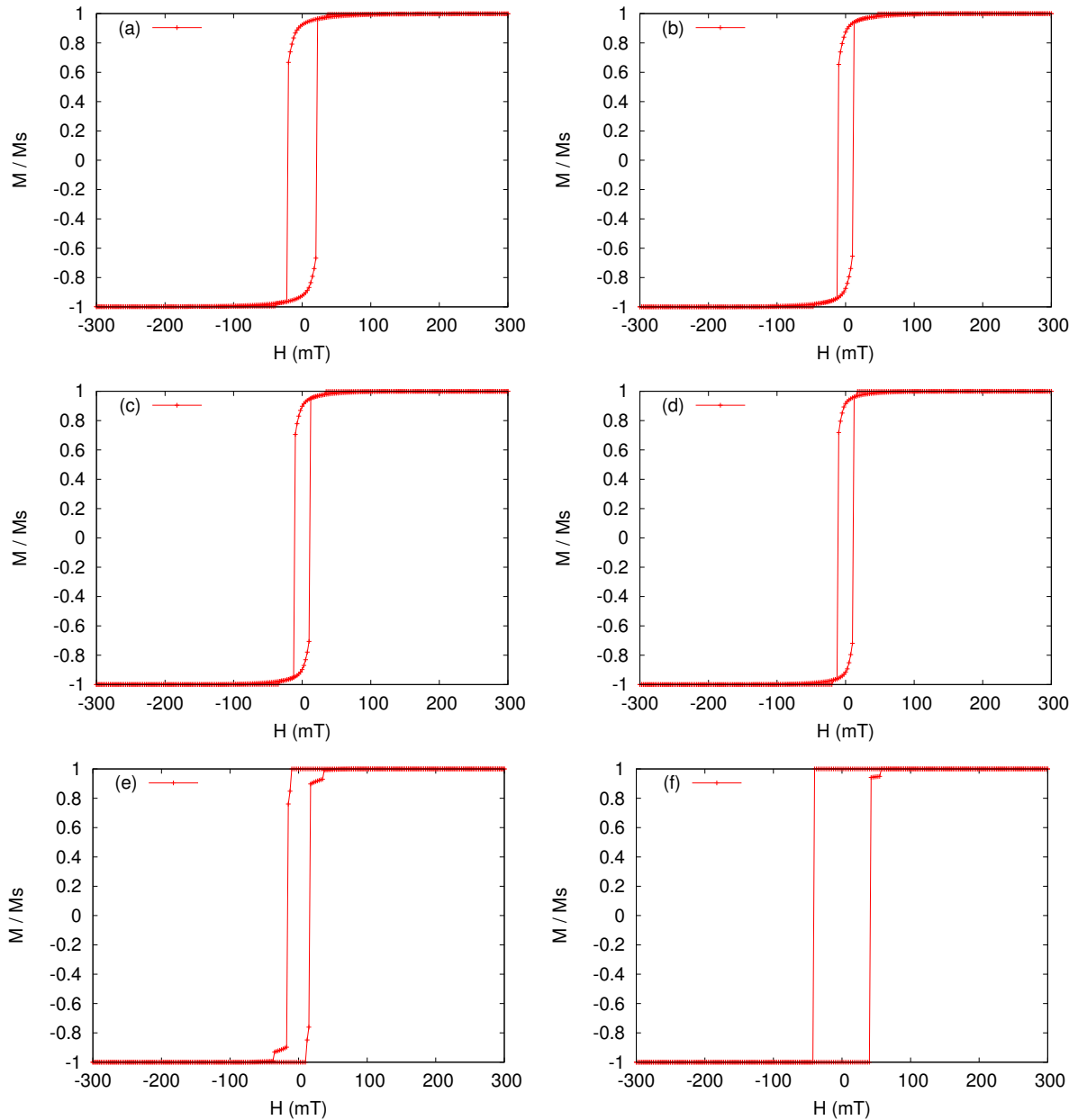
Figura 41 – Esquematização de um nanotubo, (a) especificando seu comprimento L e o campo aplicado H_a . Em (b), mostra-se a seção reta do nanotubo no plano XY, os raios interno r e externo R .



Fonte: Produzida pelo autor.

Considerando as especificações dos parâmetros envolvidos inicialmente neste trabalho, observa-se nas Figuras 42 as curvas de histerese com o campo magnético paralelo ao eixo do nanotubo, eixo Z. Neste caso, o raio externo do nanotubo é 40 nm e os resultados foram feitos com o raio interno nos seguintes valores: 0, 10, 15, 20, 25 e 30 nm, com isso, pode-se calcular a razão $\beta = r/R$. A Figura 42 possibilita observar a ocorrência da reversão da magnetização através de pequenos saltos Barkhausen [102] para as curvas de histerese na Figura 42 (a)-(d), exceto para as Figuras 42 (e) e (f), pois nestas curvas são observados, respectivamente, dois saltos Barkhausen e um único salto Barkhausen. Estes efeitos são esperados devido à anisotropia de forma [63, 103, 104], estando relacionados ao método DF, pois ocorre mudanças na espessura do nanotubo. Além dessas análises, observamos que a razão $\beta > 0,5$, Figura 42 (d), apresenta um aumento no valor da coercividade, com isso, apontando para uma modificação no formato do ciclo de histerese.

Figura 42 – A representação dos ciclos de histerese para as variações da razão β em (a) 0, (b) 0,25, (c) 0,375, (d) 0,5, (e) 0,625 e (f) 0,75.

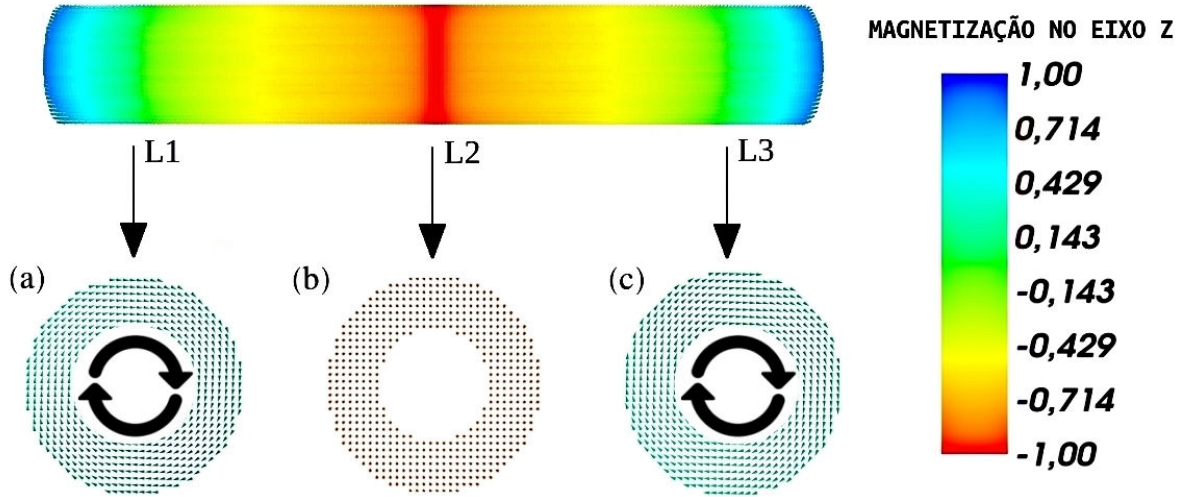


Fonte: Produzida pelo autor.

Para $\beta = 0,75$, observa-se que a curva se assemelha à de um sistema de dois estados. Como visto na literatura, o níquel apresenta anisotropia magnetocristalina pequena, sendo assim, a resposta magnética é dominada pela anisotropia de forma, isto foi comprovado pelo elevado valor da coercividade obtida, Figura 45 (a). Na Figura 45 (b), percebe-se que a remanência reduzida possui altos valores, muito próximos a 1, este fato tem aplicabilidade na fabricação de memórias e de materiais de detecção não invasiva, como pode ser verificado na referência [105]. Observamos que a magnetização, neste nanotubo, reverte-se de forma abrupta, diminuindo inicialmente, indicando a formação de paredes tipo vórtex, como sugere as Figuras 43 (a) e (c), e

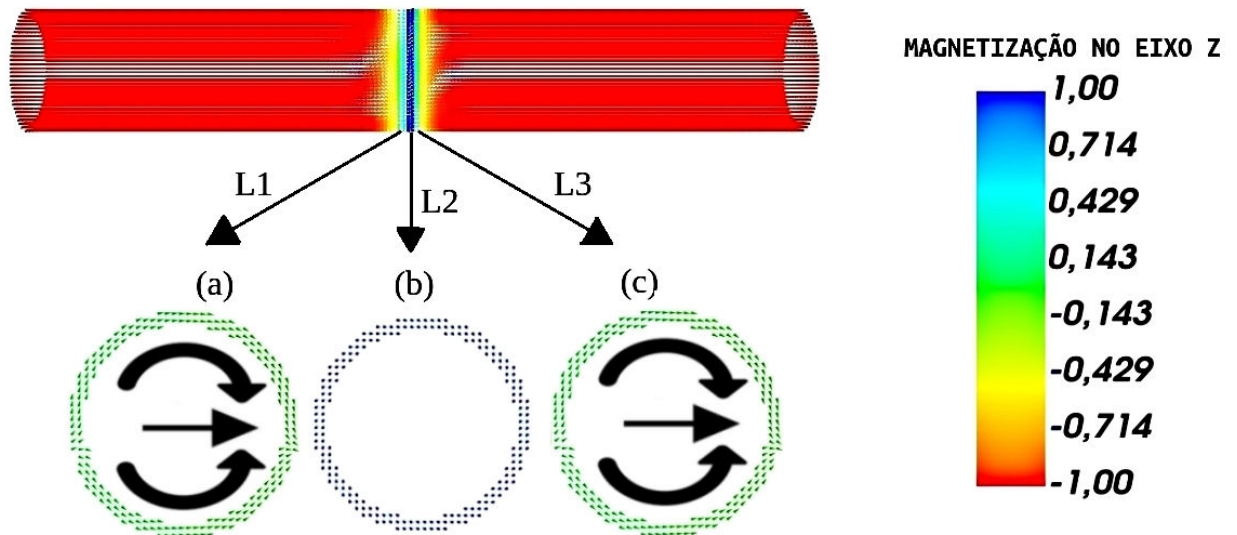
aumentando até o valor de saturação, proporcionando a formação de paredes tipo transversal,

Figura 43 – Seção do nanotubo de $1\ \mu\text{m}$ de comprimento, mostrando a formação do modo vórtex, para $\beta = 0,25$ e o campo de 15 mT, em (a) $L_1 = 0,2\ \mu\text{m}$, (b) $L_2 = 0,5\ \mu\text{m}$ e (c) $L_3 = 0,8\ \mu\text{m}$.



Fonte: Produzido pelo autor.

Figura 44 – Seção do nanotubo de $1\ \mu\text{m}$ de comprimento, mostrando os mapas com a formação do modo transversal, para $\beta = 0,75$ e o campo de 50 mT, em (a) $L_1 = 0,45\ \mu\text{m}$, (b) $L_2 = 0,5\ \mu\text{m}$ e (c) $L_3 = 0,55\ \mu\text{m}$.

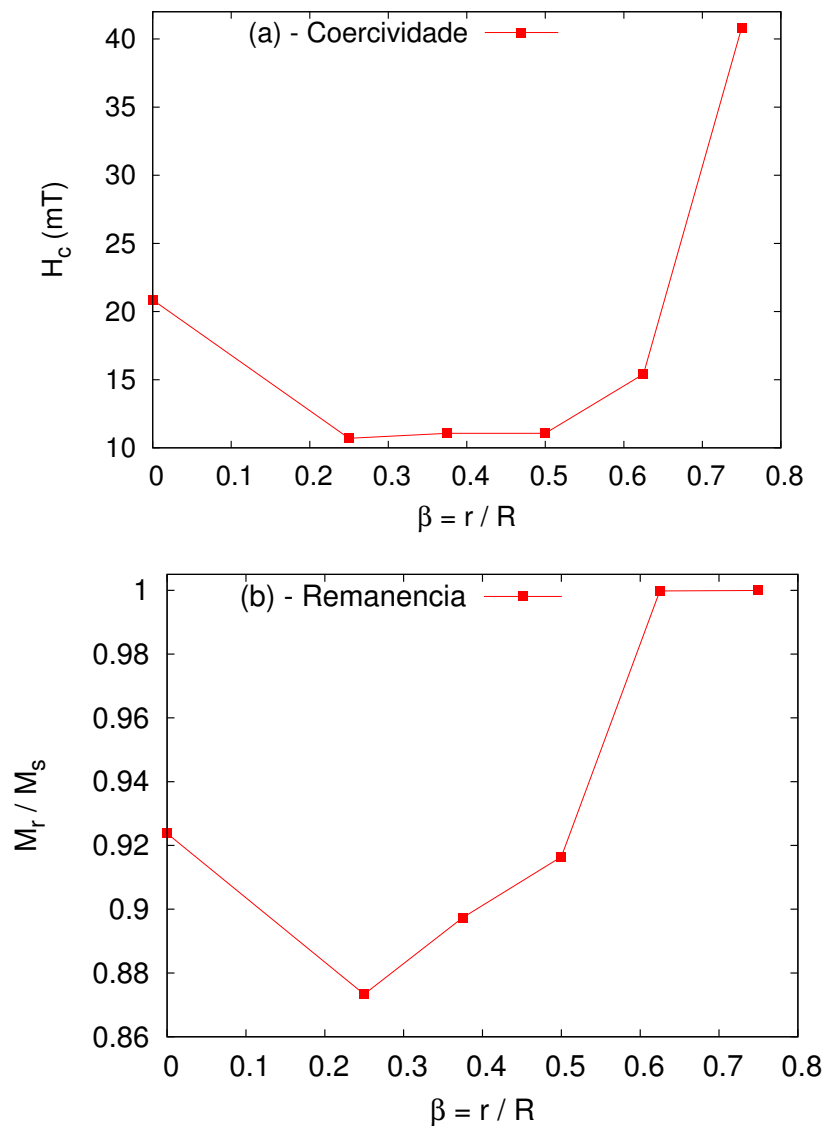


Fonte: Produzido pelo autor.

Figuras 44 (a) e (c), no nanotubo [56, 104], estes resultados foram previstos nas equações do Capítulo 4, e o comportamento dos modos de reversão são observados nos mapas de magnetização

nas Figuras 43 e 44, respectivamente. É observado nas Figuras 43 e 44, o deslocamento de paredes de domínio para cada modo de reversão, tem-se que os campos magnéticos que geram estes comportamentos são, respectivamente, 15 mT e 50 mT. As Figuras 43 (a) e (c), apresentam um deslocamento da parede no modo vórtex e nas Figuras 44 (a) e (c) um deslocamento no modo transversal, no caso das Figuras 43 (b) e 44 (b), observamos uma configuração dos momentos magnéticos entre as posições de deslocamento das paredes do modo vórtex e transversal. Os possíveis efeitos da malha são perceptíveis para $\beta > 0,625$, pois nestes valores há uma maior

Figura 45 – A figura (a) mostra a coercividade H_c como função da razão β , em (b) a remanência reduzida M_R/M_s em função da razão β .



Fonte: Produzida pelo autor.

facilidade em saturar a amostra, além de apresentar um aumento nos valores da coercividade (H_c). Este tipo de efeito está sujeito a uma forte interação dipolar existente no cilindro menos

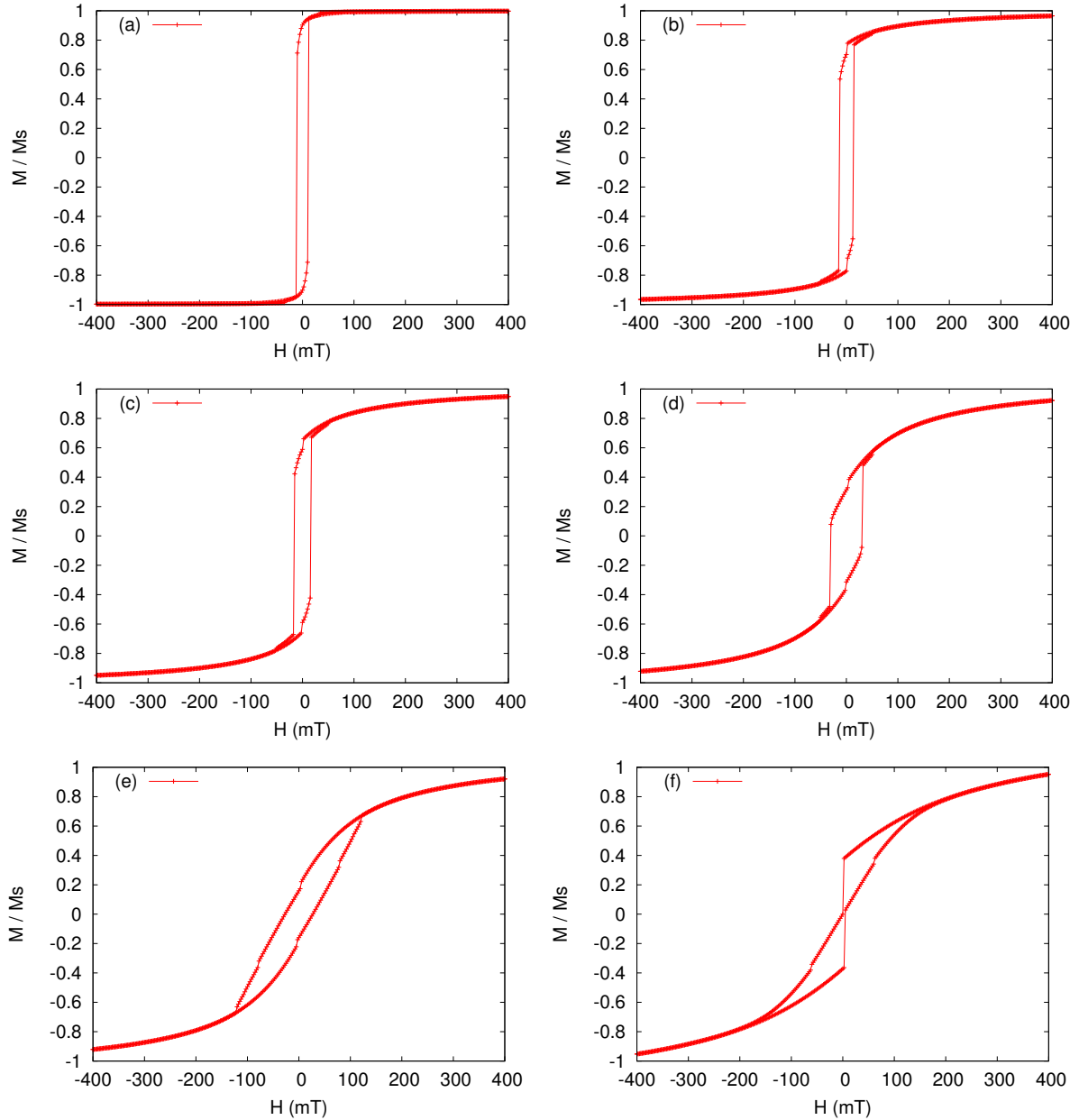
espesso, ou seja, para β grande, pois quanto mais próximas as camadas interna e externa maior o efeito dipolar.

Para os gráficos da Figura 45, temos as seguintes discussões. A coercividade é apresentada na Figura 45 (a), mostrando um comportamento não-monotônico, pois é verificado que ocorre uma diminuição do valor da coercividade, entre 20 e 11 mT aproximadamente, e depois um aumento até 40 mT. Além disso, verifica-se um campo coercivo quase constante, em torno de 11 mT, entre as razões $0,25 \leq \beta \leq 0,5$, sendo devido à proximidade entre as espessuras do nanotubo. Estas mudanças nos valores da coercividade está em função da diminuição da espessura do nanotubo, que implica em um aumento da razão β . Observamos que entre os valores de $\beta = 0$ e $0,25$, a coercividade diminui e a partir de $\beta = 0,5$, exibe um aumento em seu valor, isto sugere que, inicialmente, como o nanotubo tem uma quantidade de momentos magnéticos grande, precise de menos campo magnético para realizar o processo de reversão (modo Vórtex) e ao aumentar a razão β , ocorre um comportamento oposto (modo Transversal). Na Figura 45 (b), observamos um comportamento semelhante ao do gráfico (a), não-monotônico. Com isso, podemos examinar que a diminuição do valor da remanência sugere um modo de reversão Vórtex e com o aumento da remanência ocorre a mudança para um modo Transversal, este fato é verificado nas proximidades de $\beta = 0,3$ e $\beta = 0,5$.

Com as explanações feitas acima, podemos verificar que as características do gráfico (b), apresentando um aumento da remanência para $\beta > 0,3$, sendo este valor discutido em algumas referências [17, 63], corrobora com o comportamento do gráfico (a), pois a amostra exibe uma maior facilidade em saturar.

Além de analisar coercividade e remanência com o campo externo aplicado sobre o eixo do nanotubo, eixo Z, realizou-se o estudo da magnetização variando o ângulo θ de aplicação do campo magnético, isto foi feito para analisar a dependência angular das propriedades magnéticas em um nanotubo isolado, sendo $10^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$. Na Figura 46 observamos os ciclos de histerese com os respectivos ângulos que o campo magnético faz com o eixo Z do nanotubo.

Figura 46 – Ciclos de histerese em função da variação do ângulo θ de aplicação do campo magnético para $\beta = 0,5$. Em (a) $\theta = 0^\circ$, (b) $\theta = 40^\circ$, (c) $\theta = 50^\circ$, (d) $\theta = 70^\circ$, (e) $\theta = 80^\circ$ e (f) $\theta = 90^\circ$.

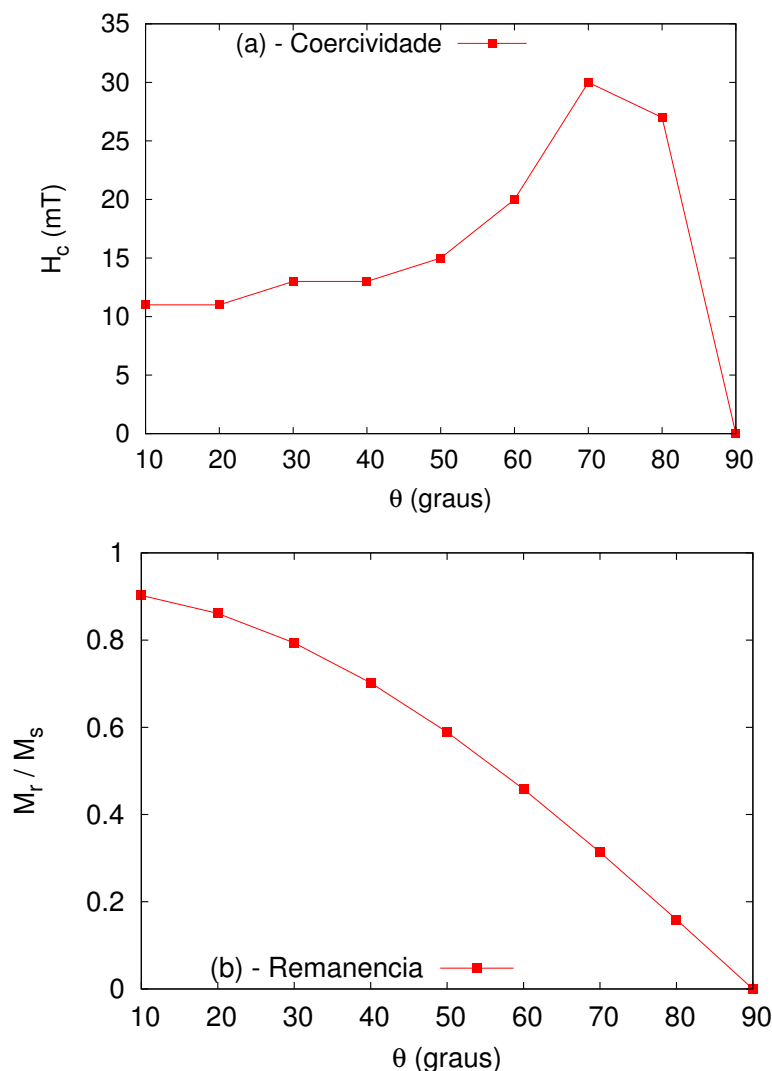


Fonte: Produzido pelo autor.

Para obter estes resultados, utilizou-se o valor do raio interno do nanotubo igual a 20 nm e o externo igual a 40 nm, ou seja, a razão $\beta = 0,5$, resolveu-se utilizar este valor, pois, na literatura é encontrado que nanotubos com raio menor que 20 nm são mais difíceis de fabricar [70,81], os autores utilizam valores, relativamente, baixos $R = 15$ nm [63] ou altos $R = 90$ e 260 nm [17, 29]. Na Figura 46, é observada uma modificação no formato dos ciclos de histerese, com o aumento do ângulo θ . E isto implica numa mudança dos valores da coercividade, que aumentam até o ângulo $\theta = 70^\circ$, e a partir deste ângulo os valores da coercividade diminuem,

para $\theta = 80^\circ$ e 90° , este fato é verificado na Figura 47. Na Figura 46 (a), a curva de histerese apresenta um comportamento, aparentemente, de dois níveis, em que a remanência possui um valor muito próximo da magnetização de saturação. Aumentando o ângulo para 40° , 50° e 70° , observa-se um arredondamento da curva de histerese, Figuras 46 (b), (c) e (d), proporcionando uma diminuição da remanência nestes casos. Para as Figuras 46 (e) e (f) ocorre uma diminuição acentuada da coercividade. Além destas observações, analisando as Figuras 46 (b) a (f) há a ocorrência de pequenos "saltos" em cada curva de histerese, este fato tem relação com a mudança do regime de magnetização, ou seja, uma mudança brusca no alinhamento dos momentos magnéticos do nanotubo.

Figura 47 – A figura (a) mostra coercividade H_c e em (b) a remanência reduzida M_r/M_s como função de θ .

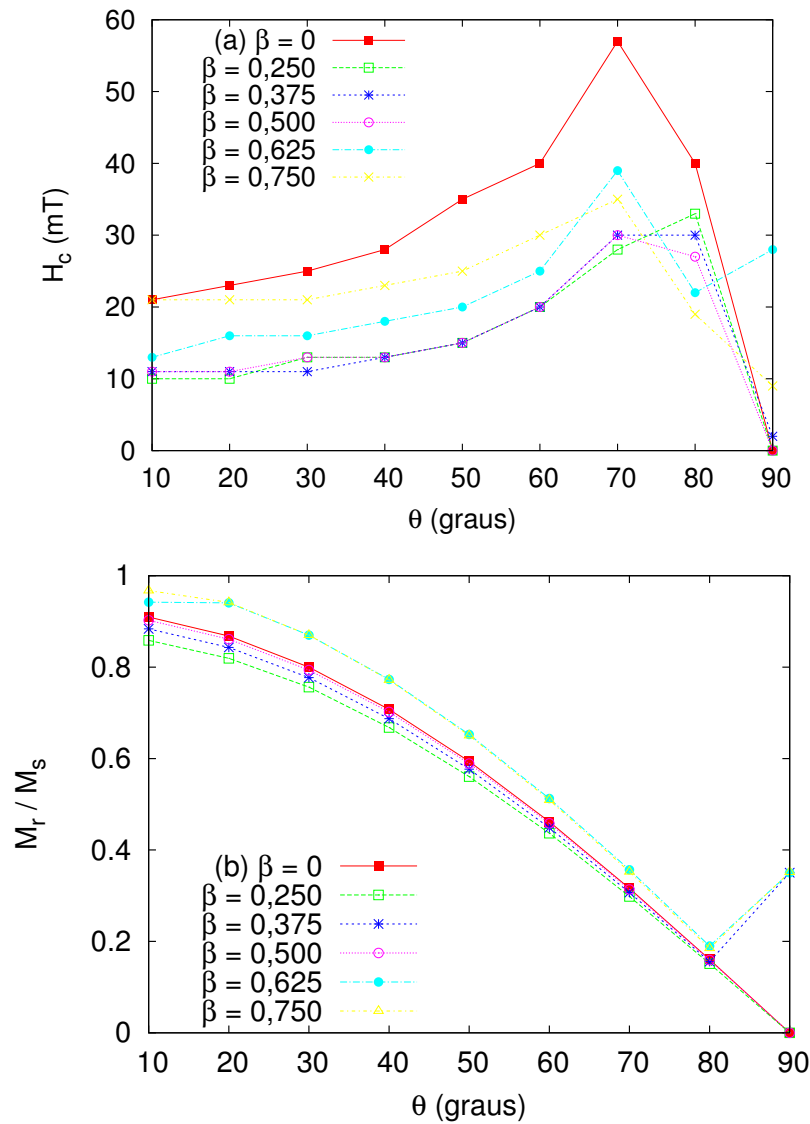


Fonte: Produzido pelo autor.

Na Figura 47 (a) é observado um pico, indicando um valor máximo da coercividade, em $\theta = 70^\circ$, podemos concluir que a coercividade máxima corresponde ao ângulo em que o

mecanismo de inversão dos momentos magnéticos no nanotubo muda de um modo de reversão vórtex para um transversal [20, 106] e este tipo de dependência angular foi proposto por *Albrecht et al* [19], tanto de forma teórica quanto experimental. Um gráfico semelhante a este pode ser observado no artigo de *S. Allende et al* [79], ou nesta tese de doutorado na Figura 18 (b), o qual representa cálculos teóricos realizados para nanotubo com diâmetro de 50 nm. Na Figura 47 (a), tem-se a coercividade (H_c) variando com θ , observa-se um comportamento não-monotônico, que indica uma mudança no modo de reversão da magnetização do nanotubo como função do ângulo *Albrecht et al* [19] e *Allende et. al.* [79].

Figura 48 – A Figura (a) mostra a coercividade e em (b) a remanência reduzida como função de θ , além de exibir a variação com os valores de β .



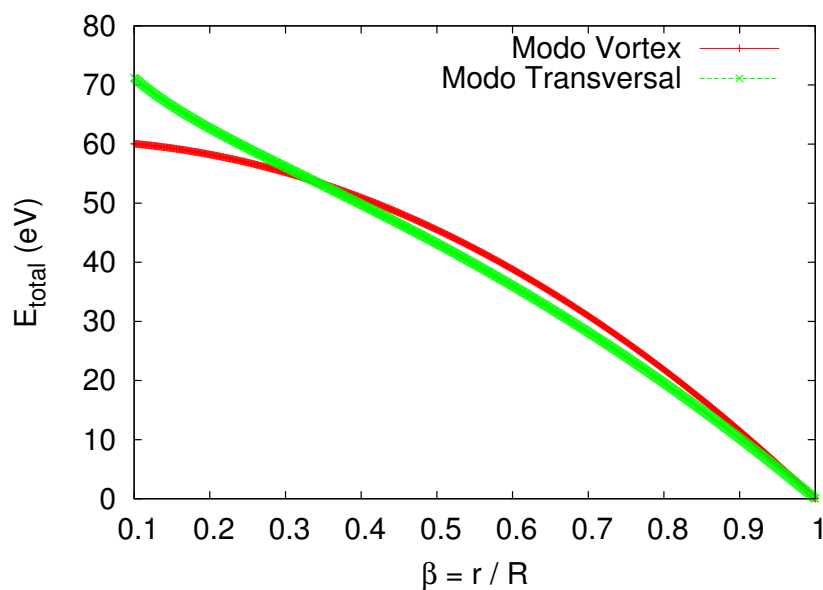
Fonte: Produzido pelo autor.

A análise da Figura 47 (b) indica um comportamento monotônico da remanência reduzida (M_r / M_s) como função do ângulo. Além disso, observamos que os valores de M_r / M_s diminuem

com a variação, aumento, do ângulo. A remanência reduzida (M_r/M_s) como função do ângulo é dada pela relação: $M_r(\theta) = M_r \cos^2(\theta)$, sendo $M_r = M_r(\theta = 0^\circ)$ a remanência reduzida medida para o campo aplicado sobre o eixo do nanotubo, eixo Z, esta expressão foi observada na referência [107] para o estudo de um arranjo ordenado de nanofios de cobalto e no artigo [104] na análise das interações magnetostáticas entre nanoestruturas fio-tubo, mas reflete perfeitamente o efeito encontrado para o nanotubo de níquel. O comportamento monotônico mostrado na Figura 47 (b), ocorre devido ao valor de β , sendo este efeito evidenciado na diminuição da remanência reduzida, como pode ser verificado nas dissertações [108, 109] e nos artigos [19, 79, 110, 111].

Analisando a coercividade e remanência reduzida de forma mais geral, temos a Figura 48 (a) e (b), em que mostramos todos os valores da coercividade (H_c) e remanência reduzida M_r/M_s , respectivamente, como função da razão β e do ângulo θ . Observamos que para $\theta \leq 70^\circ$, em todos os casos na Figura 48, há um aumento da coercividade, e para valores $\theta > 70^\circ$, ocorre uma diminuição brusca, isto se deve aos efeitos da interação dipolar. Ao compararmos os valores de H_c para cada razão β , observamos que, para o ângulo $\theta = 70^\circ$, ao aumentarmos β , ocorre uma diminuição do valor da coercividade, este fato é devido à diminuição da espessura que gera no nanotubo isolado fortes efeitos da interação dipolar. Na análise da remanência reduzida, Figura 48 (b), observamos uma diminuição monotônica com o aumento do ângulo, indicando que os nanotubos longos sofrem a influência dos efeitos da anisotropia de forma. Além destas observações, é perceptível que em 90° , para alguns casos, a remanência é diferente de zero, $\beta = 0,625$ e $0,75$, indicando que para estes valores de β tornam as malhas (ou células) um tamanho próximo da espessura do nanotubo, observando assim este efeito na simulação micromagnética.

Figura 49 – Energia dos modos de reversão como função de β . Este gráfico é um diagrama de fase que indica a transição entre os modos.



Fonte: Produzido pelo autor

Na Figura 49 é observado o diagrama de fase, comparativo das energias, para um nanotubo isolado, em que apresenta a energia total (soma das Energias de Troca, Magnetostática, Magnetocristalina e Zeeman), aqui fazemos esta análise para observarmos, através da minimização das energias envolvidas, os modos de reversão da magnetização no nanotubo. Este diagrama foi obtido utilizando as equações descritas no Capítulo 4 e suas implementações foram realizadas no programa *octave*. Assim, no estudo da minimização da energia é observado no diagrama que para valores pequenos da razão β , aproximadamente 0,3, apresenta um modo de reversão dos momentos magnéticos do tipo vórtex, e para o caso em que os valores da razão β sejam maiores, é observado o modo transversal, como supra citado tanto nas equações descritas quanto nos mapas de magnetização. Para $\beta = 0,34$, aproximadamente, ocorre a transição entre os modos de inversão dos momentos magnéticos.

Logo, como citado em vários artigos, as análises destes resultados, utilizando o *software OOMMF*, indicam que mudanças dos parâmetros geométricos dos nanotubos proporcionam modificações em suas propriedades magnéticas, tais como coercividade H_c , remanência M_r e nos modos de reversão dos momentos magnéticos.

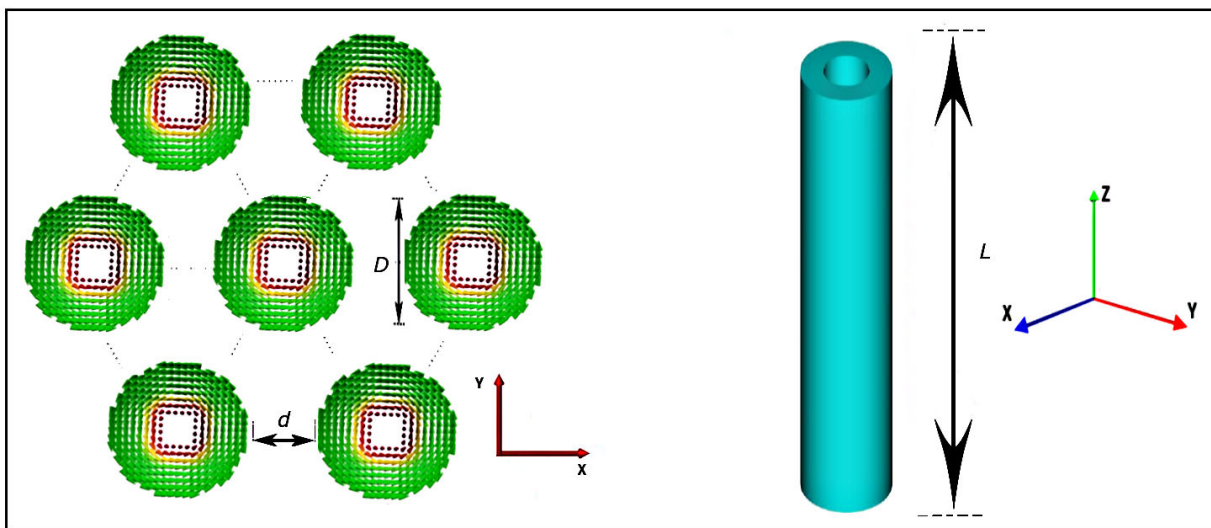
Então na próxima seção, abordaremos um arranjo hexagonal de nanotubos de níquel, em que utilizamos o *software* livre *MuMax3*. Este *software* foi utilizado por proporcionar uma maior velocidade de processamento de dados, quando comparado ao *OOMMF*, e uma vez que mostramos cálculos por simulação e comparamos com o esperado analiticamente, iremos comprovar o que ocorre com essas soluções em um arranjo.

6.3 SIMULAÇÃO UTILIZANDO O MUMAX3: ARRANJO HEXAGONAL DE NANOTUBOS MAGNÉTICOS DE NÍQUEL

Na análise de um arranjo hexagonal de nanotubos magnéticos, Figura 50, foi utilizado o *software MuMax3*, pois como dito anteriormente, a velocidade computacional dos cálculos é maior. Nesta seção utilizaremos como material simulado o Níquel (Ni). Nossa principal motivação, nesta simulação, é entender como a mudança de posicionamento entre os nanotubos de Níquel influencia nos efeitos das interações dentro do arranjo hexagonal, caso que não foi possível observar na seção anterior, pois havia apenas um único nanotubo. Neste tópico são apresentados resultados para nanotubos que possuem um raio exterior fixo, $R = 40$ nm, e a espessura, $R - r$, foi variada de acordo com a razão $\beta = r/R$, em que r é o raio interior, com $0,1 \leq \beta \leq 0,8$, e o comprimento dos nanotubos sendo de $1 \mu\text{m}$. Podemos observar estes parâmetros geométricos, esquematicamente, na Figura 50.

Para a execução das simulações, assumimos que as distâncias entre os nanotubos tem valores de 0 nm, 55 nm e 100 nm, com isso, fez-se a análise da influência nas interações entre os nanotubos no arranjo.

Figura 50 – Figura esquemática do arranjo hexagonal de 7 nanotubos magnéticos, em que $D = 2R$ é o diâmetro externo do nanotubo, d é a distância entre as superfícies dos nanotubos e L é o comprimento dos nanotubos.



Fonte: Produzido pelo autor

Consideramos, neste tópico, que nos nanotubos existe interação de troca e contribuição magnetocristalina. No caso do Ni, a contribuição da energia magnetocristalina é cúbica com direções de anisotropia ao longo do plano X, Y , com a direção de fácil magnetização 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 são mostradas na Tabela 2.

Tabela 2 – Propriedades intrínsecas dos materiais e parâmetros da simulação para o MuMax3.

Material	$M_s(A/m)$	$A(J/m)$	$K_1(J/m^3)$	$l_{ex}(nm)$	$d(nm)$	Malha(nm)		
						ΔX	ΔY	ΔZ
Ni	490×10^3	9×10^{-12}	$-5,7 \times 10^3$	7,72	0	1,6	1,6	5
					55	2,2	2,2	5
					100	2,8	2,8	5

Fonte: Produzido pelo autor.

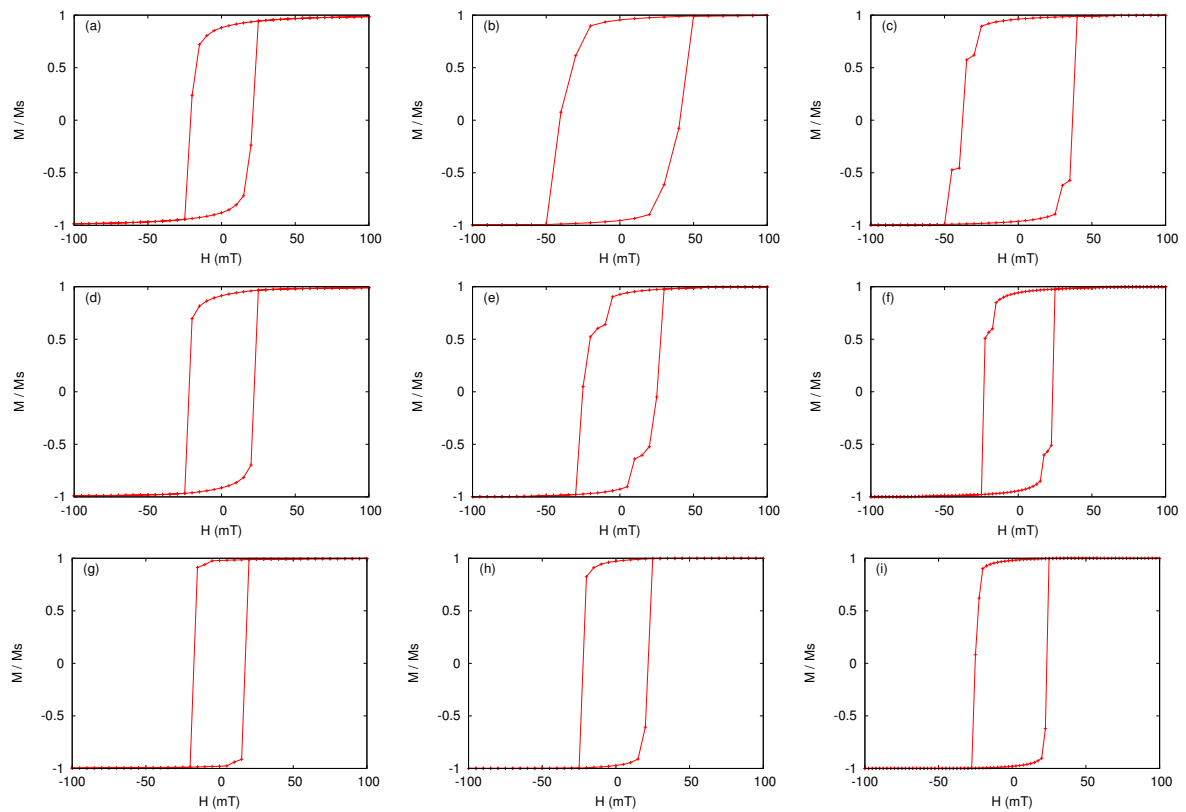
As dimensões das malhas computacionais para cada distância simulado dependem de cada situação, sendo: $d = 0 \text{ nm}$, $240 \times 222 \times 1000 \text{ nm}^3$ e a malha tem 4309200 células computa-

cionais, para $d = 55 \text{ nm}$, $352 \times 316 \times 1000 \text{ nm}^3$ e a malha tem 4576000 células computacionais e para $d = 100 \text{ nm}$, $448 \times 392 \times 1000 \text{ nm}^3$ e a malha possui 4480000 células computacionais.

6.3.1 Interações Magnéticas no arranjo hexagonal de nanotubos de níquel por *MuMax3*

Nesta seção, são apresentados os resultados para os ciclos de histerese, coercividade e remanência reduzida como função da mudança de posição dos nanotubos no arranjo e da razão β . Faremos comparações com os nossos resultados para um tubo.

Figura 51 – Curvas de histerese para o arranjo hexagonal de níquel, neste caso o campo externo é paralelo ao eixo Z . Variamos a razão β e a distância entre os nanotubos. Apresentando nas colunas distâncias de 0 nm, 55 nm e 100 nm, sendo (a), (b) e (c) para $\beta = 0,2$, (d), (e) e (f) para $\beta=0,5$ e (g), (h) e (i) para $\beta=0,8$.



Fonte: Produzido pelo autor

A intenção inicial deste estudo, como citado acima, está relacionada aos efeitos das interações de curto e longo alcance quando modificamos as distâncias entre os nanotubos, e com a variação da espessura do nanotubo de Níquel. Em muitos experimentos, como os já citados na revisão bibliográfica - Capítulo 2, são produzidos nanotubos que dependendo da espessura podem apresentar valores elevados da coercividade, remanência e do produto BH_{max} .

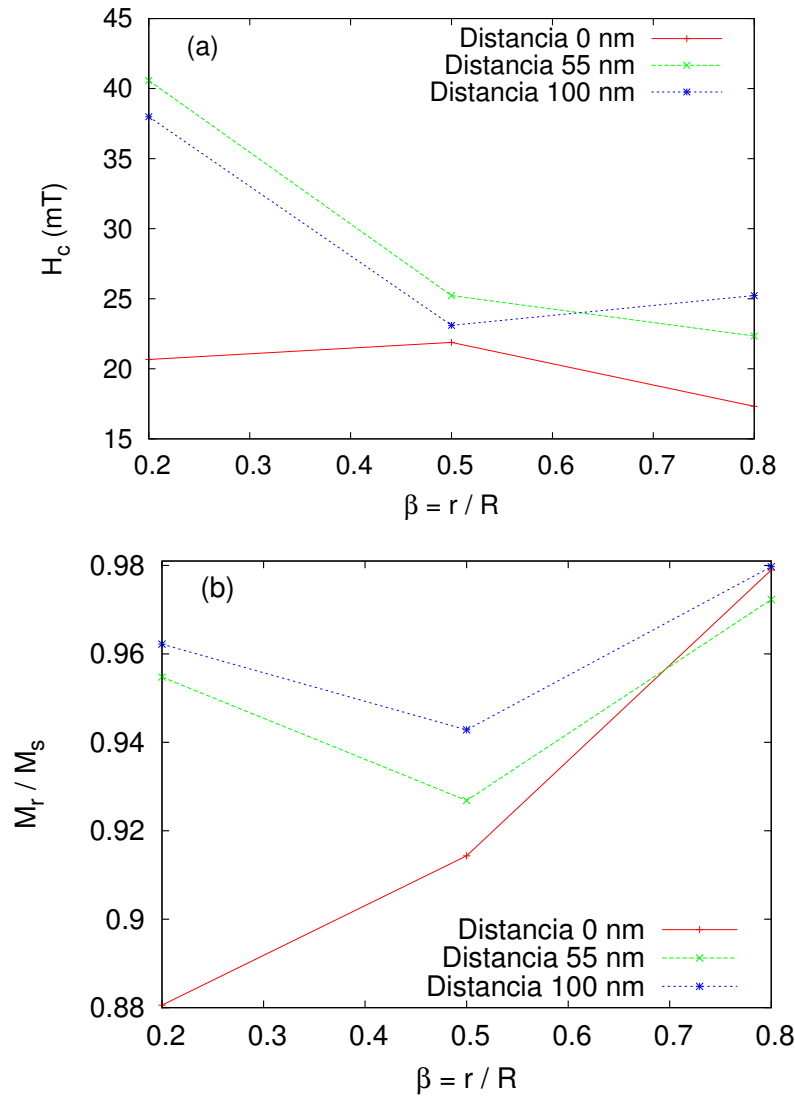
Inicialmente, o estudo é feito com o campo externo aplicado sobre o eixo do arranjo, eixo Z , pois na maioria dos experimentos esta configuração é favorável em diferentes aplicações.

Realizamos a abordagem da dependência da coercividade e remanência reduzida em função da razão β e da distância entre as superfícies dos nanotubos, além disto, analisamos a dependência com o ângulo do campo magnético aplicado. Tentando com este estudo, analisar a presença dos modos de reversão dos momentos magnéticos no arranjo hexagonal de nanotubos de níquel, os quais devem ser diferentes aos observados em um único nanotubo. Na literatura, este tema foi abordado na referência [104], que estuda as interações magnetostáticas entre nanoestruturas com morfologia fio-tubo, cuja amostra é feita de permalloy.

A Figura 51 mostra as curvas de histerese do arranjo de nanotubos de níquel, que foram obtidas aplicando um campo paralelo ao eixo Z. Nestas curvas, observamos formas bem diferentes para cada valor dos parâmetros geométricos, e também verificamos que a coercividade possui valor máximo para $\beta = 0,2$ ($d = 55$ nm) e mínimo em $\beta = 0,8$ ($d = 0$ nm), Figuras 51 (b) e (g) respectivamente. Estes comportamentos são diferentes quando analisamos um único tubo, pois para $\beta = 0,25$ apresenta um valor mínimo e no caso de $\beta = 0,75$ um valor máximo, Figura 42 (b) e (f). A variação da coercividade e remanência com β e d depende, principalmente, da anisotropia de forma [112], com isso, observam-se as modificações nas curvas de histerese. Ao compararmos com as curvas de histerese para um nanotubo, Figuras 42 (b), (d) e (f), observamos mudanças nas formas das curvas, que ocorrem devido à distância entre os nanotubos ser muito grande. Assim, na Figura 52, analisamos a coercividade e remanência reduzida como função da espessura (razão β) e da distância entre os nanotubos (d).

Na análise dos gráficos da Figura 52 (a) podemos observar que para $\beta = 0,2$ e $0,5$, a coercividade inicialmente aumenta com relação às distâncias ($d = 0$ e 55 nm), depois disso, a coercividade H_c diminui o seu valor em relação à distância de 100 nm. O carácter de maior e menor interação entre os nanotubos influencia diretamente na forma dos gráficos da coercividade, como também pode ser observado para nanofios [113–115] e nanoestruturas fio-tubo [104]. Este efeito da interação se modifica para a razão $\beta = 0,8$, em que a coercividade só aumenta com a distância entre os nanotubos. Neste caso, ocorre a indicação de uma forte influência da interação dipolar, devido à menor espessura das paredes do nanotubo, isto quando analisada a interação magnetostática. É observado também que nos três casos estudados a coercividade se comporta de forma não monotônica, indicando a possibilidade de haver uma mudança no modo de inversão dos momentos magnéticos como função da razão β . Na análise comparativa entre as Figuras 45 (a) e 52 (a), observamos que, para cada distância, o comportamento de $H_c \times \beta$ que mais se aproxima do nanotubo isolado é o $d = 100$ nm, pois, H_c diminui entre $\beta = 0,2$ e $0,5$, e para $\beta > 0,5$ tem um aumento, para as curvas cujas distâncias são $d = 0$ e 55 nm, a coercividade diminui seu valor, além deste fato, pode-se observar que estes valores, para todas as curvas, são muito próximos dos que foram encontrados na Figura 45 (a), com isso, verificamos que os principais efeitos da interação entre os nanotubos, que se encontram num arranjo, ocorre para $d < 100$ nm.

Figura 52 – Coercividade e remanência como função de β para as respectivas distâncias entre os nanotubos de níquel.



Fonte: Produzido pelo autor

A partir da Figura 52 (b), pode-se observar a remanência M_r/M_s como função da razão (β) e da distância (d) entre os nanotubos. Observamos que, nos casos de $d = 55$ nm e 100 nm, a remanência, inicialmente, diminui entre $\beta = 0,2$ e $0,5$, em seguida aumenta entre $\beta = 0,5$ e $0,8$, sendo um indicativo da reversão da magnetização no arranjo. É importante observar que ao fixarmos a razão β e variarmos as distâncias entre os nanotubos, ocorre um aumento da remanência, exceto para $\beta = 0,8$, pois nesta razão é importante salientar que a remanência obtida para o arranjo com as distâncias $d = 0$ e 100 nm entre os nanotubos, coincidem. Estes resultados sugerem uma mudança no modo de reversão da magnetização, em que $\beta \leq 0,5$, apresenta o modo Transversal e para $\beta > 0,5$, o modo Vórtex, como observado nos artigos [17, 66, 67] cada modo de reversão, e como consequência suas transições, modificam-se conforme variam seus parâmetros geométricos e magnéticos. Na comparação entre as remanências reduzidas das

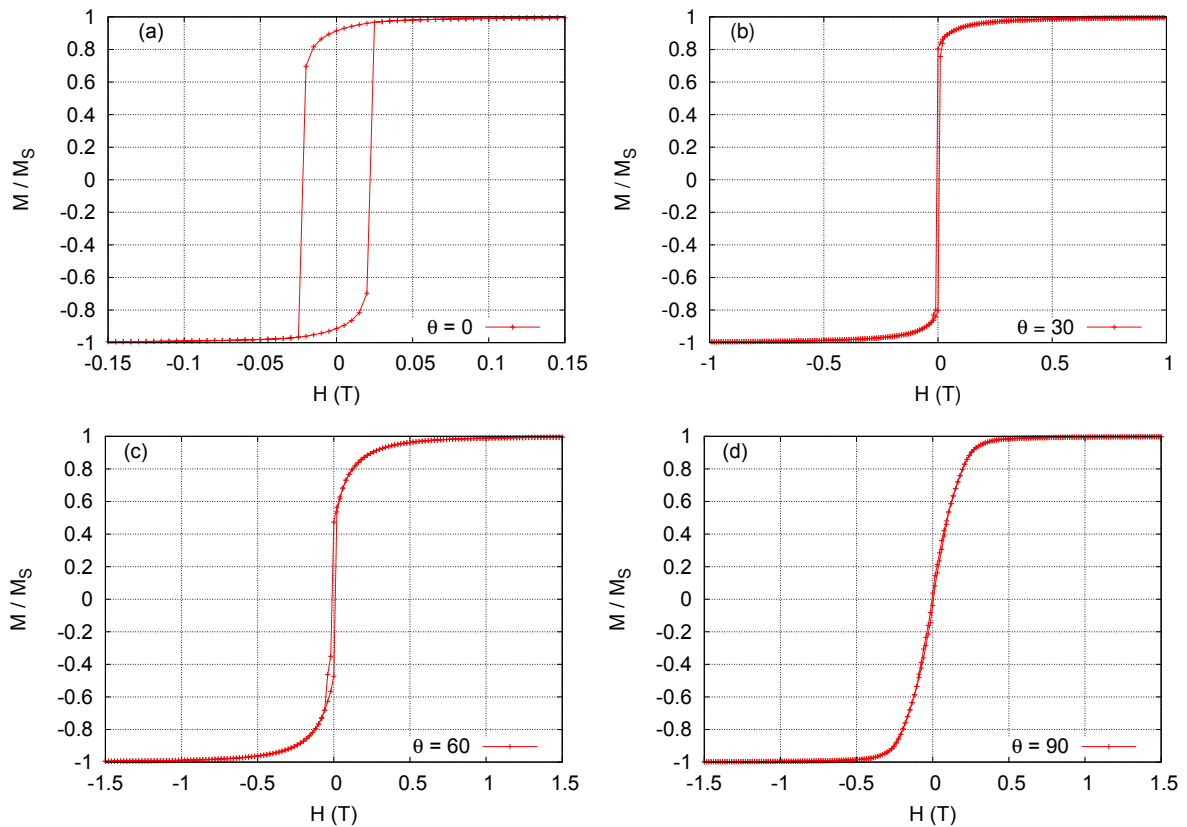
Figuras 45 (b) e 52 (b), observa-se que os valores são muito próximos entre o arranjo hexagonal e o nanotubo isolado.

A próxima seção abordaremos as propriedades magnéticas de um arranjo de nanotubos de níquel como função do ângulo de aplicação do campo magnético.

6.3.2 Dependência angular da coercividade (H_c) e remanência (M_r) em um arranjo de nanotubos de níquel

Até o momento, nossos resultados foram obtidos variando os parâmetros β e as distâncias entre os nanotubos, implicando nos comportamentos citados na tese. Nesta seção, abordamos a dependência angular das propriedades magnéticas, em que o ângulo do campo magnético aplicado é (θ). Com isso, nosso arranjo hexagonal de nanotubos de níquel tem a seguinte descrição, raio externo de 40 nm, comprimento de 1,0 μm , distância entre os nanotubos sendo $d = 0$ nm e a razão $\beta = 0,5$, estes valores estão de acordo com dados experimentais [70,81], como citado na seção 6.2.1.

Figura 53 – Curvas de histerese para o arranjo hexagonal de níquel, neste caso $d = 0$ nm e a razão $\beta = 0,5$ são fixos. O campo magnético externo é variado segundo o ângulo θ , $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$. Em (a), $\theta = 0^\circ$, em (b) $\theta = 30^\circ$, em (c) $\theta = 60^\circ$ e em (d) $\theta = 90^\circ$.

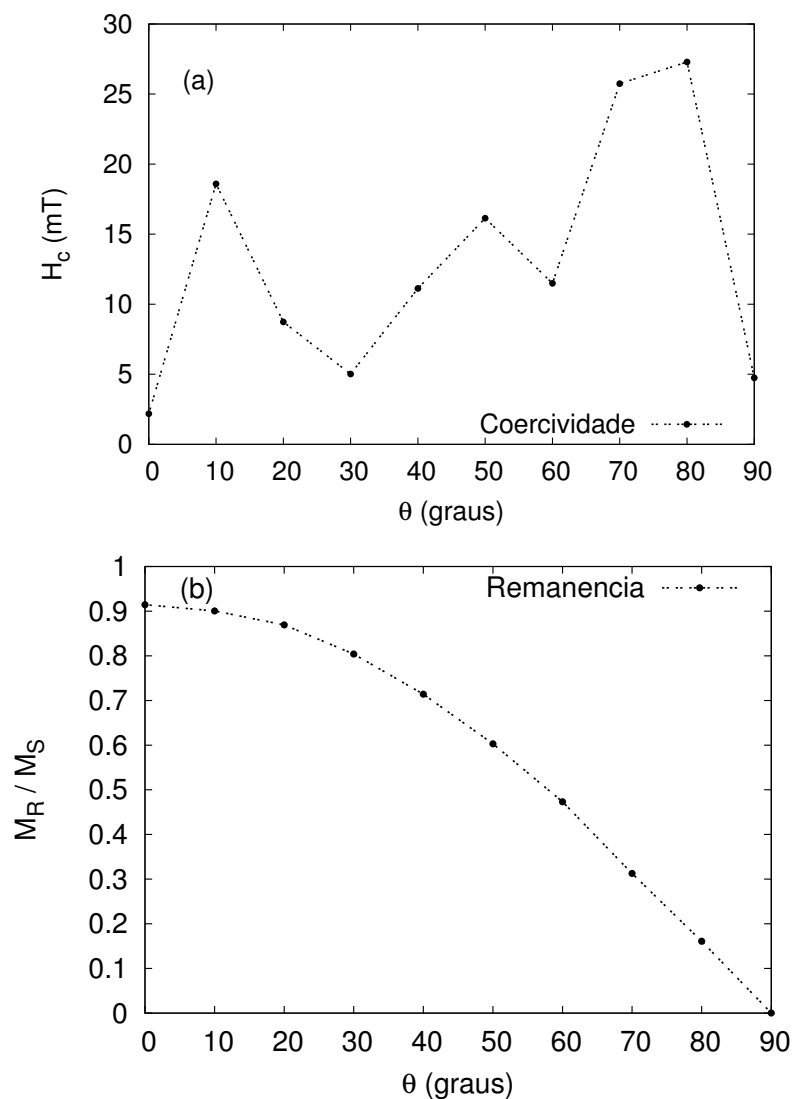


Fonte: Produzido pelo autor

Os resultados para ciclos de histerese foram obtidos em diferentes ângulos (θ) do campo magnético aplicado. Na Figura 53, apresentamos as curvas de histerese medidas para o arranjo de nanotubos de níquel, com os seguintes ângulos $\theta = 0^\circ$, 30° , 60° e 90° . Nas curvas de histerese é evidenciado, para estes ângulos, um aumento na coercividade para $\theta > 0^\circ$, seguido por uma tendência a diminuir para $\theta > 80^\circ$, como observado na próxima análise, esta diminuição da coercividade indica uma modificação na forma do ciclo de histerese. Como analisado nas Figuras 53 (c) e (d), o valor do campo magnético aplicado foi elevado, de 150 mT para 1500 mT, isto se fez necessário para que o arranjo hexagonal de nanotubos de níquel pudesse alcançar o valor da magnetização de saturação, ou seja, possibilitando saturar a amostra.

Dessa forma, analisaremos a Figura 54, a qual mostra a dependência angular da coercividade e remanência reduzida.

Figura 54 – Coercividade e Remanência reduzida para $d = 0$ nm e a razão $\beta = 0,5$ como função do ângulo de aplicação do campo magnético, $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$.



Fonte: Produzido pelo autor

Na literatura científica encontramos artigos que relatam a dependência de propriedades magnéticas com o ângulo de aplicação do campo, artigos estes já citados e discutidos no Capítulo 2 desta tese. Os artigos abordam esta dependência do ponto de vista numérico e analítico [30, 76, 79] e também de forma experimental [81, 110, 116]. Na Figura 54 (a), apresentamos os valores da coercividade variando com o ângulo (θ). Verifica-se, inicialmente, que o gráfico indica um comportamento não-monotônico, atingindo um valor máximo para $\theta = 80^\circ$, e então diminuindo para $\theta > 80^\circ$. Como indicado pela análise das curvas de histerese, este comportamento não homogêneo sugere uma transição entre dois processos de reversão da magnetização (os já citados modos Transversal e Vórtex). A mudança dos modos de reversão estão, aparentemente, em consonância com dados experimentais [30]. No artigo [116], os autores fazem uma exploração da coercividade em função do campo aplicado e ao compararmos os gráficos, observamos uma semelhança bastante expressiva para o comportamento da curva, isto ocorre para certos valores do ângulo de aplicação do campo externo, $\theta = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ$ e 90° . É evidente na comparação das curvas, que os valores para a dependência angular da coercividade são diferentes, pois a geometria e os parâmetros utilizados para os arranjos de nanotubos são distintos.

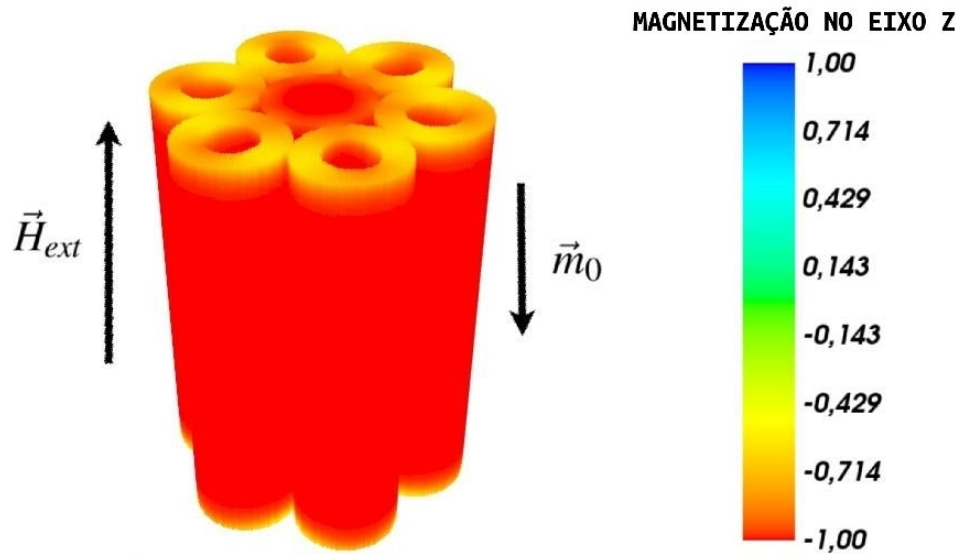
Na Figura 54 (b), apresentamos a remanência reduzida, definida como a razão entre a remanência e a magnetização de saturação (M_S), como função do ângulo (θ). Um valor máximo de remanência reduzida foi observado quando $\theta = 0^\circ$, correspondendo ao campo aplicado paralelo ao eixo do nanotubo. A remanência reduzida pode ser definida utilizando, através de cálculo teórico, $M_R(\theta) = M_0 \cos^2(\theta)$, como citada nos artigos [19, 111]. O comportamento monotônico apresentado na Figura 54 (b), está de acordo com dados experimentais, os quais são estudados no arranjo de nanotubos de níquel fabricados por eletrodeposição em matrizes de policarbonato [110] e também em um arranjo de nanotubos de níquel eletrodepositados em matrizes de alumina [116].

6.3.3 Estudo da dinâmica da reversão dos momentos no arranjo hexagonal de nanotubos de níquel

Uma forma de entender como ocorre o processo de inversão dos momentos magnéticos, é realizando uma análise da dinâmica dos momentos diante da inversão do campo magnético. Nesta seção, apresentamos o estudo da reversão dos momentos, no arranjo hexagonal de nanotubos de níquel, para diferentes espessuras (β) e distâncias entre os nanotubos (d). A importância dessa análise está vinculada às observações feitas através das curvas de coercividade, pois mesmo que o formato da curva $H_c \times \theta$ sugira um modo vórtex, não é conclusivo, pelo fato que uma mesma curva de histerese pode ser obtida devido a várias situações.

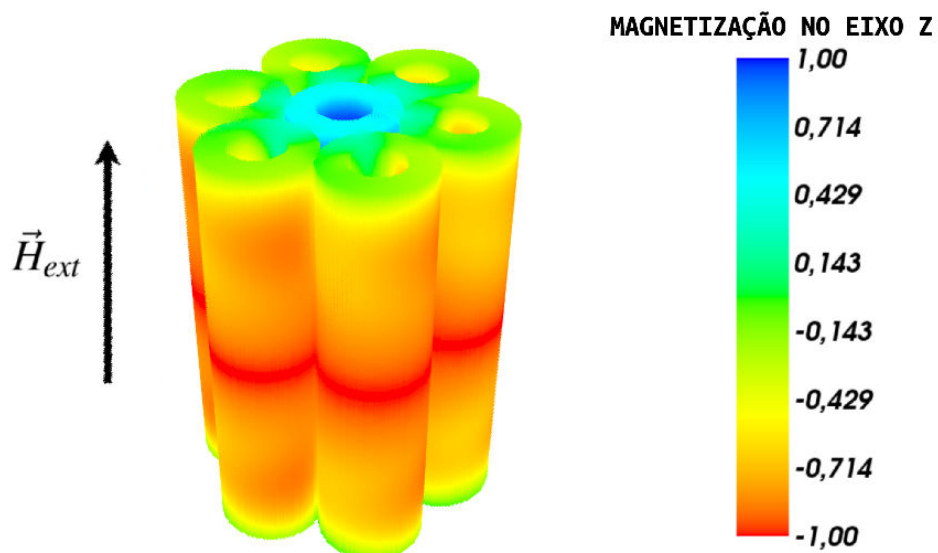
Inicialmente, apresentamos o estudo dinâmico fixando β (a razão entre os raios interno e externo do nanotubo), e variando as distâncias entre os nanotubos em: 0 nm, 55 nm e 100 nm. Em todos estes casos, o campo externo é aplicado paralelo ao eixo do nanotubo.

Figura 55 – Esquema da simulação da reversão da magnetização. Inicialmente o arranjo tem uma magnetização no sentido negativo do eixo Z e o campo externo aplicado no sentido positivo.



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 56 – Esquema da simulação da reversão da magnetização durante a reversão dos momentos magnéticos, os quais começam a rotacionar (ou girar), as cores misturadas indicam este movimento.

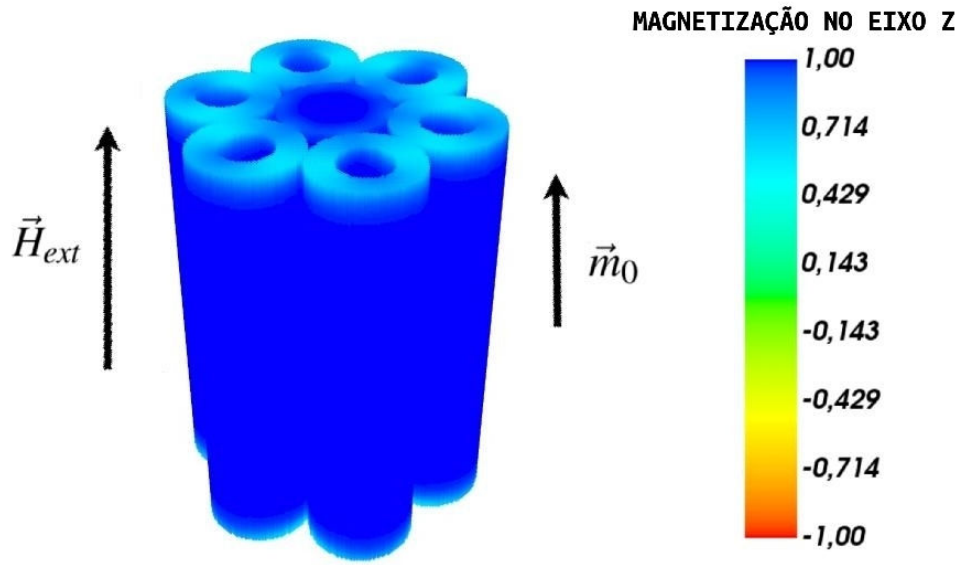


Fonte: Produzido pelo autor

A evolução temporal da magnetização $\vec{M}(\vec{r}, t)$ do arranjo é obtida pela integração da equação 2.30, que representa a equação LLG, com a constante de amortecimento (*Damping*)

no valor de 0,02. O arranjo inicialmente possui magnetização ($\vec{m}_0$) na direção negativa do eixo Z, Figura 55, e a reversão foi simulada aplicando um campo externo $\vec{H}_{ext}$, maior do que o campo coercitivo, na direção positiva do eixo Z por um certo intervalo de tempo. Na Figura 56, observamos o processo da magnetização, em que os momentos magnéticos se encontram no processo de reversão, e por fim, os momentos estão alinhados com o campo externo, Figura 57.

Figura 57 – Esquema da simulação da reversão da magnetização. Depois de um determinado tempo, o momento magnético reverteu a sua magnetização, com isso, campo externo e momento se encontram no mesmo sentido sobre o eixo Z.



Fonte: Produzido pelo autor

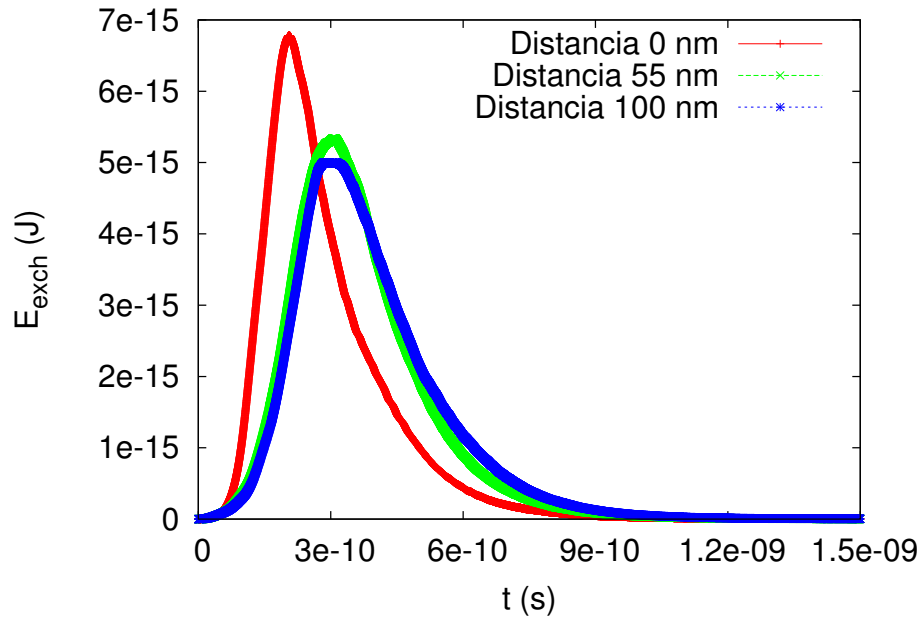
Este estudo tem grande utilidade, já que por um lado é possível analisar a evolução dos momentos em cada ponto da amostra, logo depois de geradas as condições de inversão total dos momentos magnéticos. Como será observado nos textos que se seguem, cada componente do momento magnético evolui temporalmente, gerando um padrão de oscilações que depende das configurações geométricas do arranjo de nanotubos. A formação de estruturas diferentes pode ser vista, ou simplesmente detectada, observando a evolução temporal da energia em cada instante de tempo. A seguir mostraremos uma breve seleção de todos os nossos resultados, em que se destacam os principais eventos durante a reversão dos momentos magnéticos nos arranjos com $\beta = 0,2$; $0,5$ e $0,8$. Decidimos apresentar os resultados destes arranjos, pois ocorrem mudanças de um caso para outro. Na sequência mostramos a evolução temporal da energia de troca e das componentes X e Y da magnetização.

6.3.3.1 Simulação mantendo fixa a razão $\beta = 0,2$ e variando as distâncias

Nesta seção apresentamos os resultados referentes à energia de troca e às magnetizações nos eixos X e Y . Os gráficos foram produzidos com a ajuda do *software octave* [117]. A Figura

58 apresenta a evolução temporal da energia de troca para o arranjo hexagonal dos nanotubos de Níquel para $\beta = 0,2$ e as distâncias $d = 0$ nm, 55 nm e 100 nm. Observa-se claramente que para cada valor da distância (d) é gerada uma configuração diferente, pois a energia de troca está diretamente ligada à configuração da magnetização $\vec{M}(\vec{r}, t)$.

Figura 58 – Energia de troca durante a reversão da magnetização para $H_a = 500$ mT.



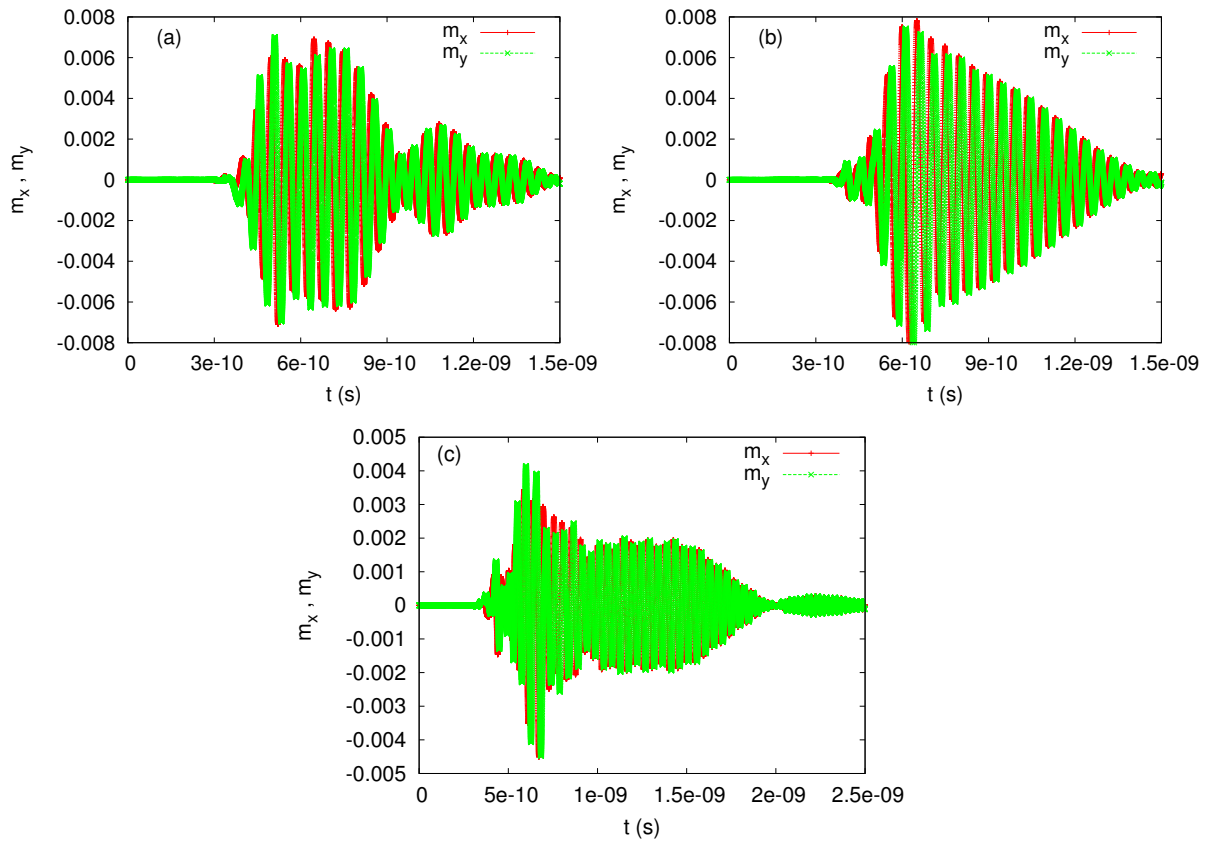
Fonte: Produzido pelo autor

Observamos que no início da inversão, a energia de troca tem uma pequena mudança de comportamento em, aproximadamente, 0,1 ns para as três distâncias e que o gráfico cresce rapidamente até, aproximadamente, 0,25 ns para $d = 0$ nm, e no caso das distâncias, $d = 55$ nm e 100 nm, este tempo está próximo de 0,35 ns, sendo possível observar os respectivos picos (máximos de energia de troca) nos gráficos. Após este processo, há uma relaxação típica, para cada distância, levando a uma condição de saturação após 1 ns. Além destas observações, foi analisada uma diminuição dos máximos de energia (picos) com o aumento das distâncias entre os nanotubos, que ocorre, possivelmente, devido à diminuição das interações (de troca) entre os momentos magnéticos dos nanotubos.

Outro fato aparente nos gráficos é referente ao alargamento das curvas, que está relacionado ao regime de relaxação dos momentos magnéticos no arranjo. Estes alargamentos mostram diferentes regimes de relaxação para cada valor da distância entre os nanotubos.

Após estas análises, faremos discussões sobre o comportamento dos momentos magnéticos como função do tempo, expressos como $m_x(t)$ e $m_y(t)$. Observando os gráficos da Figura 59, em que se apresenta a evolução temporal das componentes da magnetização, que são perpendiculares ao campo aplicado, podemos apreciar que inicialmente o processo possui um

Figura 59 – Evolução temporal das componentes m_x e m_y da magnetização e suas respectivas distâncias. Na Figura (a) a distância entre os nanotubos é de 0 nm, em (b) é de 55 nm e em (c) 100 nm.



Fonte: Produzido pelo autor

comportamento que revela a ação das interações autodesmagnetizantes. Este tipo de efeito se destaca, pois as componentes mencionadas não crescem (aumentam), apreciavelmente, antes de 0,3 ns. Já em aproximadamente 0,4 ns, podemos ver claramente um comportamento periódico, que se estabelece no ato de inversão dos momentos magnéticos. O mesmo movimento oscilatório se mantém durante toda a inversão caracterizado por mudanças de periodicidade em diferentes instantes para os três valores de distâncias, que são mostrados na Figura 59. Ainda neste gráfico é possível observar uma envoltória que é típica do processo exponencial de relaxação, claramente verificado na Figura 59 (b). Como supra citado, a amplitude destas oscilações diminuem depois de 0,9 ns Figura 59 (a), 1,2 ns Figura 59 (b) e 2,0 ns Figura 59 (c), mantendo-se o sistema perto da saturação e com pequenas oscilações dos momentos magnéticos em torno da direção de campo aplicado como previsto na equação de LLG. Nas Figuras 59 verificamos diferentes formas das envoltórias, relaxações, para tempos distintos, em (a) variando de 0,35 à 0,9 ns e 0,9 à 1,25 ns e em (c) variando de 0,35 à 0,9 ns e 0,9 à 2,0 ns, mas no caso da Figura (b) foi apresentado uma relaxação muito uniforme, estes diferentes efeitos para as relaxações está diretamente relacionado ao forte efeito dipolar no arranjo, estas mudanças surgem na competição

existente entre as energias do sistema.

6.3.3.2 Evolução temporal dos MAPAS para $\beta = 0,2$

Para entender melhor os resultados no arranjo com $\beta = 0,2$, realizamos um corte transversal no mapa 3D dos momentos magnéticos. O mencionado corte foi feito no plano XY ($Z = 0$ nm), que incluem os centros dos nanotubos no arranjo hexagonal e foi tomado em diferentes instantes, sendo os instantes de tempo descritos na Tabela 3. Na Figura 60 (a), (b), (c), (d) e (e), observamos os mapas 3D do arranjo de nanotubos, para os respectivos instantes citados na Tabela 3, sendo a distância entre os nanotubos de 0 nm, e as cores representando a orientação dos momentos no arranjo hexagonal. Observamos nas Figuras 60, 61 e 62 uma distribuição de cores para a magnetização em cada arranjo de nanotubos, estas escalas de cores especificam a orientação dos momentos magnéticos para cada intervalo de tempo.

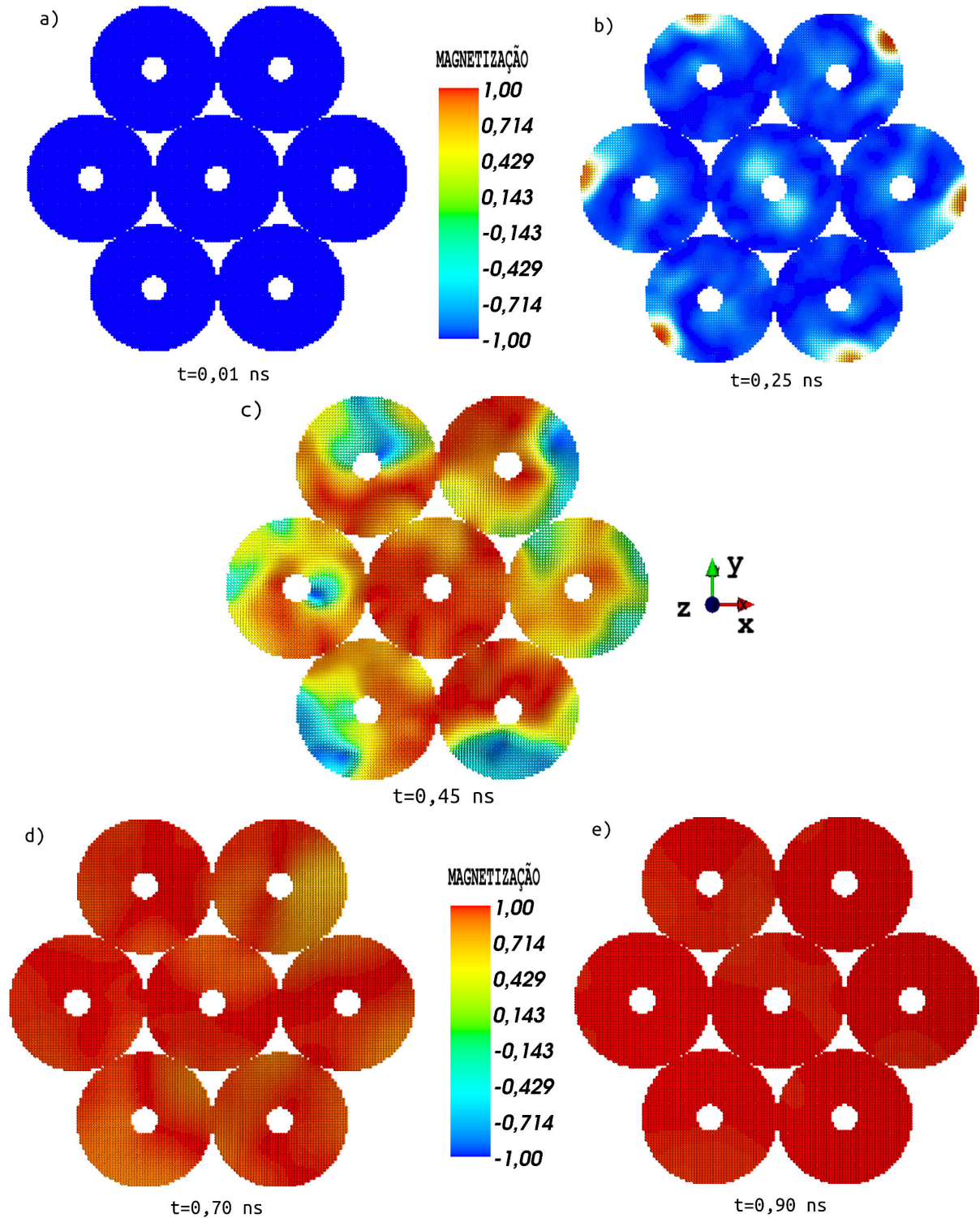
Tabela 3 – Os tempos e distâncias entre nanotubos para confecção dos mapas magnéticos.

<i>Distâncias</i>	$t_1(\text{ns})$	$t_2(\text{ns})$	$t_3(\text{ns})$	$t_4(\text{ns})$	$t_5(\text{ns})$
0 nm	0,01	0,25	0,45	0,7	0,9
55 nm	0,01	0,3	0,5	0,7	1,0
100 nm	0,01	0,3	0,5	0,7	1,0

Fonte: Produzido pelo autor.

A Figura 60 (a) mostra uma seção transversal da configuração do vetor momento magnético, $\vec{m}$, em $t = 0,01$ ns. Observe que nesse instante todos os momentos estão na direção negativa do eixo Z . Para a Figura 60 (b), mostra-se $\vec{m}$ em $t = 0,25$ ns e que a maior parte dos momentos ainda permanecem na direção negativa do eixo Z , além disso, podemos verificar que a inversão é iniciada nas bordas do arranjo, o que nos leva a pensar numa competição entre energia autodesmagnetizante global da amostra e o resto das energias, como a forte influência das interações dipolares. Falamos isto porque como mencionamos, a inversão está destacada nas bordas do arranjo, as quais são adjacentes ao campo magnético aplicado. Esta configuração não ocorre para o nanotubo isolado, como foi observado na Figura 43, pois a inversão dos momentos magnéticos é iniciada no meio e direcionada as extremidades do nanotubo. Para a Figura 60 (c), o instante 0,45 ns, é observado que a inversão dos momentos magnéticos já alcançou o centro do arranjo, e uma menor parte dos momentos ainda se encontram na direção negativa do eixo Z , este processo está na metade da descida da evolução da energia de troca. Este instante de tempo indica uma mistura de configurações locais, que são as reponsáveis por levar os momentos à direção positiva do eixo Z . Finalizando esta análise, na Figura 60 (d) e (e), observamos que nos instantes 0,7 ns e 0,9 ns, os momentos se encontram orientados com o campo magnético

Figura 60 – Evolução temporal das componentes da magnetização para $\beta = 0,2$ no arranjo de nanotubos no plano XY para distância 0 nm. Em (a) 0,01 ns, (b) 0,25 ns, (c) 0,45 ns, (d) 0,70 ns e (e) 0,90 ns. A distribuição de cores apresenta a orientação dos momentos.



Fonte: Produzido pelo autor

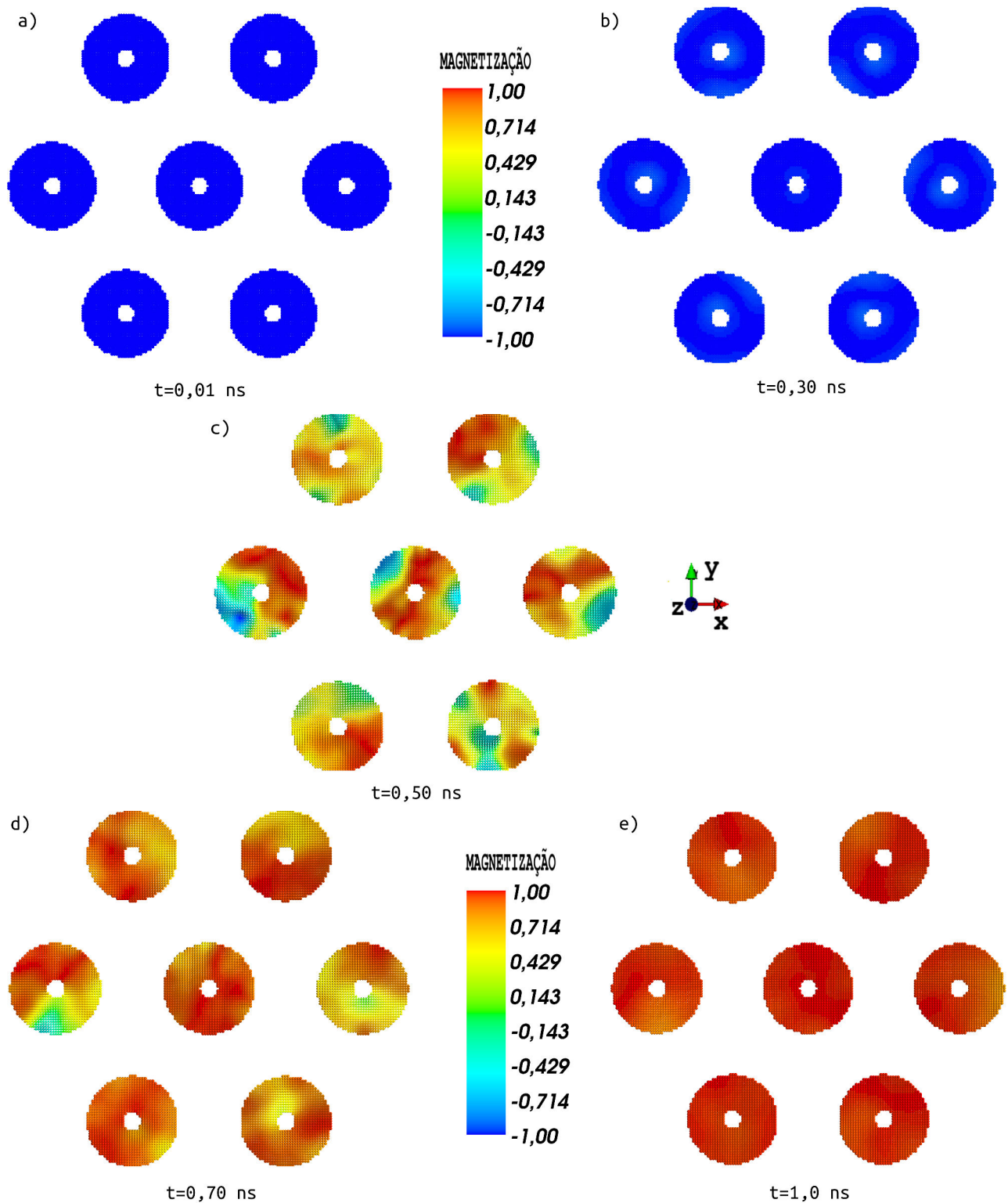
externo. Nesta configuração é importante destacar que, aparentemente, as interações dipolares

são as reponsáveis pela inversão dos momentos magnéticos ($\vec{m}$), isto foi verificado nas Figuras 60 (b) e (c). Podemos analisar e comparar com os mapas de magnetização para as distâncias entre os nanotubos de 55 nm e 100 nm.

Nas Figuras 61 (a), (b), (c), (d) e (e), apresentamos os mapas do arranjo de nanotubos, para os respectivos instantes citados na Tabela 3 com a distância entre os nanotubos de 55 nm. Nas Figuras 61 (a) e (b), nos instantes 0,01 ns e 0,3 ns, observamos que todos os momentos estão apontando para a direção negativa do eixo Z, salientando que no instante 0,3 ns, tem-se o valor próximo ao máximo (pico) da energia de troca e a partir deste instante, inicia-se a inversão dos momentos magnéticos como é observado na Figura 61 (c). Ainda sobre a Figura 61 (c), instante 0,5 ns, é verificado que a maior parte dos momentos magnéticos já reverteram seu alinhamento, passando para a direção positiva do eixo Z, e como podemos observar na Figura 60 (c), a inversão dos momentos alcançou o centro do arranjo. Além destas análises, é importante observar que o arranjo mostrado leva um tempo um pouco maior (a partir de 0,3 ns) para iniciar a reversão dos momentos, isto é explicado devido ao distanciamento entre os nanotubos, diminuindo a energia de interação de troca, Figuras 61 (a) e (b). Outra observação que podemos fazer está na Figura 61 (c), em que a configuração apresentada pelos momentos indica a formação de vórtices na periferia do arranjo, como também pode ser visto na Figura 60 (c). Para as Figuras 61 (d) e (e), instantes 0,7 ns e 1,0 ns, é verificado a total inversão dos momentos magnéticos, ou seja, estão orientados na mesma direção que o campo magnético externo.

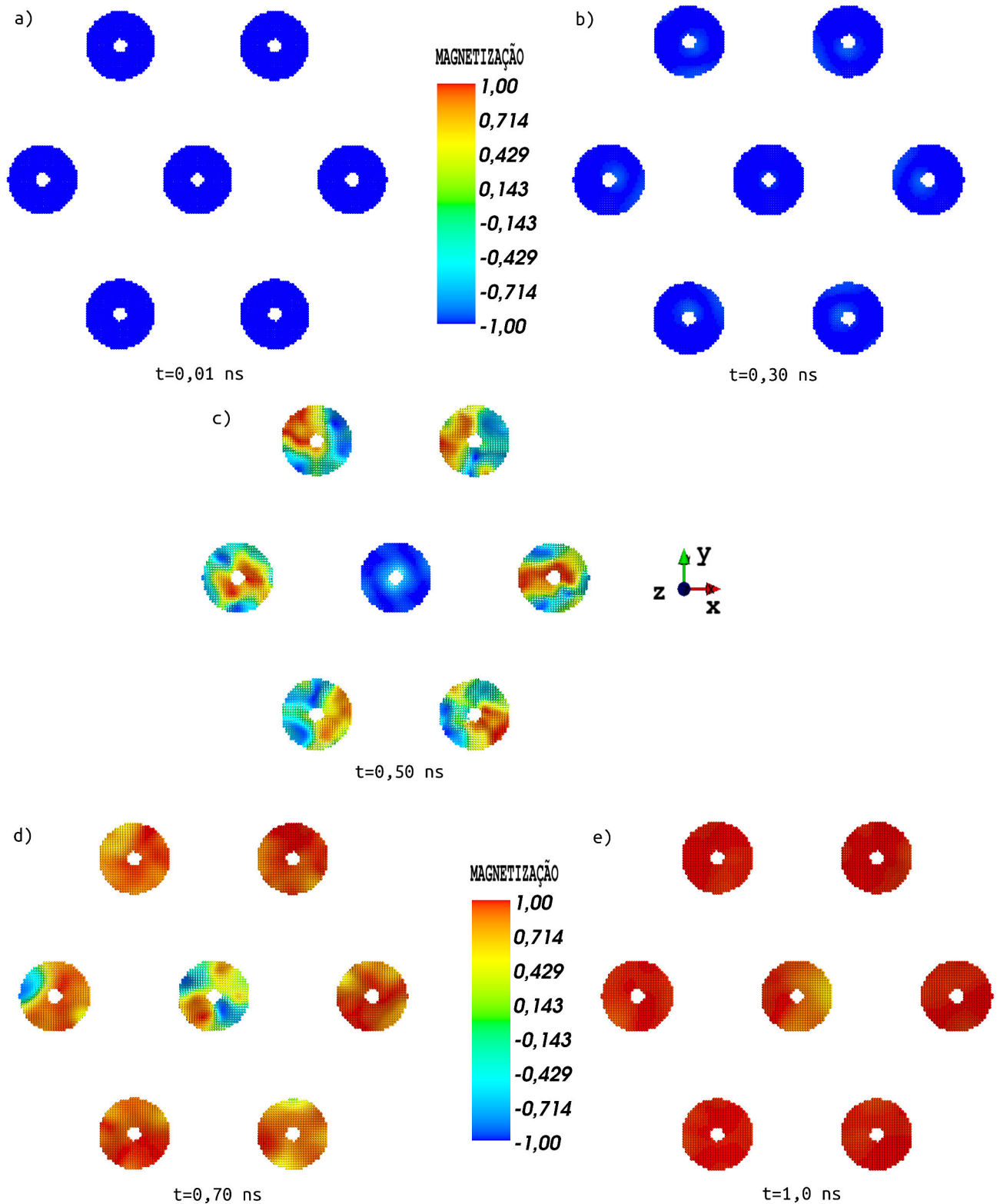
Na Figura 62 analisaremos o mapa dos momentos magnéticos, neste caso a distância entre as superfícies dos nanotubos será de 100 nm. Inicialmente, nos instantes 0,01 ns e 0,3 ns, os momentos magnéticos apresentam um alinhamento total na direção negativa do eixo Z, Figuras 62 (a) e (b). Na Figura 62 (c), observa-se que grande parte dos momentos já iniciaram o processo de inversão, e podemos verificar o princípio de reversão através da Figura 59 (c), para o instante 0,5 ns. Além destas análises, tem-se que ao centro do arranjo, os momentos apresentam alinhamento como no início do processo, instante 0,01 ns. Isto ocorre devido à competição entre a energia autodesmagnetizante global do arranjo e o resto das energias, como já mencionado nos textos acima, sendo mais perceptível nesta Figura 62 (c) devido à maior distância entre as superfícies dos nanotubos, diminuindo a energia de troca, como verificado na Figura 58. Assim como na Figura 61 (c), a configuração apresentada aqui pelos momentos indica a formação de vórtices na periferia do arranjo, como também pode ser visto na Figura 60 (c). As Figuras 62 (d) e (e) evidenciam a mudança de direção (inversão) dos momentos, na qual indica o alinhamento com o eixo Z positivo, ou seja, na direção do campo externo. É de suma importância observar que estes mapas são um corte do mapa 3D, o qual compreende os pontos que incluem os centros do arranjo de nanotubos. Em comparação ao arranjo de um único nanotubo, a configuração dos momentos magnéticos para $d = 100$ nm é a que mais se assemelha, pois para este arranjo a interação tende a diminuir com a distância entre os nanotubos, como ocorre no caso do nanotubo isolado.

Figura 61 – Evolução temporal das componentes da magnetização a para $\beta = 0,2$ no arranjo de nanotubos no plano XY para distância 55 nm. Em (a) 0,01 ns, (b) 0,30 ns, (c) 0,50 ns, (d) 0,70 ns e (e) 1,0 ns. A distribuição de cores apresenta a orientação dos momentos magnéticos no arranjo para $H_a = 500$ mT.



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 62 – Evolução temporal das componentes da magnetização para $\beta = 0,2$ no arranjo de nanotubos no plano XY para distância 100 nm. Em (a) 0,01 ns, (b) 0,30 ns, (c) 0,5 ns, (d) 0,70 ns e (e) 1,0 ns. A distribuição de cores apresenta a orientação dos momentos magnéticos no arranjo para $H_a = 500$ mT.



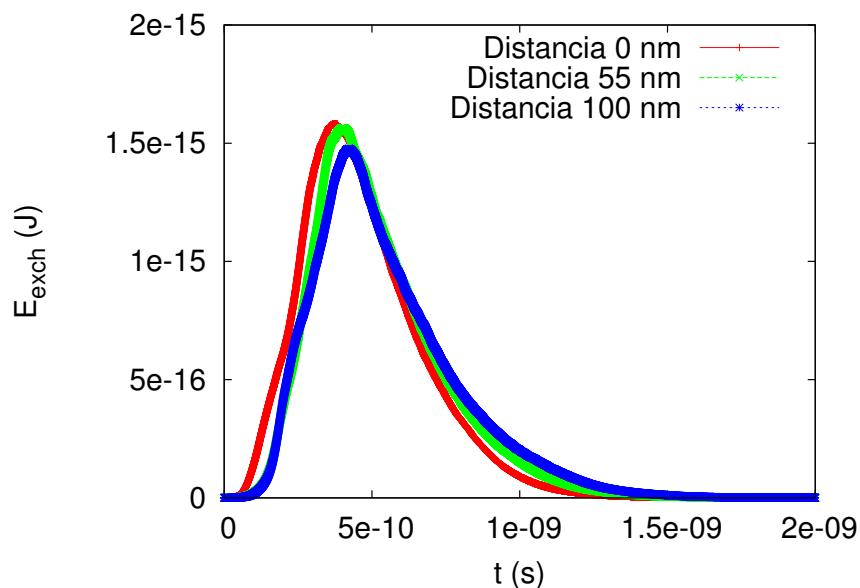
Fonte:Produzido pelo autor

Neste tópico verificamos algumas diferenças entre os resultados obtidos, na razão $\beta = 0,2$, para um único nanotubo e um arranjo hexagonal de nanotubos. Assim, a principal diferença está na configuração dos momentos magnéticos, este fato ocorre devido à competição energética existente, como já mencionado. O próximo tópico mostra como a espessura (β) pode modificar este quadro.

6.3.3.3 Simulação mantendo fixa a razão $\beta = 0,8$ e variando as distâncias

Neste tópico apresentamos a dependência temporal da energia de troca e das componentes X e Y da magnetização para o arranjo hexagonal de nanotubos de níquel, com a razão $\beta = 0,8$ e as distâncias $d = 0$ nm, 55 nm e 100 nm, e como dito anteriormente, os gráficos foram produzidos com a ajuda do *software Octave*. Além disso, mostramos aqui os mapas da magnetização para certos intervalos de tempo, descritos na Tabela 4. Mais uma vez, os efeitos de espessura modificam os tempos característicos da evolução temporal, como já mencionado.

Figura 63 – Energia de troca evoluindo temporalmente para a razão $\beta = 0,8$ e $H_a = 500$ mT.



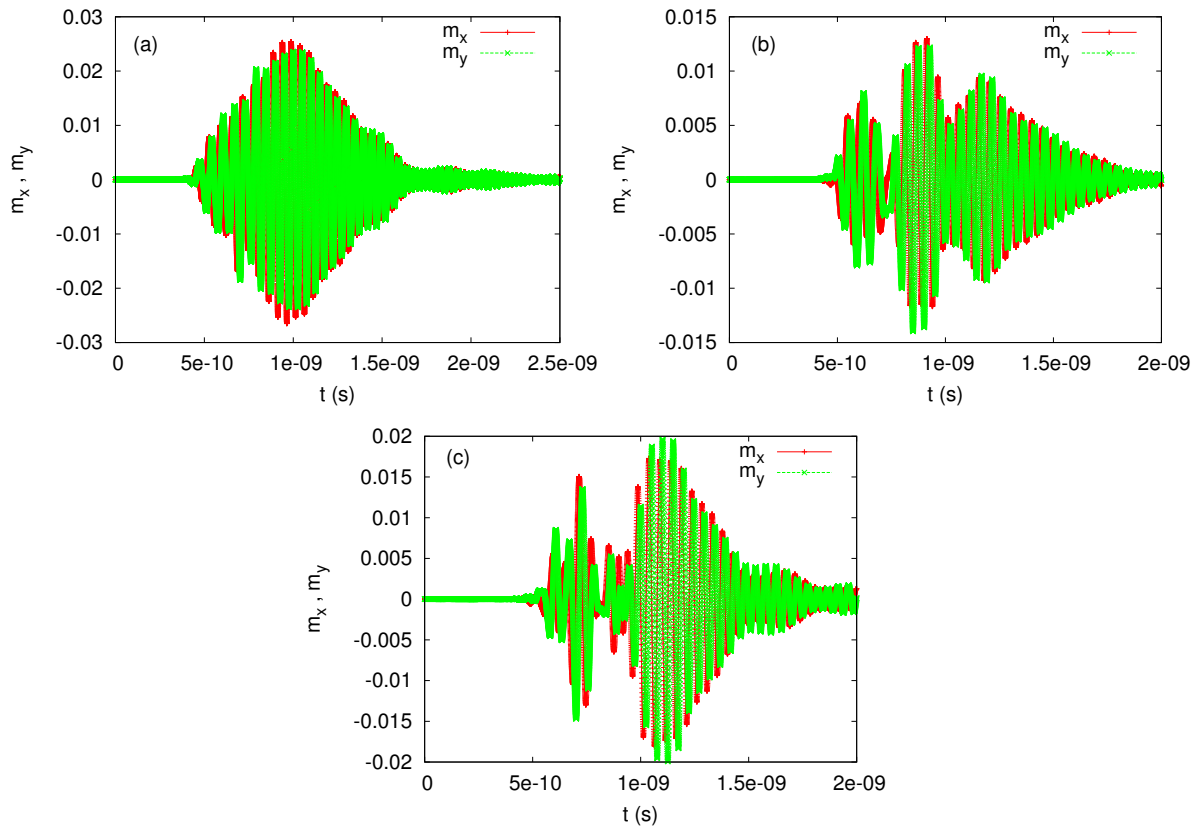
Fonte: Produzido pelo autor

Na Figura 63, apresentamos a dependência da energia de troca com o tempo, durante a reversão dos momentos, no arranjo com $\beta = 0,8$. Dois aspectos tornam este gráfico diferente daqueles apresentados até o momento, Figura 58. Primeiramente, para $\beta = 0,8$, a energia de troca mostra uma tendência, mais rápida, do sistema mudar a direção dos momentos magnéticos. Por outra parte, os efeitos de autodesmagnetização dentro do arranjo de nanotubos devem ser fortes. Dessa forma há uma tendência dos momentos magnéticos de voltar ao estado inicial, por isso a energia de troca sofre uma grande diminuição, como pode ser verificado, principalmente, para os gráficos da distância $d = 0$ nm e razões $\beta = 0,2$ e $0,8$. Por outro lado, o campo para reverter

todos os momentos, não precisa de um valor alto de energia, como no caso de $\beta = 0,2$, já que agora o arranjo apresenta uma quantidade menor de momentos magnéticos em cada nanotubo. Além destas evidências, tem-se que para a razão $\beta = 0,8$ e as distâncias de $d = 55$ nm e 100 nm, os picos apresentam valores da energia de troca menores, com isso o sistema termina se direcionando para o estado de saturação.

A segunda característica que chama atenção no gráfico da Figura 63 que está relacionada à espessura da curva, é o tempo de inversão, que neste caso, torna-se maior que nas outras amostras aqui apresentadas.

Figura 64 – Evolução temporal das componentes m_x e m_y da magnetização e suas respectivas distâncias: 0 nm, 55 nm e 100 nm.



Fonte: Produzido pelo autor

Observando a Figura 64 podemos ver a dinâmica das componentes da magnetização, que são perpendiculares ao campo aplicado. Presenciamos uma curva com oscilações de amplitudes muito maiores que em $\beta = 0,2$. Para $\beta = 0,8$ e $d = 0$ nm, apresenta uma característica de oscilações bem comportadas e localizadas no intervalo de 0,5 ns e 1,7 ns. E para todos os gráficos na Figura 64, a relaxação neste arranjo ocorre depois de 2 ns e como comparação, isto só ocorreu para $\beta = 0,2$ e $d = 100$ nm, Figura 59 (c), o que se refere a um tempo muito alto. Assim como foi observado para a razão $\beta = 0,2$, a configuração das envoltórias, dos momentos em função do tempo para a razão $\beta = 0,8$, apresenta-se desta forma devido à forte influência

da energia dipolar no arranjo, isto em consequência da menor espessura dos nanotubos, estas características surgem por competições existentes entre as energias do sistema, como citado no texto.

6.3.3.4 Evolução temporal dos MAPAS para $\beta = 0,8$

Para entender melhor os resultados no arranjo com $\beta = 0,8$, realizamos um corte transversal no mapa 3D dos momentos magnéticos. O corte foi feito no plano XY ($Z = 0$ nm), caso igual ao da razão $\beta = 0,2$, sendo os instantes de tempo descritos na Tabela 4.

Tabela 4 – Os tempos e distâncias entre nanotubos para confecção dos mapas magnéticos.

<i>Distâncias</i>	$t_1(\text{ns})$	$t_2(\text{ns})$	$t_3(\text{ns})$	$t_4(\text{ns})$	$t_5(\text{ns})$
0 nm	0,01	0,20	0,35	0,55	1,20
55 nm	0,01	0,28	0,40	0,60	1,20
100 nm	0,01	0,30	0,40	0,60	1,80

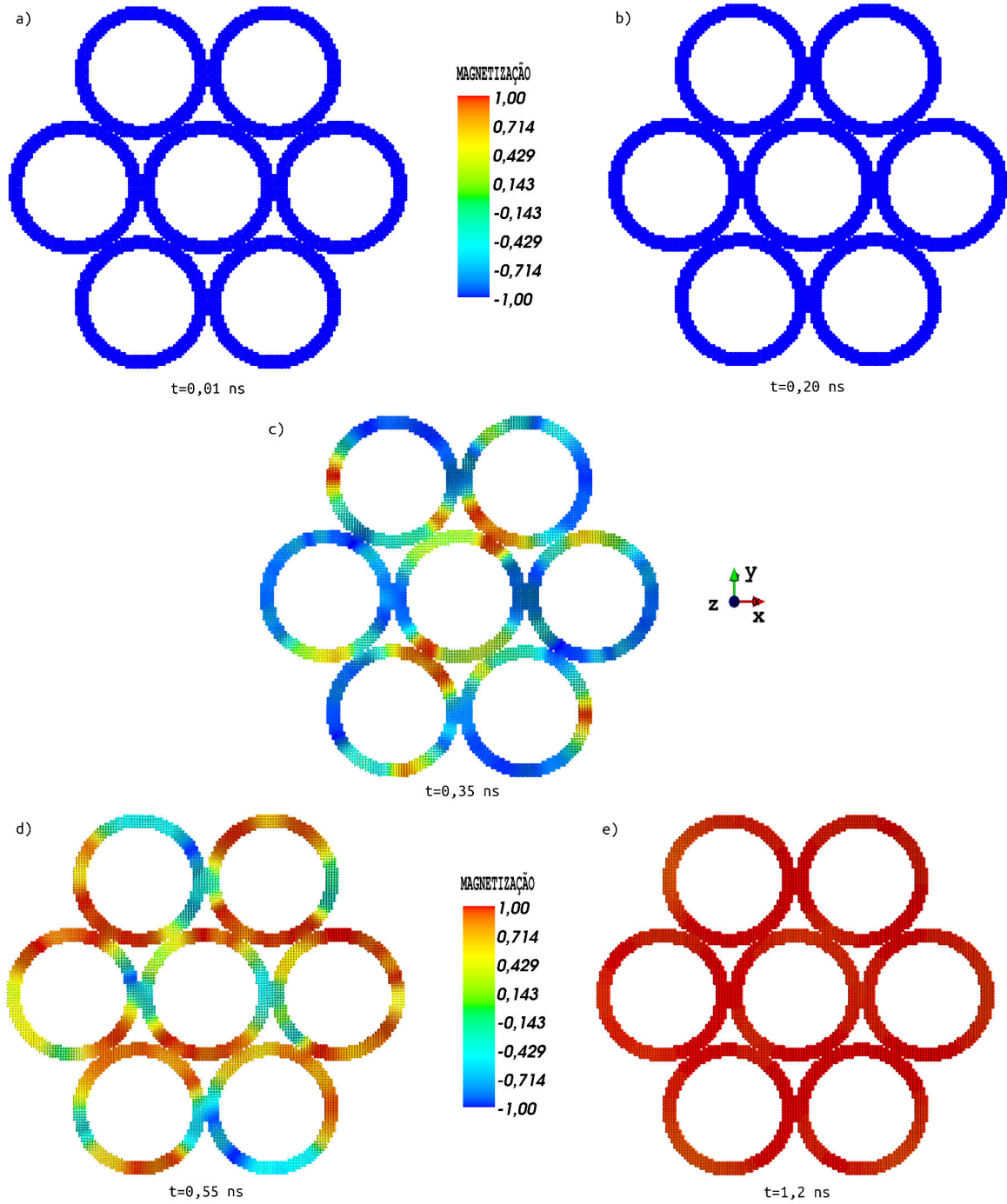
Fonte: Produzido pelo autor.

Na Figura 65, analisa-se a evolução dos momentos magnéticos como função do tempo para a distância entre os nanotubos magnéticos de 0 nm. Na Figura 65 (a) podemos observar o mapa em 0,01 ns que apresenta uma estrutura de momentos bem comportada, com todos os momentos magnéticos orientados sob o eixo Z negativo, e observamos uma configuração idêntica no intervalo de tempo 0,20 ns, Figura 65 (b). No intervalo 0,35 ns, apresentado na Figura 65 (c), o comportamento é bem diferente aos anteriores, pois os momentos magnéticos apontam para fora do plano do mapa, o que podem contribuir, fortemente, com o aumento da energia de troca do sistema. Observamos que no instante 0,55 ns, Figura 65 (d), as características se tornam mais pronunciadas, em que grande parte dos momentos estão na direção positiva do eixo Z , em ambas as Figuras 65 (c) e (d), as configurações apresentadas estão diretamente relacionadas à influência da interação dipolar no arranjo. Na Figura 65 (e), intervalo 1,20 ns, todos os momentos encontram-se alinhados ao campo magnético. Com isso, em comparação à Figura 60 ($\beta = 0,2$ e $d = 0$ nm), é claramente observado que o tempo de relaxação dos momentos é maior, que é um forte indicativo da diminuição da energia de troca neste arranjo.

É apresentado na Figura 66, os gráficos para a razão $\beta = 0,8$ e distância $d = 55$ nm. Assim, como foi observado na Figura 65, verificamos nas Figuras 66 (a) e (b) a mesma orientação dos momentos, neste caso para os instantes de 0,01 ns e 0,28 ns. Nas Figuras 66 (c) e (d) é observado que a inversão dos momentos magnéticos ocorre nas extremidades (bordas) em direção ao centro do arranjo, como já citado é um indicativo da competição entre energia autodesmagnetizante global da amostra e as outras energias, acontecendo para os intervalos de tempo 0,40 ns e 0,60

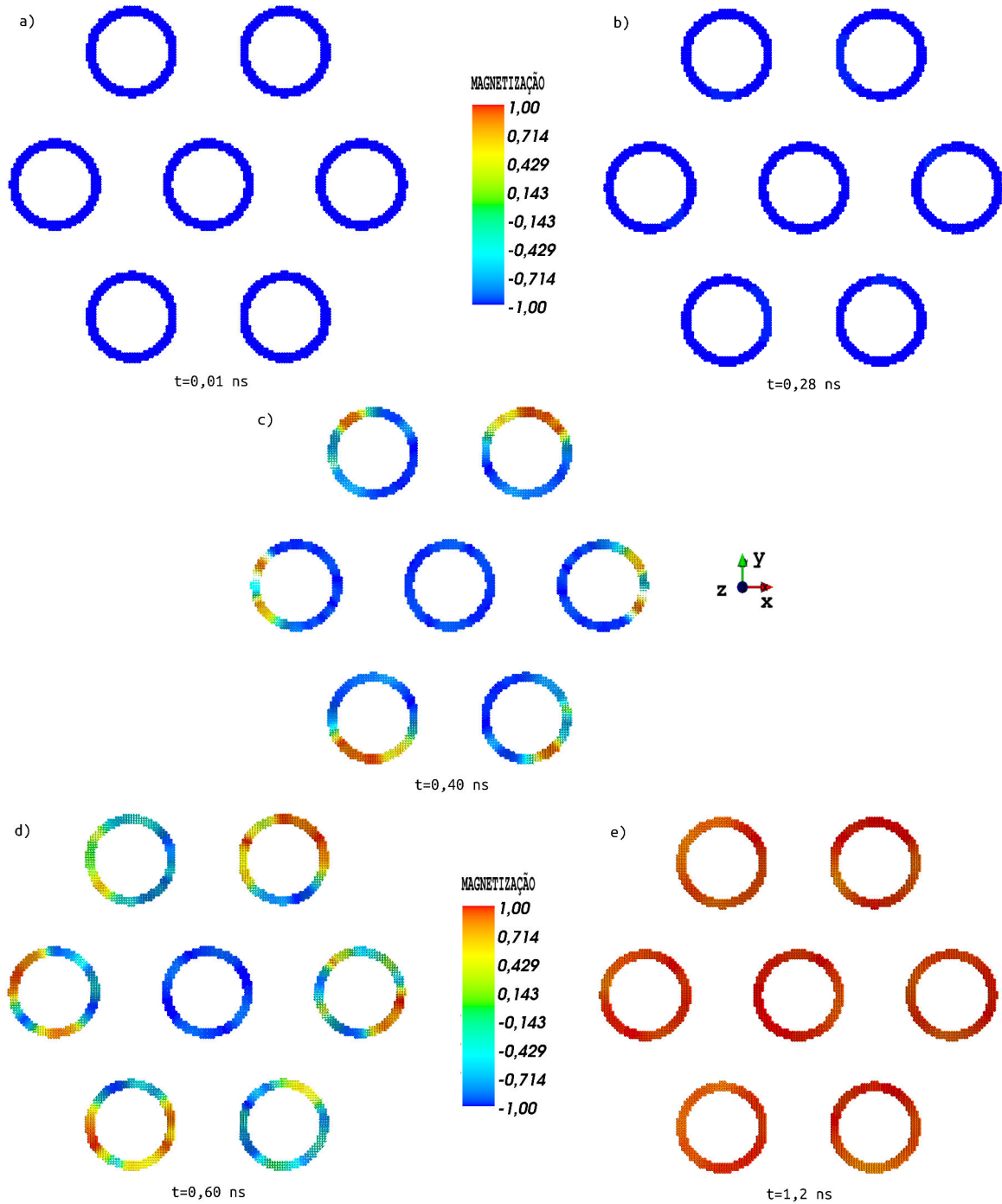
ns, sendo que este efeito não foi verificado para $\beta = 0,2$ e $d = 55$ ns. A configuração apresentada na Figura 66 (e), mostra a inversão total dos momentos magnéticos no arranjo hexagonal.

Figura 65 – Evolução temporal das componentes para $\beta = 0,8$ no arranjo de nanotubos no plano XY para distância 0 nm. Em (a) 0,01 ns, (b) 0,20 ns, (c) 0,35 ns, (d) 0,55 ns e (e) 1,2 ns. A distribuição de cores apresenta a orientação dos momentos magnéticos no arranjo para $H_a = 500$ mT.



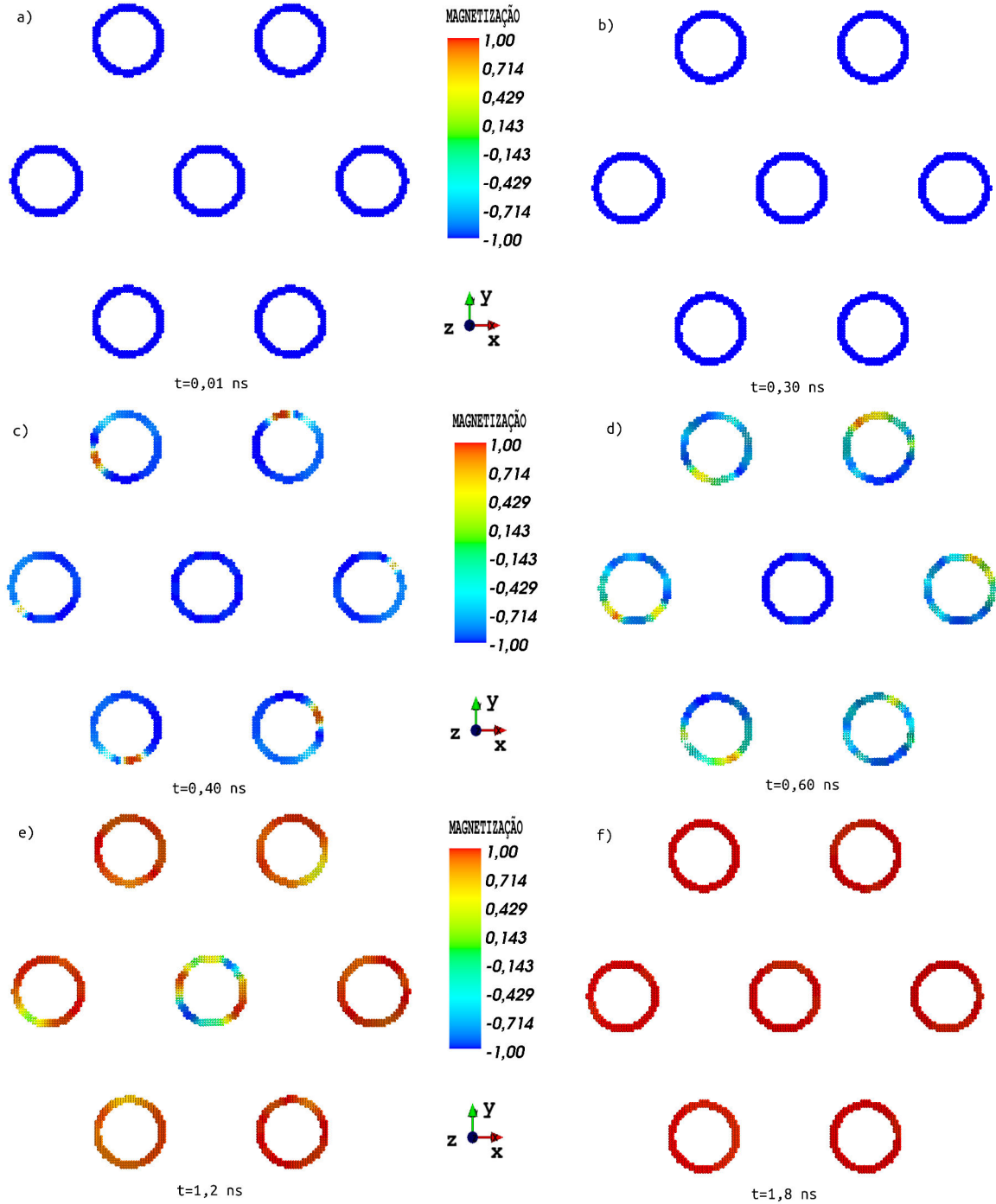
Fonte: Produzido pelo autor

Figura 66 – Evolução temporal das componentes para $\beta = 0,8$ no arranjo de nanotubos no plano XY para distância 55 nm. Em (a) 0,01 ns, (b) 0,28 ns, (c) 0,40 ns, (d) 0,60 ns e (e) 1,2 ns. A distribuição de cores apresenta a orientação dos momentos magnéticos no arranjo para $H_a = 500$ mT.



Fonte: Produzido pelo autor

Figura 67 – Evolução temporal das componentes para $\beta = 0,8$ no arranjo de nanotubos no plano XY para distância 100 nm. Em (a) 0,01 ns, (b) 0,30 ns, (c) 0,40 ns, (d) 0,60 ns, (e) 1,2 ns e (f) 1,8 ns. A distribuição de cores apresenta a orientação dos momentos magnéticos no arranjo para $H_a = 500$ mT.



Fonte: Produzido pelo autor

Finalizando o estudo sobre a dinâmica da magnetização, faremos a análise mediante a geometria do arranjo hexagonal para $\beta = 0,8$ e $d = 100$ nm. Inicialmente, na Figura 67 (a) e (b),

nos instantes 0,01 ns e 0,30 ns, os momentos magnéticos possuem uma orientação oposta ao campo aplicado, como já destacado anteriormente. Observamos durante a evolução temporal, nos instantes 0,40 ns na Figura 67 (c) e 0,60 ns na Figura 67 (d), o início do movimento dos momentos nas bordas do arranjo, como verificado nas Figuras. Este efeito mostra, claramente, a influência da espessura dos nanotubos (β), na inversão da magnetização, pois como visto na Figura 62, para este intervalo de tempo, a configuração dos momentos magnéticos apresentada aqui é diferente no nanotubo central. Para o instante 1,20 ns, Figura 67 (e), grande parte dos momentos se encontram na mesma direção que o campo aplicado no arranjo. É importante observar que o tempo de inversão foi aumentado, Figura 67 (f), este fato é decorrente da menor interação existente no arranjo devido à menor quantidade de momentos magnéticos no arranjo. Como descrito para a razão $\beta = 0,2$ e $d = 100$ nm, em comparação ao nanotubo isolado, Figura 44, um arranjo hexagonal de nanotubos apresenta a principal diferença, na razão $\beta = 0,8$ e $d = 100$ nm, no ordenamento dos momentos magnéticos e este fato ocorre devido à competição entre as energias existentes no sistema.

Sendo assim, até aqui temos que as interações dipolares dominam os processos em função de β , além do mais é de grande importância incluir outras energias. Como analisado, anteriormente, modificações da espessura β chegam a alterar algumas propriedades do arranjo, tais como: o comportamento da energia, a forma das curvas da magnetização no plano XY, como é perceptível nas Figuras 59 e 64, sendo o comportamento da relaxação modificado, e a configuração dos momentos magnéticos (mapas) são apresentados nas Figuras 60, 61, 62, 65, 66 e 67.

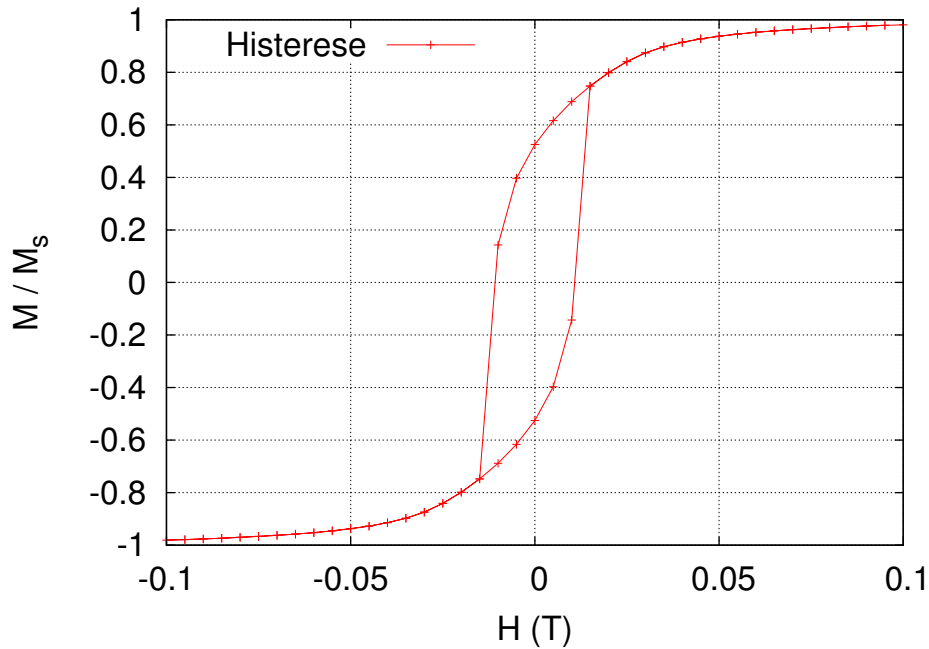
Na próxima seção, apresentaremos o estudo da reversão dos momentos magnéticos em função de um campo invertido.

6.4 ESTUDO DA REVERSÃO DOS MOMENTOS MAGNÉTICOS EM FUNÇÃO DO CAMPO INVERTIDO

Nesta seção, abordaremos a reversão dos momentos como função do campo invertido repentinamente, em que foi estudado um único nanotubo com parâmetros geométricos definidos por: razão $\beta = 0,5$, raio externo $R = 100$ nm e comprimento de $L = 1$ μ m. Estes parâmetros foram baseados nas informações retiradas de nanotubos da literatura [79, 118]. As análises anteriores foram feitas aplicando o campo externo H_{ext} invertido com valores altos, Figura 57. Aqui vamos observar o cenário para diversos valores do campo externo $H_{ext} < 0$ ($H_{ext} = -\Delta H$, com $\Delta H = 5, 10, 20, 50$ e 110 mT), Figura 68. Estes estudos são bastante observados na literatura como o *plot Henkel* [119], *plot Henkel* é uma análise que se faz em equilíbrio termodinâmico e a remanência é obtida em diversos valores de campo invertido. Neste caso, faremos o estudo dinâmico que mostra relaxação do sistema saturado depois de inverter H_{ext} a diferentes valores. Esta teoria é utilizada em diversos seguimentos de estudo, como pode ser verificada nas referências [120–122]. Sendo assim, todas as análises são feitas sob o ponto de vista da energia Zeeman (E_{Zeeman}) final

possuindo valores diferentes e com isso, cada caso na evolução temporal de m_z , ao longo do campo aplicado, e de E_{exch} são comparados.

Figura 68 – Laço de Histerese utilizado na variação de ΔH .



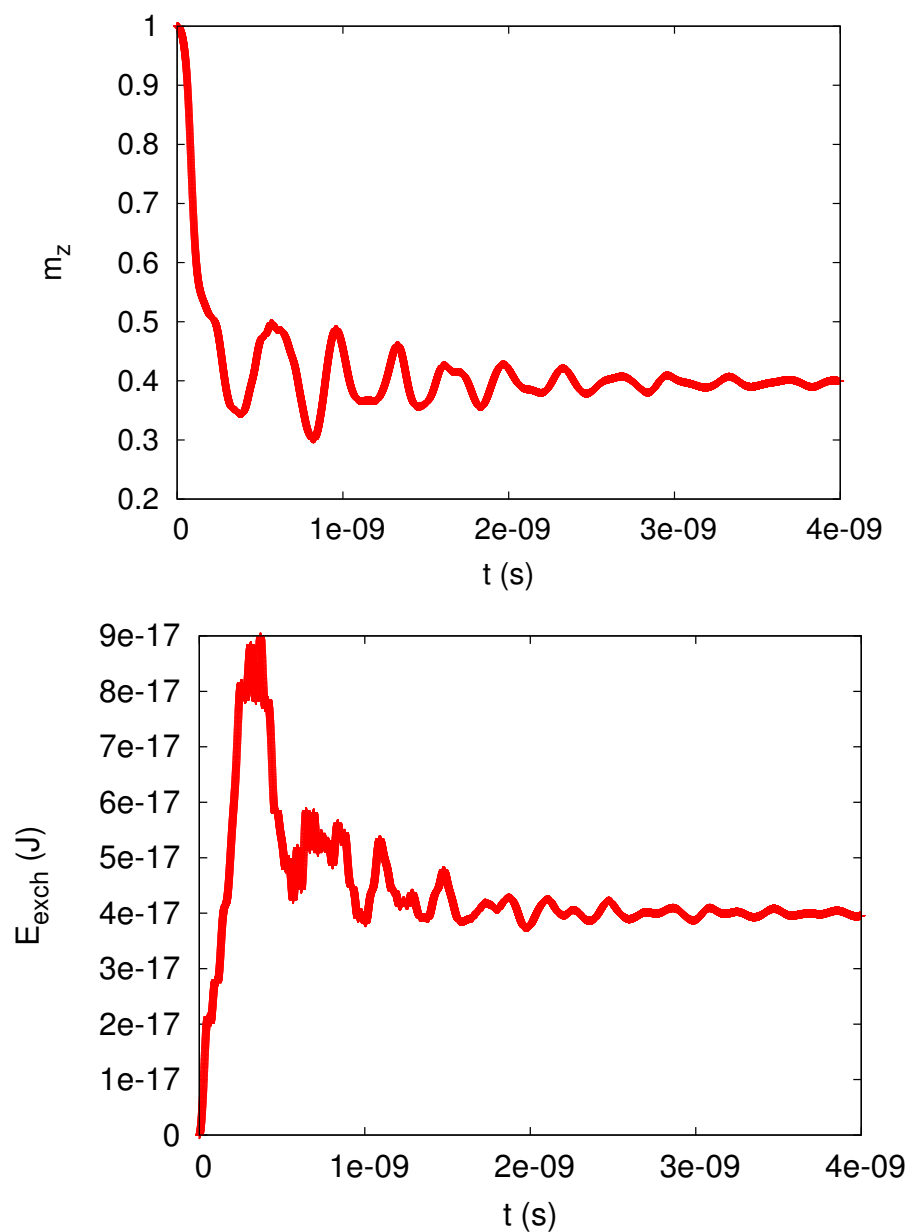
Fonte: Produzido pelo autor

O estudo e interpretação desta teoria fornecem informações valiosas sobre os mecanismos de interação, que regem os processos de magnetização, uma vez que se inclui a energia Zeeman [123–125]. Com isso, para determinar uma sequência consecutiva de valores de campo que são utilizados neste tópico, fez-se necessário utilizar um modelo de histerese, cujos parâmetros geométricos do nanotubo foram descritos no parágrafo anterior. Esta curva de histerese está descrita na Figura 68, observamos que a amostra alcançou a magnetização de saturação para um campo de 100 mT. Na Figura 69, analisamos a evolução temporal da energia de troca E_{exch} e da componente Z do momento magnético m_z , para um campo $\Delta H = -5$ mT.

Podemos analisar, inicialmente, o gráfico do momento magnético (m_z) como função do tempo. Observamos que há oscilações durante a evolução temporal, que neste caso o tempo evolue até 4 ns, com um valor de m_z em torno de 0,4. Verificamos também que para um tempo muito grande ($t \rightarrow \infty$), m_z apresenta este mesmo valor 0,4, e além deste fato, a oscilação é quase uniforme, diminuindo a amplitude a partir do instante 3 ns. Com isso, verifica-se que os momentos (m_z) não se encontram alinhados para o campo de -5 mT, precisando aplicar um campo magnético mais intenso. Fazendo um análise comparativa entre as Figuras 68 e 69, percebemos que o valor da magnetização (M/M_s) na curva de histerese, para o campo de -5 mT, é de 0,3994, sendo muito próximo do valor encontrado para m_z visto no gráfico da evolução temporal, este fato é coerente, pois como o valor do campo é mantido fixo, os momentos irão manter seu estado de equilíbrio nesta direção. Na Figura 69 também apresentamos a evolução

temporal da energia de troca. Neste gráfico, percebe-se a presença de diversos picos, exibindo um máximo no instante 0,5 ns, este fato é referente a uma rápida tendência do momentos magnéticos mudarem de direção, fazendo com que retornem ao estado inicial. Observamos que no mesmo instante, para o gráfico de m_z , ocorre o início das oscilações, como destacado no parágrafo acima, sugerindo o aparecimento deste valor máximo da energia. Percebe-se que o valor final da energia de troca se mantém em 4×10^{-17} J, isto a partir do instante 3 ns, estando diretamente relacionado ao gráfico do momento m_z neste mesmo intervalo de tempo.

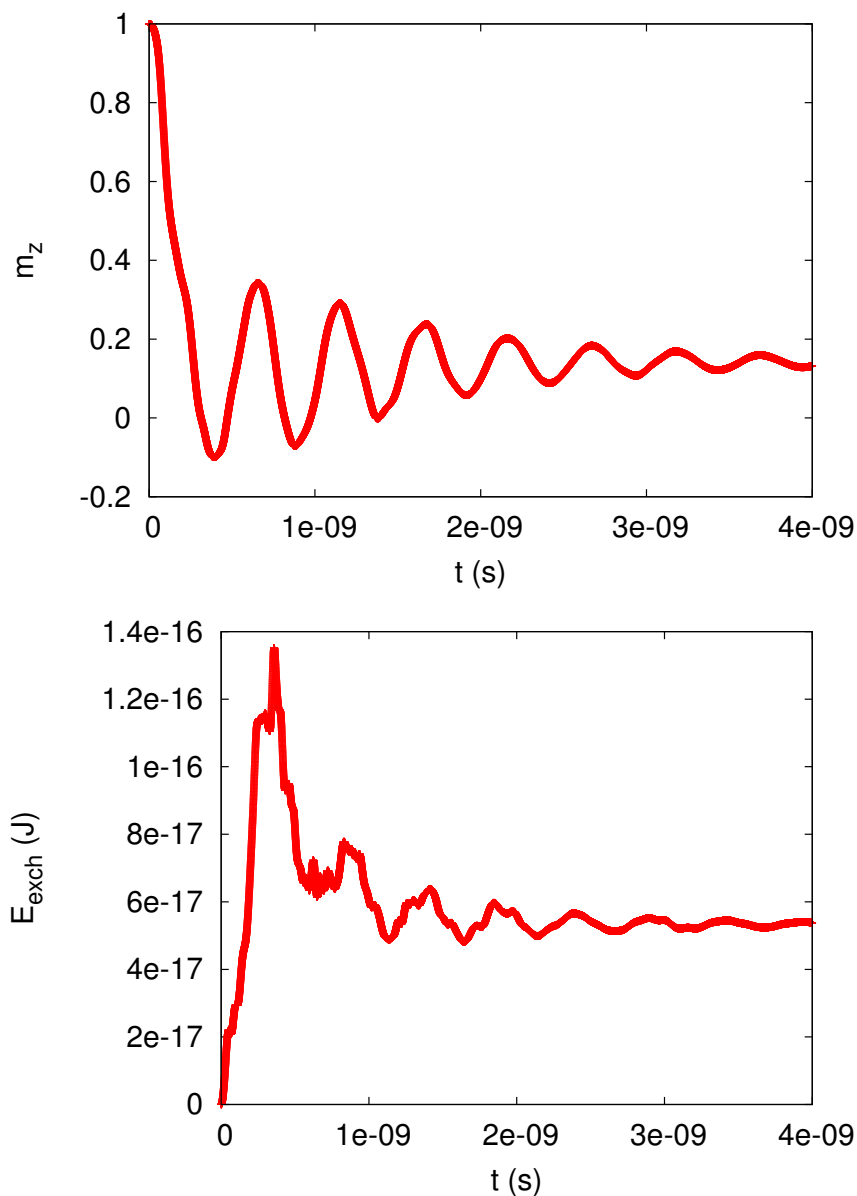
Figura 69 – Evolução temporal da componente m_z da magnetização e da energia de troca E_{exch} para uma variação de campo $\Delta H = -5$ mT.



Fonte: Produzido pelo autor

Na Figura 70, mostramos a componente m_z da magnetização e a energia de troca como função do tempo, aplicando o campo $\Delta H = -10$ mT. Em uma análise comparativa com a Figura 69, podemos observar que no gráfico de m_z , a oscilação é uniforme, além de apresentar um comportamento oscilatório amortecido, e assim como na Figura 69, apresenta diminuição da amplitude a partir do instante 3 ns. Um fato importante na Figura 70 é o valor médio, aproximadamente 0,15, da componente m_z da magnetização, que variou com o valor do campo como esperado, pois com o aumento do campo magnético, o momento magnético tem a tendência de mudar o seu estado de equilíbrio devido à mudança de direção. Podemos observar uma similaridade, nos valores dos momentos, entre a curva de histerese ($M/M_z = 0,1415$) e o gráfico

Figura 70 – Evolução temporal da componente m_z da magnetização e da energia de troca E_{exch} para uma variação de campo $\Delta H = -10$ mT.

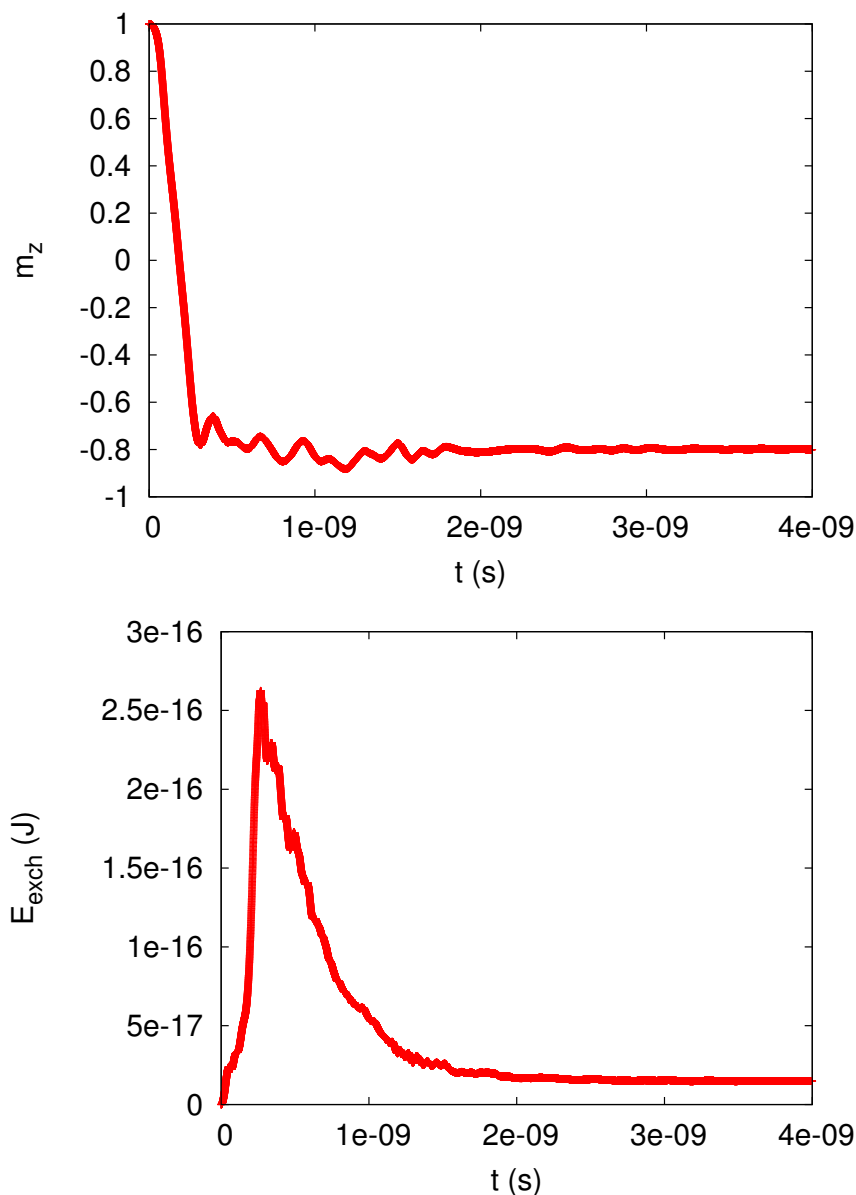


Fonte: Produzido pelo autor

de m_z ($m_z = 0,15$ para $t \rightarrow \infty$), pois o campo magnético é mantido fixo, os momentos mantêm o estado de equilíbrio nesta direção. Na comparação entre as energias de troca para os gráficos das Figuras 69 e 70, observamos que o valor máximo da energia aumentou apreciavelmente, como pode ser verificado no instante 0,5 ns. Neste caso, a energia de troca se modificou, pois para que o sistema mude a direção dos momentos é necessária mais energia Zeeman, claramente observado com o aumento do campo aplicado. Além destas comparações, podemos analisar que o valor final da energia de troca apresentou uma pequena mudança, sendo agora de 5×10^{-17} J.

Na Figura 71, analisamos a evolução do comportamento dos momentos m_z e da energia de troca em função do tempo. Observamos no gráfico de $m_z \times t$, a enorme diferença que há no

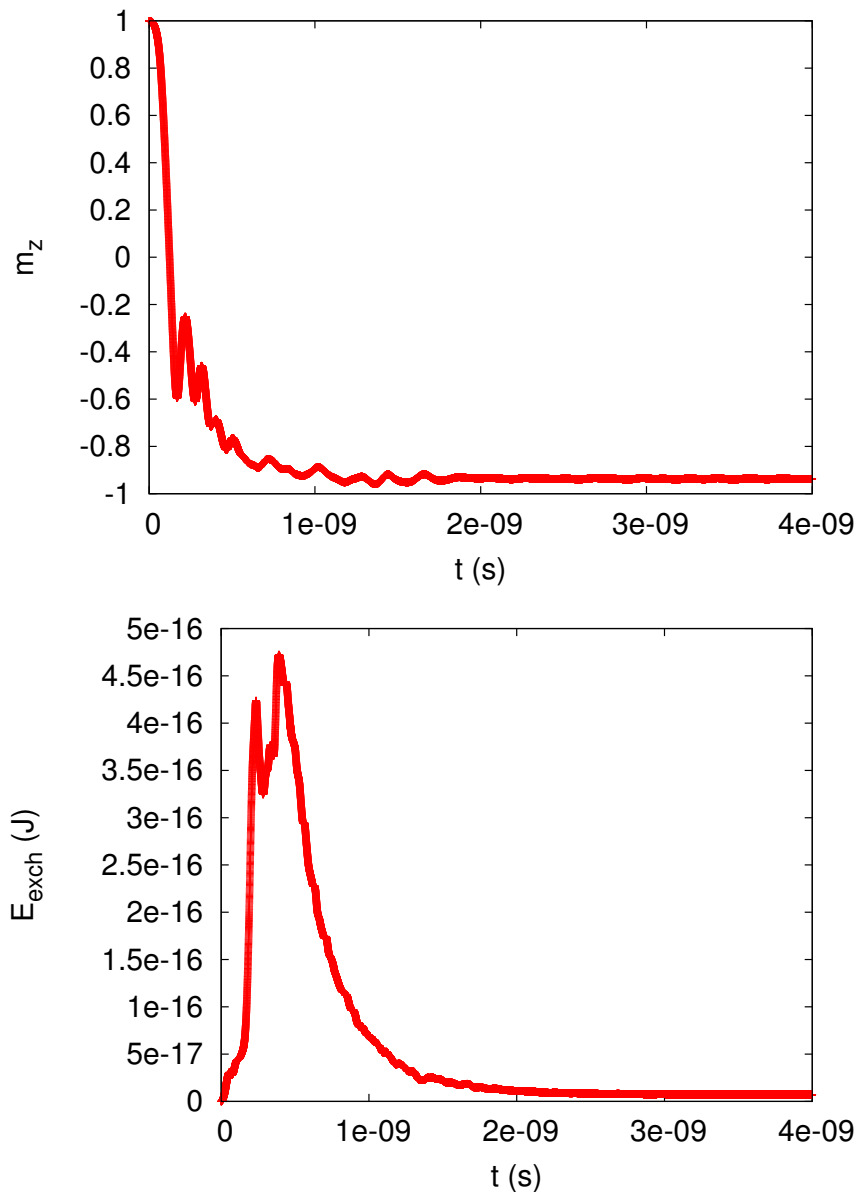
Figura 71 – Evolução temporal da componente m_z da magnetização e da energia de troca E_{exch} para uma variação de campo $\Delta H = -20$ mT.



Fonte: Produzido pelo autor

comportamento quando comparada as Figuras 69 e 70, neste caso, o campo aplicado com intensidade de 20 mT, representou uma modificação brusca na configuração dos momentos magnéticos. Além disso, verificamos oscilações com baixa amplitude, até 2 ns, e a partir deste instante, o valor de m_z está fixo em $-0,8$, que ao ser comparado ao valor encontrado na curva de histerese ($M/M_s = -0,7956$), Figura 68, verificamos valores bastante próximos. Analisando o gráfico da energia de troca (E_{exch}), constatamos um aumento significativo no valor máximo de E_{exch} , 2×10^{-16} J aproximadamente, pois o sistema precisa de mais energia para reverter a direção dos momentos, sendo o ΔH maior reverte mais momentos, e este pico é apresentado para um instante de tempo igual aos anteriores, em que o campo é de 5 e 10 mT.

Figura 72 – Evolução temporal da componente m_z da magnetização e da energia de troca E_{exch} para uma variação de campo $\Delta H = -50$ mT.

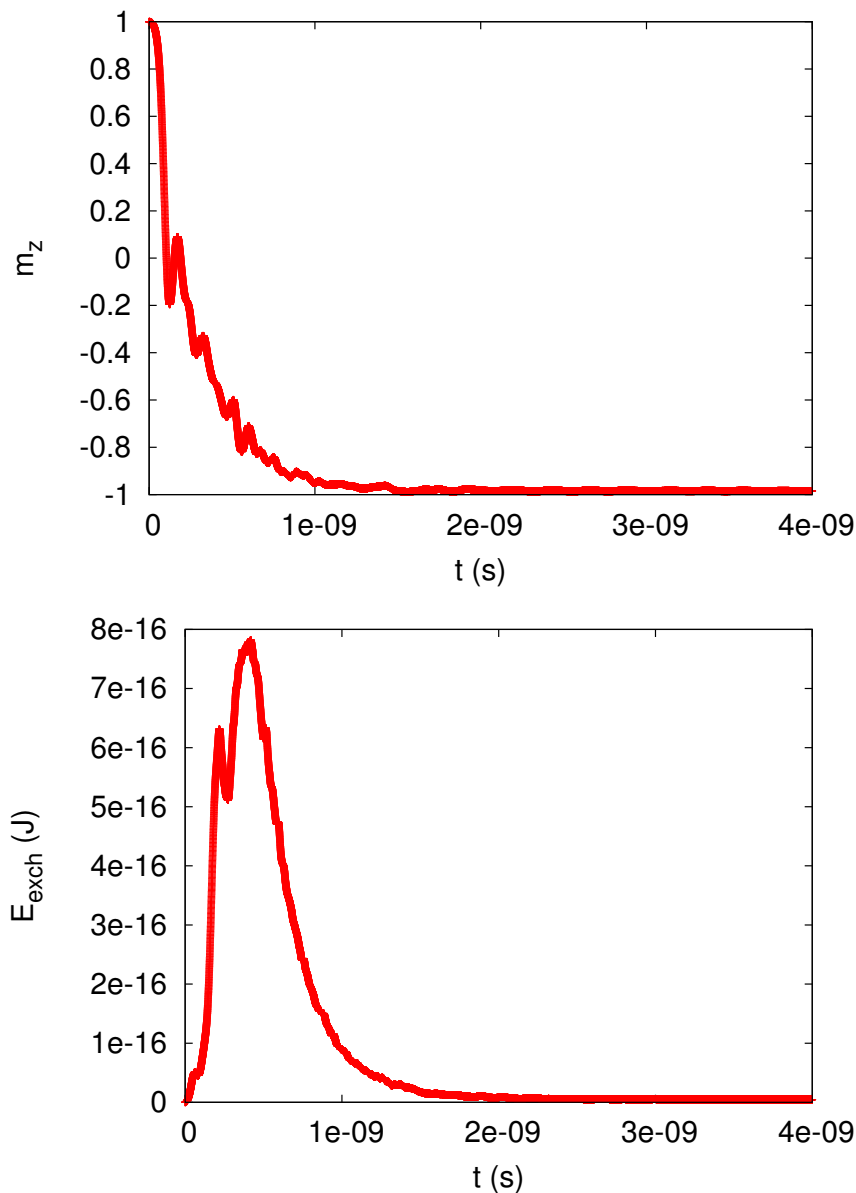


Fonte: Produzido pelo autor

A partir de 2 ns, o valor de energia é quase nula, sugerindo a tendência de alinhamento dos momentos magnéticos, confirmando o resultado obtido no gráfico de m_z em função do tempo para o campo de 20 mT.

Nas Figuras 72 e 73 acompanhamos a evolução de m_z e E_{exch} em função do tempo para $\Delta H = -50$ e -110 mT. Observamos que os momentos (m_z) se aproximam da configuração de alinhamento ($m_z = 0,9$) Figura 72 e ($m_z = 1,0$) Figura 73, apresentando pouca oscilação e assim como na Figura 71, a partir do instante 2 ns, mantendo o mesmo comportamento e ao fazermos um comparativo aos valores encontrados na curva de histerese ($M/M_s = 0,9403$ e $0,9843$), percebe-se que os valores são semelhantes, pois, como já discutido para as outras Figuras,

Figura 73 – Evolução temporal da componente m_z da magnetização e da energia de troca E_{exch} para uma variação de campo $\Delta H = -110$ mT.



Fonte: Produzido pelo autor

quando o campo magnético é fixo, os momentos mantêm o estado de equilíbrio nesta direção. O gráfico da energia de troca mostra algumas mudanças em comparação às Figuras 69, 70 e 71. Dois aspectos importantes são verificados, o aparecimento de dois picos, um no início da inversão dos momentos e o outro ocorrendo no ponto crítico da mudança de direção dos momentos magnéticos, pois no início muitos momentos rotacionam com o campo ($\Delta H = -50$ e -110 mT). Com relação ao ponto de máximo, que em ambas as Figuras 72 e 73, os valores aumentam de forma apreciável, $4,6 \times 10^{-16}$ e $7,9 \times 10^{-16}$ J respectivamente, como relatado anteriormente, a competição energética é a responsável por tais mudanças. Com isso, observamos na Figura 73, o completo alinhamento dos momentos magnéticos.

Sendo assim, a importância destas análises é devido aos valores da energia de troca que está associada ao modo de reversão dos momentos. No caso de um modo de reversão bem definido, a energia de troca não mudará no tempo durante a reversão, como pode ser analisado nas equações descritas no Capítulo 4. Com isso, há várias formas de acompanhar a reversão dos momentos magnéticos e a ideia de impor várias condições finais, $\Delta H = -5, -10, -20, -50$ e -110 mT, está relacionada com a independência que o sistema deverá assumir a condição de equilíbrio de cada modo de reversão. Desta forma, vemos que em todos os ΔH , a energia de troca muda de diferentes formas e sobretudo oscilando, esta oscilação mostra que não há um modo bem estabelecido e as trocas que ocorrem em m_z confirmam isto. Por conseguinte, não há um modo bem definido na reversão de nanotubos em arranjo e portanto as soluções de um único nanotubo não se adequam totalmente a esta nova situação.

O estudo sobre a reversão dos momentos magnéticos em função do campo invertido está relacionado com as promessas de gravação em mídias magnéticas. Na próxima seção, faremos as as perspectivas futuras e conclusões a respeito de cada resultado abordado neste Capítulo.

7 PERSPECTIVAS

O trabalho aqui apresentado é o início para novas filosofias de atividades em nosso grupo. Temos diversas tarefas previstas:

1. Investigar sistemas com mais nanotubos, um sistema com uma morfologia de nanotubo/fio e nanotubos híbridos.
2. Comparar os resultados com os que gera o simulador Nmag [87] 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 para melhor compreender os processos envolvidos em nossos sistemas.
5. Incluir os efeitos térmicos nas simulações.
6. Investigar sistemas com arranjos hexagonais de nanotubos, através dos estudos da reversão dos momentos magnéticos em função do campo invertido.
7. Estudar as propriedades magnéticas de sistemas com parâmetros geométricos diferentes.

8 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Após a apresentação deste trabalho, reunimos algumas conclusões importantes para benefício das pesquisas experimentais de nosso grupo no Departamento de física. Na nossa investigação sobre um sistema de um único nanotubo, na qual modificamos seus parâmetros geométricos, tais como: raio interno e o ângulo do campo aplicado θ . Inicialmente, foram realizadas simulações micromagnéticas utilizando o *software* OOMMF. Com isso, estudamos seus ciclos de histerese, coercividade, remanência reduzida e o diagrama da energias como função dos parâmetros geométricos. Sendo assim, para um único nanotubo, concluímos que:

1. A simulação com OOMMF é eficiente no estudo de objetos nanométricos.
2. Na abordagem em que o campo aplicado é paralelo ao eixo do nanotubo e variamos a razão β , tem-se que o nanotubo reverte sua magnetização através de um único salto Barkhausen, além disso, para valores de $\beta > 0.5$, há uma modificação no formato do ciclo de histerese, aumentando o valor de sua coercividade, H_c , percebemos assim, uma sensibilidade à espessura do nanotubo, isto está diretamente associado à anisotropia de forma. Ainda é verificado, para estes valores de β , que as curvas se assemelham a um sistema de dois estados. A elevada remanência é apresentada como uma característica de fácil magnetização, isto ocorre em resposta à pequena presença da anisotropia magnetocristalina, logo é dominada pela anisotropia de forma. Estes altos valores de remanência, próximos de 1, apontam uma reversão de forma abrupta, diminuindo inicialmente, indicando a formação de paredes de domínio tipo vortex, logo após, aumentando até 1, formando paredes tipo transversal no nanotubo.
3. Para dependência angular da coercividade e remanência foi verificado que para quaisquer ângulos, a reversão ocorre através de um único salto Barkhausen. Nos ciclos de histerese com a variação do ângulo, ocorre um aumento da coercividade até 70° e para 80° e 90° , percebe-se uma grande diminuição no valor de H_c . Apresentando um pico, este fato pode indicar uma mudança na inversão dos momentos magnéticos, sendo a competição energética entre as interações, a maior causa deste pico. Para a coercividade como função do ângulo, ocorre um comportamento não-monotônico, indicando uma troca no modo de reversão da magnetização em $\theta = 70^\circ$. A diminuição da remanência é relacionada à expressão: $M_r(\theta) = M_r \cos^2(\theta)$, a qual evidencia uma reversão da magnetização mediante a ocorrência da nucleação e propagação da parede de domínio, para o valor de β assumido. E para todos os casos, em que β está variando como função de θ , vemos a mesma forma, ou seja, em $\theta = 70^\circ$, obtêm-se um pico e logo após, uma diminuição de H_c .
4. Nesta abordagem, percebe-se claramente que os parâmetros geométricos e o ângulo

do campo externo aplicado influenciam diretamente no comportamento das grandezas magnéticas de um sistema de um único nanotubo.

Na análise do arranjo hexagonal de nanotubos magnéticos usamos o *software* MuMax3 para investigarmos os ciclos de histerese, coercividade e remanência reduzida, a evolução temporal dos momentos magnéticos e da energia de troca, além do estudo da reversão dos momentos magnéticos em função do campo invertido.

1. A simulação com o *software* MuMax3 também é eficiente no estudo de objetos nanométricos.
2. No arranjo hexagonal, observamos as interações magnéticas como função da razão β e da distância entre os nanotubos (d), em que o ângulo do campo magnético aplicado também varia, $0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$. Nas Figuras sobre a coercividade e remanência, observou-se modificações nos seus respectivos valores com a mudança dos parâmetros β e d . Para a coercividade com o campo sobre o eixo z , $\theta = 0^\circ$, verificamos um aumento em relação às distâncias ($d = 0$ e 55 nm), e no caso de $d = 100$ nm, o valor diminui. Observando a razão $\beta = 0,8$, o efeito da interação entre os nanotubos se modifica, mostrando que a coercividade só aumenta em função das distâncias entre os nanotubos. Este fato sugere no arranjo uma influência da interação dipolar, devido à diminuição da espessura das paredes do nanotubo e o comportamento não monotônico indica a possibilidade de uma mudança no modo de reversão dos momentos. Em comparação ao nanotubo isolado, a configuração do arranjo que mais se aproxima é quando a distância $d = 100$ nm, com isso, verificamos que os principais efeitos da interação ocorrem para $d < 100$ nm. No estudo da remanência, observamos que os resultados obtidos indicam uma mudança no modo de reversão da magnetização, em que para $\beta \leq 0,5$, apresenta o modo Transversal e para $\beta > 0,5$, o modo Vórtex. Comparando os valores da remanência com o nanotubo isolado, observou-se que são muito próximos. No estudo da coercividade e remanência como função do ângulo de aplicação do campo, os gráficos exibiram um comportamento não monotônico, para a coercividade, e monotônico para a remanência. O gráfico da coercividade apresenta um valor máximo, para $\theta = 80^\circ$, a análise deste comportamento sugere uma transição entre os modos de reversão Transversal e Vórtex, que estão em consonância aos dados experimentais referenciados na tese. Sendo assim, o carácter de maior ou menor interação entre os nanotubos no arranjo hexagonal influencia na forma dos gráficos da coercividade e remanência.
3. Apresentamos, nos nossos resultados, uma análise da dinâmica dos momentos diante da inversão do campo magnético, isto foi realizado para entendermos o processo de inversão dos momentos magnéticos num arranjo de nanotubos. Nossos resultados foram obtidos ao fixar a razão β em $0,2$ e $0,8$ e variando as distâncias entre os nanotubos. Para o gráfico da evolução temporal da energia de troca, observamos a mudança nos máximos

da energia para a variação das distâncias, em que no caso de $d = 0$ nm, o valor da energia é a mais alta entre os máximos, isto sugere que com o aumento das distâncias entre os nanotubos, as interações entre os momentos dos nanotubos diminuem. Outra característica importante neste gráfico é referente ao alargamento das curvas, que está relacionado ao regime de relaxação dos momentos magnéticos no arranjo. Na análise do comportamento dos momentos como função do tempo, observamos uma característica periódica, que se estabelece no ato da inversão dos momentos magnéticos e este movimento oscilatório se mantém durante toda a inversão dos momentos. Os gráficos apresentam diferentes formas de envoltórias para tempos distintos, isto sugere que para estes diferentes efeitos da relaxação está relacionado ao efeito dipolar no arranjo, estas mudanças indicam a existência de uma competição entre as energias do sistema. Nos mapas, observamos que a inversão dos momentos magnéticos se inicia nas bordas do arranjo, direcionando ao centro, isto ocorre devido à competição entre as energias, como já citado, com uma forte influência das interações dipolares. Numa análise comparativa, a configuração dos momentos magnéticos para $d = 100$ nm é a que mais se assemelha ao nanotubo isolado, pois a interação tende a diminuir com a distância entre os nanotubos, como ocorre no caso do nanotubo isolado. Sendo assim, para estes resultados, as interações dipolares têm domínio sobre os processos em função de β . Como analisado, as modificações da espessura β alteram as propriedades do arranjo, tais como: o comportamento da energia, a forma das curvas da magnetização no plano XY , o comportamento da relaxação e a configuração dos momentos magnéticos (mapas).

4. Nossas conclusões terminam com o estudo da reversão dos momentos como função do campo invertido. A análise dos resultados dos momentos (m_z) e da energia de troca foi baseada na teoria do *plot Henkel*, que estuda sistemas em equilíbrio termodinâmico. Observamos que ao aumentarmos sucessivamente o campo magnético, entre 5 mT e 110 mT, o nanotubo apresenta mudanças de várias formas na energia de troca, além de oscilações que indicam a inexistência de um modo bem definido na reversão dos momentos e assim, as soluções para um único tubo não se adaptam a esta nova situação. Com isso, tem-se que a importância destes resultados é devida aos valores da energia de troca que está relacionada diretamente ao modo de reversão dos momentos magnéticos, por isso, o estudo e interpretação fornecem informações valiosas sobre os mecanismos de interação, que regem os processos de magnetização. Todas estas análises corroboram com a possibilidade de utilizar estes sistemas em gravação de mídias magnéticas.

Com isso, não podemos apresentar um sistema que seja o melhor para aplicar tecnologicamente, mas sim mostramos que os diversos sistemas podem ser utilizados em muitas aplicações na nanotecnologia.

REFERÊNCIAS

- 1 SILVA, E. et al. Transverse magnetic anisotropy of magnetoelastic origin induced in Co nanowires. *Physica B: Condensed Matter*, v. 384, n. 1–2, p. 22–24, 2006. ISSN 0921-4526. LAW3M-05 Proceedings of the Seventh Latin American Workshop on Magnetism, Magnetic Materials and their Applications. 10, 22, 58
- 2 NIELSCH, K. et al. Magnetic properties of template-synthesized cobalt polymer composite nanotubes. *Journal of Applied Physics*, v. 98, n. 3, p. 034318, 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.2005384>>. 10, 22, 56, 57, 59
- 3 Duan Xiangfeng et al. Single-nanowire electrically driven lasers. *Nature*, v. 421, n. 6920, p. 241–245, jan 2003. ISSN 0028-0836. 10.1038/nature01353. Disponível em: <http://www.nature.com/nature/journal/v421/n6920/supinfo/nature01353_S1.html>. 22
- 4 XIA, Y. et al. One-Dimensional Nanostructures: Synthesis, Characterization, and Applications. *Advanced Materials*, WILEY-VCH Verlag, v. 15, n. 5, p. 353–389, 2003. ISSN 1521-4095. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/adma.200390087>>. 22
- 5 CHEETHAM, A. K.; GRUBSTEIN, P. S. Nanomaterials and venture capital. *Materials Today*, v. 6, n. 12, p. 16–19, 2003. ISSN 1369-7021. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1369702103000191>>. 22
- 6 PITKETHLY, M. Nanotechnology: past, present, and future. *Nano Today*, v. 3, n. 3, p. 6, 2008. ISSN 1748-0132. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S174801320870029X>>. 22
- 7 PITKETHLY, M. J. Nanomaterials – the driving force. *Materials Today*, v. 7, n. 12, p. 20–29, 2004. ISSN 1369-7021. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1369702104006273>>. 22
- 8 BORM, P. J.; BERUBE, D. A tale of opportunities, uncertainties, and risks. *Nano Today*, v. 3, n. 1, p. 56–59, 2008. ISSN 1748-0132. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1748013208700161>>. 22
- 9 SON, S. J. et al. Magnetic Nanotubes for Magnetic-Field-Assisted Bioseparation, Biointeraction, and Drug Delivery. *Journal of the American Chemical Society*, v. 127, n. 20, p. 7316–7317, 2005. PMID: 15898772. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/ja0517365>>. 22
- 10 TAO, F. et al. An Easy Way to Construct an Ordered Array of Nickel Nanotubes: The Triblock-Copolymer-Assisted Hard-Template Method. *Advanced Materials*, WILEY-VCH Verlag, v. 18, n. 16, p. 2161–2164, 2006. ISSN 1521-4095. 22, 56
- 11 Eisenstein Michael. An attractive alternative. *Nat Meth*, v. 2, n. 7, p. 484–484, jul 2005. ISSN 1548-7091. 10.1038/nmeth0705-484b. 22
- 12 HSU, Y.-N. et al. The effects of Ag underlayer and Pt intermediate layers on the microstructure and magnetic properties of epitaxial FePt thin films. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 260, n. 1–2, p. 282–294, 2003. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885302005875>>. 22

- 13 MASUDA, H.; FUKUDA, K. Ordered Metal Nanohole Arrays Made by a Two-Step Replication of Honeycomb Structures of Anodic Alumina. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 268, n. 5216, p. 1466–1468, 1995. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<http://science.sciencemag.org/content/268/5216/1466>>. 22
- 14 KAUR, D. et al. Magnetization reversal studies in structurally tailored cobalt nanowires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 344, p. 72–78, 2013. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885313003600>>. 22
- 15 Atkinson Del et al. Magnetic domain-wall dynamics in a submicrometre ferromagnetic structure. *Nat Mater*, v. 2, n. 2, p. 85–87, feb 2003. ISSN 1476-1122. 10.1038/nmat803. 22
- 16 ONO, T. et al. Propagation of a Magnetic Domain Wall in a Submicrometer Magnetic Wire. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 284, n. 5413, p. 468–470, 1999. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<http://science.sciencemag.org/content/284/5413/468>>. 22
- 17 ESCRIG, J. et al. Phase diagrams of magnetic nanotubes. *Journal of magnetism and magnetic materials*, Elsevier, v. 308, n. 2, p. 233–237, 2007. 23, 57, 60, 96, 105
- 18 YAN, M. et al. Beating the Walker Limit with Massless Domain Walls in Cylindrical Nanowires. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 104, p. 057201, Feb 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.057201>>. 23
- 19 ALBRECHT, O. et al. Experimental evidence for an angular dependent transition of magnetization reversal modes in magnetic nanotubes. *Journal of Applied Physics*, v. 109, n. 9, p. 093910, 2011. 23, 91, 99, 100, 108
- 20 HAN, X.-F. et al. Structural and Magnetic Properties of Various Ferromagnetic Nanotubes. *Advanced Materials*, WILEY-VCH Verlag, v. 21, n. 45, p. 4619–4624, 2009. ISSN 1521-4095. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/adma.200901065>>. 23, 56
- 21 PEREIRA, A.; DENARDIN, J. C.; ESCRIG, J. How do magnetic microwires interact magnetostatically? *Journal of Applied Physics*, v. 105, n. 8, p. 083903, 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.3098250>>. 23
- 22 MORALES-CONCHA, C. et al. General approach to the magnetostatic force and interaction between cylindrically shaped nanoparticles. *Journal of Applied Physics*, v. 111, n. 7, p. 07D131, 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.3680181>>. 23
- 23 VELÁZQUEZ-GALVÁN, Y. et al. Dipolar interaction in arrays of magnetic nanotubes. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 26, n. 2, p. 026001, 2014. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0953-8984/26/i=2/a=026001>>. 23
- 24 BELEGGIA, M. et al. On the magnetostatic interactions between nanoparticles of arbitrary shape. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 278, n. 1–2, p. 270–284, 2004. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885304000186>>. 23
- 25 RHEEM, Y. et al. Magnetotransport studies of a single nickel nanowire. *Nanotechnology*, v. 18, n. 1, p. 015202, 2007. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0957-4484/18/i=1/a=015202>>. 23

- 26 WEBER, D. P. et al. Cantilever Magnetometry of Individual Ni Nanotubes. *Nano Letters*, v. 12, n. 12, p. 6139–6144, 2012. PMID: 23134122. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/nl302950u>>. 23
- 27 LEBECKI, K.; KAZAKOVA, O.; GUTOWSKI, M. Micromagnetic simulations of hysteresis in an array of cobalt nanotubes. *Physica B: Condensed Matter*, v. 403, n. 2–3, p. 360–363, 2008. ISSN 0921-4526. Proceedings of the Sixth International Symposium on Hysteresis Modeling and Micromagnetics. 23, 57, 58
- 28 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. 23, 69, 71, 72, 73, 74, 75
- 29 ESCRIG, J. et al. Effect of anisotropy in magnetic nanotubes. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 310, n. 2, p. 2448–2450, 2007. 23, 57, 59, 97
- 30 PROENCA, M. P. et al. CROSSOVER BETWEEN MAGNETIC REVERSAL MODES IN ORDERED Ni AND Co NANOTUBE ARRAYS. *SPIN*, v. 02, n. 04, p. 1250014, 2012. Disponível em: <<http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S2010324712500142>>. 23, 64, 65, 108
- 31 VANSTEENKISTE, A. et al. The design and verification of MuMax3. *AIP Advances*, v. 4, n. 10, p. 107133, 2014. Disponível em: <<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.4899186>>. 23, 69, 76, 77, 78, 79, 80, 81
- 32 DONAHUE, M. J.; PORTER, D. G. *OOMMF User's Guide, National Institute of Standards and Technology*. [S.l.], 1999. 23, 69
- 33 BROWN, W. F. *Magnetostatic Principles in Ferromagnetism*. Amsterdam: North-Holland Publishing Co., 1962. 26, 30, 33
- 34 GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Electrodynamics*. 3. ed. [S.l.]: Prentice-Hall, 1999. ISBN 978-0138053260. 26, 29
- 35 KRONMÜLLER, H.; PARKIN, S. (Ed.). *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*. New York: John Wiley & Sons, Ltd., 2007. v. 2. ISBN 978-0-470-02217-7. 26, 27, 31, 69, 83, 84, 86, 89
- 36 LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. *Phys. Z. Sowjetunion*, Ukrainian Physico-Technical Institute, v. 85, n. 153, p. 101–114, 1935. ISSN 2071-019. 27
- 37 GILBERT, T. A Lagrangian Formulation of the Gyromagnetic Equation of the Magnetization Field. *Phys. Rev.*, n. 100, p. 1243, 1955. 27, 34, 91
- 38 BERTOTTI, G. *Hysteresis in Magnetism - For Physicists, Materials Scientists and Engineers*. San Diego: Academic Press, 1998. ISBN 978-0-120-93270-2. 27, 36
- 39 GETZLAFF, M. *Fundamentals of Magnetism*. New York: Springer, 2008. ISBN 978-3-540-31150-8. Disponível em: <<http://www.rkmag.com>>. 27
- 40 AHARONI, A. *Introduction to the theory of ferromagnetism*. 2. ed. Oxford: Clarendon Press, 1996. ISBN 978-0-198-50809-0. 27, 29, 30, 33, 39, 91

- 41 DIRAC, P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford: Clarendon Press, 1981. (International series of monographs on physics). ISBN 978-0-198-52011-5. 27
- 42 LIECHTENSTEIN, A. I. et al. Local spin density functional approach to the theory of exchange interactions in ferromagnetic metals and alloys. *J. Magn. Magn. Materials*, v. 1, n. 67, p. 65–74, maio 1987. 28
- 43 BROWN, W. F. Criterion for Uniform Micromagnetization. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 105, p. 1479–1482, Mar 1957. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.105.1479>>. 30
- 44 AHARONI, A. Demagnetizing factors for rectangular ferromagnetic prisms. *Journal of Applied Physics*, v. 83, n. 6, p. 3432–3434, 1998. 30
- 45 D'AQUINO, M. *Nonlinear Magnetization Dynamics in Thin-films and Nanoparticles*. Tese (Doutorado), dez. 2004. 31, 32
- 46 HUBERT, A.; SCHÄFER, R. 3rd. ed. New York: Springer, 2009. ISBN 978-3-540-64108-7. 32, 33
- 47 CULLITY, B. *Introduction to Magnetic Materials*. 2. ed. New Jersey: Addison-Wesley, 1972. ISBN 978-0-471-47741-9. 33, 36, 37
- 48 LANDÉ, A. Über den anomalen Zeemaneffekt (Teil I). *Zeitschrift für Physik*, v. 5, n. 4, p. 231–241, 1921. ISSN 0044-3328. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF01335014>>. 33
- 49 WRIGHT, J. G. Ferromagnetism in epitaxial F.C.C. iron films, *Phil. Mag.* 24, 217 (1971). *Philosophical Magazine*, v. 24, n. 188, p. 217–223, 1971. 33
- 50 GILBERT, T. L. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. *Science*, v. 304, n. 5671, p. 692–693, 2004. 34, 91
- 51 HONG, J. et al. Magnetization reversal dynamics in nickel nanowires. *Nat Mater*, v. 5, n. 8, p. 627–631, 2006. 35
- 52 BERKOV, D. V. *MicroMagus - Software for Micromagnetic Simulation*. [S.l.], 2008. Disponível em: <<http://www.micromagus.de>>. Acesso em: nov. 2014. 35, 69
- 53 Brown Jr, W. *Micromagnetics*. London: John Wiley and Sons, 1963. 35
- 54 HERTEL, R. et al. Three-dimensional magnetic-flux-closure patterns in mesoscopic Fe islands. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 72, p. 214409, Dec 2005. 35
- 55 SKOMSKI, R. Nanomagnetism. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 15, n. 20, p. R841, 2003. 36
- 56 SKOMSKI, R. Micromagnetic Spin Structure. In: _____. *Spin Electronics*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2001. p. 204–231. ISBN 978-3-540-45258-4. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1007/3-540-45258-3_10>. 36, 94
- 57 SKOMSKI, R.; COEY, J. *Permanent magnetism*. Bristol:Philadelphia, PA: Institute of Physics Pub., 1999. 36
- 58 HINZKE, D.; NOWAK, U. *J. Magn. Magn. Mater.*, v. 221, p. 365–372, 2000. 39

- 59 FORSTER, H. et al. *J. Appl. Phys.*, v. 91, p. 6914, 2002. 39
- 60 WIESER, R.; NOWAK, U.; USADEL, K. D. *Phys. Rev. B*, v. 69, p. 064401, 2004. 39
- 61 NIELSCH, K. et al. Switching behavior of single nanowires inside dense nickel nanowire arrays. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 38, n. 5, p. 2571–2573, Sep 2002. ISSN 0018-9464. 39
- 62 FREI, E. H.; SHTRIKMAN, S.; TREVES, D. *Phys. Rev.*, v. 106, p. 446, 1957. 39
- 63 LANDEROS, P. et al. Reversal modes in magnetic nanotubes. *Applied Physics Letters*, v. 90, n. 10, p. 102501, 2007. Disponível em: <<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.2437655>>. 39, 40, 56, 60, 62, 63, 92, 96, 97
- 64 ESCRIG, J. et al. Crossover between two different magnetization reversal modes in arrays of iron oxide nanotubes. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 77, p. 214421, Jun 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.214421>>. 39, 41, 43, 50
- 65 ARFKEN, G. B.; WEBER, H. *Física Matemática - Métodos Matemáticos para Engenharia e Física*. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007. 45
- 66 SUAREZ, O.; VARGAS, P.; VOGEL, E. Energy and force between two magnetic nanotubes. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 321, n. 22, p. 3658–3664, 2009. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885309007264>>. 55, 105
- 67 RIVEROS, A.; ESCRIG, J. Magnetostatic interaction between two nanotubes reversing their magnetizations by vortex domain walls. *IEEE Magnetics Letters*, PP, n. 99, p. 1–1, 2016. ISSN 1949-307X. 55, 105
- 68 Iijima Sumio. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, v. 354, n. 6348, p. 56–58, nov 1991. 10.1038/354056a0. 56
- 69 SUI, Y. C. et al. Magnetic nanotubes produced by hydrogen reduction. *Journal of Applied Physics*, v. 95, n. 11, p. 7151–7153, 2004. 56
- 70 NIELSCH, K. et al. Synthesis of Cobalt Polymer Multilayer Nanotubes. *Advanced Engineering Materials*, WILEY-VCH Verlag, v. 7, n. 4, p. 217–221, 2005. ISSN 1527-2648. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/adem.200400192>>. 97, 106
- 71 WANG, Z. K. et al. Spin Waves in Nickel Nanorings of Large Aspect Ratio. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 94, p. 137208, Apr 2005.
- 72 SUN, S. et al. Monodisperse FePt Nanoparticles and Ferromagnetic FePt Nanocrystal Superlattices. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 287, n. 5460, p. 1989–1992, 2000. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<http://science.sciencemag.org/content/287/5460/1989>>. 56
- 73 Gerrits Th. et al. Ultrafast precessional magnetization reversal by picosecond magnetic field pulse shaping. *Nature*, v. 418, n. 6897, p. 509–512, aug 2002. ISSN 0028-0836. 10.1038/nature00905. 56
- 74 EMERICH, D. F.; THANOS, C. G. Nanotechnology and medicine. *Expert Opinion on Biological Therapy*, v. 3, n. 4, p. 655–663, 2003. PMID: 12831370. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1517/14712598.3.4.655>>. 56

- 75 ESCRIG, J. et al. Angular dependence of coercivity in magnetic nanotubes. *Nanotechnology*, IOP Publishing, v. 18, n. 44, p. 445706, 2007. 56
- 76 SHARIF, R. et al. Magnetic switching of ferromagnetic nanotubes. *Applied Physics Letters*, v. 92, n. 3, p. 032505, 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.2836272>>. 56, 65, 66, 67, 68, 108
- 77 LANDEROS, P. et al. Scaling relations for magnetic nanoparticles. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 71, p. 094435, Mar 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.094435>>. 57
- 78 SUI, Y. C. et al. Nanotube magnetism. *Applied Physics Letters*, v. 84, n. 9, p. 1525–1527, 2004. 57
- 79 ALLENDE, S. et al. Angular dependence of the transverse and vortex modes in magnetic nanotubes. *The European Physical Journal B*, v. 66, n. 1, p. 37–40, 2008. ISSN 1434-6036. 63, 64, 91, 99, 108
- 80 HAN, G. C. et al. Angular dependence of the coercivity and remanence of ferromagnetic nanowire arrays. *Journal of Applied Physics*, v. 93, n. 11, p. 9202–9207, 2003. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.1572197>>. 67
- 81 DAUB, M. et al. Ferromagnetic nanotubes by atomic layer deposition in anodic alumina membranes. *Journal of Applied Physics*, v. 101, n. 9, p. 09J111, 2007. 67, 108
- 82 CHANG, C.-R.; LEE, C. M.; YANG, J.-S. Magnetization curling reversal for an infinite hollow cylinder. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 50, p. 6461–6464, Sep 1994. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.6461>>. 68
- 83 WEGROWE, J.-E. et al. Arrays of ultrathin monocrystalline submicrometer-sized Fe dots: Néel–Brown relaxation and activation volume. *Journal of Applied Physics*, v. 86, n. 2, p. 1028–1034, 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.370842>>. 68
- 84 SCHEINFELD, M. R. *LLG - Micromagnetics Simulator*. [S.l.]. Disponível em: <<http://llgmicro.home.mindspring.com>>. Acesso em: nov. 2014. 69
- 85 VISSCHER, P. V. et al. *AlaMag Micromagnetics Simulator*. [S.l.]. Disponível em: <<http://faculty.mint.ua.edu/~visscher/AlaMag/>>. Acesso em: dez. 2014. 69
- 86 WHITTENBURG, S. L. *JaMM - Java MicroMagnetics*. [S.l.]. Disponível em: <<http://jamm.uno.edu/>>. Acesso em: dez. 2014. 69
- 87 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/>>. 69, 132
- 88 SCHOLZ, W.; BATRA, S. Micromagnetic modeling of head field rise time for high data-rate recording. *IEEE transactions on magnetics*, IEEE, v. 41, n. 2, p. 702–706, 2005. 69
- 89 HERTEL, R.; KRONMÜLLER, H. Micromagnetic simulation of the domain structure of a flat rectangular permalloy prism. *Journal of Applied Physics*, v. 85, n. 8, p. 6190–6192, 1999. Disponível em: <<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.370217>>. 75

- 90 NVIDIA. *NVIDIA CUDA C programming guide*. [S.l.], 2011. Disponível em: <<https://docs.nvidia.com/cuda/cuda-c-programming-guide>>. 80
- 91 MILTAT, J. E.; DONAHUE, M. J. [S.l.]: John Wiley e Sons, Ltd, 2007. ISBN 9780470022184. 83, 86, 87
- 92 ZHU, J.-G. Micromagnetic Modeling: Theory and Applications in Magnetic Thin Films. *MRS Bulletin*, Cambridge University Press, New York, USA, v. 20, n. 10, p. 49–54, 10 1995. 83
- 93 IVANOV, Y. P.; CHUBYKALO-FESENKO, O. *Micromagnetic simulations of cylindrical magnetic nanowires*. Elsevier BV, 2015. Disponível em: <<http://hdl.handle.net/10754/582600>>. 84
- 94 LABRUNE, M.; MILTAT, J. Wall structures in ferro/antiferromagnetic exchange-coupled bilayers: A numerical micromagnetic approach. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 151, n. 1, p. 231–245, 1995. ISSN 0304-8853. 86
- 95 MANSURIPUR, M.; GILES, R. *Magnetics, IEEE Transactions on*, v. 24, n. 6, p. 2326–2328, Nov 1988. ISSN 0018-9464. 88
- 96 W.H., P. et al. *Numerical Recipes in Fortran: The Art of Scientific Computing*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1996. 88, 89
- 97 ÁLVAREZ, M.; GUERRA, A.; LAU, R. *Matemática numérica*. Editorial Félix Varela, 2007. 89
- 98 WANG, S.; WEI, D.; GAO, K. Z. Limits of Discretization in Computational Micromagnetics. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 47, n. 10, p. 3813–3816, Oct 2011. ISSN 0018-9464. 91
- 99 GUERRA, Y. et al. Micromagnetic Simulation in Hexagonal Arrays of Nanosized Hollow Nickel Spheres. *IEEE Transactions on Magnetics*, v. 52, n. 11, p. 1–6, Nov 2016. ISSN 0018-9464. 91
- 100 DONAHUE, M. J. *OOMMF Movies*. [S.l.], 2014. 91
- 101 FIDLER, J.; SCHREFFL, T. Micromagnetic modelling - the current state of the art. *Journal of Physics D: Applied Physics*, v. 33, n. 15, p. R135, 2000. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0022-3727/33/i=15/a=201>>. 91
- 102 BARKHAUSEN, H. Zwei mit Hilfe der neuen Verstar ker entdeckte Erscheinugen. *Physikalische Zeitschrift*, v. 20, p. 401–403, 1919. 92
- 103 SALAZAR-ARAVENA, D.; PALMA, J. L.; ESCRIG, J. Angular dependence of the magnetic properties of cylindrical nanostructures with wire–tube morphology. *Materials Research Express*, v. 1, n. 2, p. 026112, 2014. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/2053-1591/1/i=2/a=026112>>. 92
- 104 SALAZAR-ARAVENA, D.; PALMA, J. L.; ESCRIG, J. Magnetostatic interactions between wire-tube nanostructures. *Journal of Applied Physics*, v. 117, n. 19, p. 193905, 2015. 92, 94, 100, 104
- 105 BUCHTER, A. et al. Reversal Mechanism of an Individual Ni Nanotube Simultaneously Studied by Torque and SQUID Magnetometry. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 111, p. 067202, Aug 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.111.067202>>. 93

- 106 RICHARDSON, D.; KINGSTON, S.; RHEN, F. M. F. Investigation of the magnetization reversal mechanism of electrolessly deposited Co-B nanotubes. *AIP Advances*, v. 6, n. 5, p. 056113, 2016. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.4943603>>.
- 107 LAVÍN, R. et al. Angular dependence of the coercivity and remanence of ordered arrays of Co nanowires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 324, n. 15, p. 2360–2362, 2012. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885312002302>>. 100
- 108 YUSET, G. D. *Simulação micromagnética de arranjos hexagonais de nanocascas de Ni e Co*. Dissertação (Mestrado), Pernambuco, 2015. 100
- 109 MORALES, G. P. F. *Estudo por simulação micromagnética das interações dipolares em arranjos de nanofios policristalinos de Níquel*. Dissertação (Mestrado), Pernambuco, 2015.
- 110 CHEN, Y. et al. Temperature- and Angle-Dependent Magnetic Properties of Ni Nanotube Arrays Fabricated by Electrodeposition in Polycarbonate Templates. *Nanomaterials*, v. 6, n. 12, 2016. ISSN 2079-4991. Disponível em: <<http://www.mdpi.com/2079-4991/6/12/231>>. 100, 108
- 111 SAMANIFAR, S.; KASHI, M. A.; RAMAZANIA, A. Angular dependence of the coercivity and squareness of Fe₅₀Co₂₉Ni₂₁ nanowire arrays. *ICNS6*, Proceedings of the 6th International Conference on Nanostructures, Kish Island, mar. 2016. 100
- 112 ESCRIG, J. et al. Geometry dependence of coercivity in Ni nanowire arrays. *Nanotechnology*, v. 19, n. 7, p. 075713, 2008. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0957-4484/19/i=7/a=075713>>. 104
- 113 CLIME, L.; CIUREANU, P.; YELON, A. Magnetostatic interactions in dense nanowire arrays. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 297, n. 1, p. 60–70, 2006. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030488530500301X>>. 104
- 114 *Magnetostatic interactions between ferromagnetic nanowires*. [S.l.]: 52nd Magnetism and Magnetic Materials Conference, 2007. 104
- 115 SUN, D.-L. et al. Contribution of magnetostatic interaction to magnetization reversal of Fe₃Pt nanowires arrays: A micromagnetic simulation. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, n. 321, p. 2737–2741, 2009. 104
- 116 BAO, J. et al. Template Synthesis of an Array of Nickel Nanotubules and Its Magnetic Behavior. *Advanced Materials*, WILEY-VCH Verlag GmbH, v. 13, n. 21, p. 1631–1633, 2001. ISSN 1521-4095. 108
- 117 WILLIAMS, T.; KELLEY, C. *Gnuplot 5.0*. [S.l.]. Disponível em: <http://www.gnuplot.info/docs_5.0/gnuplot.pdf>. Acesso em: nov. 2014. 110, 145, 149
- 118 OTÁLORA, J. A. et al. Oersted field assisted magnetization reversal in cylindrical core-shell nanostructures. *Journal of Applied Physics*, v. 117, n. 17, p. 173914, 2015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.4919746>>. 124
- 119 HENKEL, O. Remanenzverhalten und Wechselwirkungen in hartmagnetischen Teilchenkollektiven. 124

- 120 BASSO, V.; BERTOTTI, G. Description of magnetic interactions and Henkel plots by the Preisach hysteresis model. *IEEE Transactions on Magnetism*, v. 30, n. 1, p. 64–72, Jan 1994. ISSN 0018-9464. 124
- 121 SKOMSKI, R.; SELLMYER, D. J. Cooperative magnetism and the Preisach model. *Journal of Applied Physics*, v. 89, n. 11, p. 7263–7265, 2001. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.1355344>>. 124
- 122 CHWASTEK, K. Description of Henkel plots by the magnetization-dependent Jiles–Atherton model. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 322, n. 2, p. 214–217, 2010. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885309008725>>. 124
- 123 BASSO, V.; BUE, M. L.; BERTOTTI, G. Interpretation of hysteresis curves and Henkel plots by the Preisach model (invited). *Journal of Applied Physics*, v. 75, n. 10, p. 5677–5682, 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.355635>>. 125
- 124 BUEHLER, C. J.; MAYERGOYZ, I. D. Henkel plots and the Preisach model of hysteresis. *Journal of Applied Physics*, v. 79, n. 8, p. 5746–5748, 1996. Disponível em: <<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.362239>>. 125
- 125 VAJDA, F.; TORRE, E. D.; MCMICHAEL, R. D. Demagnetized state dependence of Henkel plots. I The Preisach model. *Journal of Applied Physics*, v. 75, n. 10, p. 5689–5691, 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.355638>>. 125
- 126 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. 145, 149
- 127 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. 145, 149
- 128 RAMACHANDRAN, P. *MayaVi Users Guide*. [S.l.]. Disponível em: <<http://mayavi.sourceforge.net/docs/guide/index.html>>. Acesso em: nov. 2014. 145, 149
- 129 MASCARO, M. *OOMMFTools*. [S.l.]. Disponível em: <<http://web.mit.edu/daigohji/projects/OOMMFTools>>. Acesso em: nov. 2014. 145
- 130 VASILIEF, I.; BESCH, S. *The QtiPlot Handbook*. [S.l.]. Disponível em: <<http://www.qtiplot.com/doc/manual-en/index.html>>. Acesso em: nov. 2014. 145, 149
- 131 GERRAND, A. *Go - a simple programming environment*. [S.l.], 2013. Disponível em: <<https://golang.org/doc>>. 149

ANEXO A – *SCRIPT* DO OOMMF

Para visualizar os resultados da simulação, os dados dos mapas vetoriais de magnetização se transformam do formato de OOMMF (OMF/OVF) ao formato Visualisation Toolkit(VTK) [126], que é um padrão aberto para a visualização, para isso utilizamos a ferramenta *ovf2vtk* [127]. Os resultados são visualizados com o *MayaVi* [128], 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) [129] 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* [117] e o *Qtplot* [130].

Código micromagnético da simulação do OOMMF

A definição do problema micromagnético utilizando *scripts shell* se consegue a partir de arquivos de entrada em formato .MIF. Uma simulação é feita com 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:

1. 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.
2. Malhas: É definida a discretização que é utilizada na simulação. Há exatamente uma malha declarada pelo arquivo MIF. A única malha padrão disponível é a *Oxs_RectangularMesh*.
3. 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 troca, Energia magnetostática e Energia Zeeman.

4. 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.
5. 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 maiores 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 detecta quando etapas e corridas terminam, considerando os critérios especificados na descrição do problema no MIF. No Oxs existem dois tipos de Drivers, Drivers de tempo e Drivers de minimização.
6. 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.
7. Classes de Suporte para MIF: Existe o objeto *Oxs_LabelValue*. A cadeia para um bloco específico de objetos *Oxs_LabelValue* é uma lista arbitraria 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.

Assim, 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 75.

Figura 74 – Fragmento do código micromagnético da simulação estática de um nanotubo magnético isolado de Níquel. Mostram-se o Atlas, a Malha e os termos e geometria envolvidos.

```

set pi [expr 4*atan(1.0)]
set mu0 [expr 4*$pi*1e-7]
set radian [expr $pi/180]

Parameter radio_interior 0
Parameter angulo 0
Parameter H 500

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

proc Ellipsoid { x y z } {
global radio_interior
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]
if {$test>1.0||$test<$radio_interior} {return 0}
return 1
}

Specify Oxs_ScriptAtlas:atlas {
xrange {0 80e-9}
yrange {0 80e-9}
zrange {0 1e-6}
regions { ellipsoid }
script Ellipsoid
}

Specify Oxs_RectangularMesh:mesh {
cellsize {2.5e-9 2.5e-9 5e-9}
atlas :atlas
}

```

Parâmetros utilizados nos cálculos

Definição da geometria da simulação.

Neste caso foi utilizado o objeto Oxs_atlas

Malha

Fonte: Produzida pelo autor.

Figura 75 – Fragmento do código micromagnético da simulação estática de um nanotubo magnético isolado de Níquel. Particularmente mostram-se as energias envolvidas no processo e 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 $\vec{m}_0$.

```
# Energia de Troca
Specify Oxs_UniformExchange {
  A 9e-12
}

# Energia Magnetocristalina Cúbica
Specify Oxs_CubicAnisotropy {
  K1 -5.7e3
  axis1 {1 0 0}
  axis2 {0 1 0}
}

# Energia Magnetostática
Specify Oxs_Demag {}

# Applied field
Specify Oxs_UZeeman [subst {
  multiplier [expr {0.001/$mu0}]
  Hrange {
    { $Hx 0 $Hz -$Hx 0 -$Hz 600}
    { -$Hx 0 -$Hz $Hx 0 $Hz 600}
  }
}]

Specify Oxs_CGEvolve:evolve {}

Specify Oxs_MinDriver {
  basename nanotubo_modificar
  evolver :evolve
  stopping_mxHxm 0.1
  mesh :mesh
  Ms { Oxs_AtlasScalarField {
    atlas :atlas
    default_value 4.85e5
    values {
      universe 0.0
    }
  }}
  m0 {0 0 1}
}

#Arquivo de Saída
Destination archive mmArchive

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

Energia de Troca (Exchange)

Energia Magnetocristalina Cúbica

Energia Magnetostática

Energia Zeeman
Campo externo aplicado

Evolver de Minimização

Driver de Minimização.
Também contêm alguns parâmetros do material (M_s e m_0)

Aqui é Especificada a Saída do Arquivo.

ANEXO B – SCRIPT DO MUMAX3

Para visualizar os resultados da simulação, os dados dos mapas vetoriais de magnetização se transformam do formato (OVF) ao formato Visualisation Toolkit(VTK) [126], que é um padrão aberto para a visualização, para isso utilizamos a ferramenta *ovf2vtk* [127]. Os resultados são visualizados com o *MayaVi* [128], 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*. Além disso são utilizados o *Gnuplot* [117] e o *Qtiplot* [130]. A sintaxe de entrada *MuMax3* é um subconjunto da sintaxe de *Go* [131], algo semelhante a *C*. Os arquivos de entrada *MuMax3* são executados com o comando *mumax3 myfile.mx3*, e a saída dos dados é armazenada automaticamente no diretório "*myfile.out*". Além disso, uma interface web fornece a saída dos dados ao vivo e o padrão para mostrar a saída é *http://localhost:35367*. Abaixo temos um *script* para execução de uma simulação estática (obtendo o laço de histerese) e dinâmica (obtendo variáveis em função do tempo).

Código micromagnético da simulação do MuMax3

Na Figura 76, mostramos um fragmento do código do *script* para o *MuMax3*. Neste

Figura 76 – Neste fragmento do código, mostram-se: número e tamanho de células, além dos parâmetros que definem o formato do arranjo hexagonal dos nanotubos.

```
# Arranjo Hexagonal de Nanotubos de Níquel #

SetGridsize(150, 138, 200)
SetCellsize(1.6e-9, 1.6e-9, 5e-9)

# Parâmetros da Geometria #

angle := 60
h := 1000e-9 //tamanho do nanotubo
c := 0e-9    //distancia entre os nanotubos
D := 80e-9   //diametro do nanotubo

dx := (D + c)*cos(angle * pi/180)
dy := (D + c)*sin(angle * pi/180)

# Razão entre os Raios Interno e Externo #

epsilon:= 0.2
```

Fonte: Produzida pelo autor.

fragmento, observamos que a malha de simulação vai definir o tamanho da caixa em torno

da sua geometria. Ele deve ser definido no início do *script*. O número de células deve ser, preferencialmente, de duas potências, ou pelo menos ter pequenos fatores primos (2,3,5,7). Em *SetCellsize*, define-se o tamanho das células X, Y, Z em metros e *SetGridsize* define o número de células para X, Y, Z. Os parâmetros h , c , D , dx , dy e ϵ são utilizados para definir o formato (tamanho, distância entre superfícies, diâmetro, posição centro-a-centro dos nanotubos e a razão entre os raios) para o arranjo hexagonal de nanotubos.

Figura 77 – O fragmento do código mostram-se: a forma do material, a geometria para uma determinada forma e os parâmetros M_{sat} , A_{ex} , K_{c1} , $Anis_{c1}$, $Anis_{c2}$, além do *damping alpha*, utilizado em simulações dinâmicas.

```
# Especificação de cada Nanotubo #

cilindro := cylinder(D, h).transl(0, 0, 0)
cilindrooco := cylinder(epsilon*D, h).transl(0, 0, 0)

cilindroa := cylinder(D, h).transl(dx, -dy, 0)
cilindroocoa := cylinder(epsilon*D, h).transl(dx, -dy, 0)

cilindrob := cylinder(D, h).transl(-dx, -dy, 0)
cilindroocob := cylinder(epsilon*D, h).transl(-dx, -dy, 0)

cilindroc := cylinder(D, h).transl(-dx, dy, 0)
cilindroococ := cylinder(epsilon*D, h).transl(-dx, dy, 0)

cilindrod := cylinder(D, h).transl(dx, dy, 0)
cilindroocod := cylinder(epsilon*D, h).transl(dx, dy, 0)

cilindroe := cylinder(D, h).transl(-2*dx, 0, 0)
cilindroocoe := cylinder(epsilon*D, h).transl(-2*dx, 0, 0)

cilindrof := cylinder(D, h).transl(2*dx, 0, 0)
cilindroocof := cylinder(epsilon*D, h).transl(2*dx, 0, 0)

# Organização da Geometria para Formar o Arranjo Hexagonal #

setgeom( (cilindro.sub(cilindrooco)).add(cilindroa.sub(cilindroocoa))
.add(cilindrob.sub(cilindroocob)).add(cilindroc.sub(cilindroococ))
.add(cilindrod.sub(cilindroocod)).add(cilindroe.sub(cilindroocoe))
.add(cilindrof.sub(cilindroocof)))
saveas(geom, "hexagono")

# Parâmetros do Material Utilizado: Níquel #

Msat = 490.0e3
Aex = 9.0e-12
alpha = 0.02
Kc1 = -5.7e3
AnisC1 = vector(1, 0, 0)
AnisC2 = vector(0, 1, 0)
```

Fonte: Produzida pelo autor.

Na Figura 77, especificamos a forma do material para a simulação completa, no nosso

caso *cylinder(D, h)* Cilindro 3D com diâmetro e altura em metro, para cada nanotubo. Pode-se especificar formas primitivas, construídas na origem (caixa central), e transladá-las (*.transl(x, y, z)*) ou rotacioná-las (*.rotz(angulo*pi/180)*) se necessário. Todas as posições são especificadas em metros e a origem se encontra no centro da caixa de simulação. O termo *Setgeom()*, especifica a geometria para uma determinada forma, no nosso caso um arranjo hexagonal e *Saveas* salva o formato definido. Os parâmetros do material como, M_{sat} magnetização de saturação do material (A/m), A_{ex} constante de troca (J/m), K_{c1} constante de anisotropia cúbica de primeira ordem (J/m^3), $Anis_{c1}$, $Anis_{c2}$ direções de anisotropia cúbica 1 e 2, além do parâmetro *alpha* constante de amortecimento Landau-Lifshitz, são atribuídos um valor em todas as regiões especificadas.

Figura 78 – Fragmento do código mostrando o vetor magnetização inicial, as energias envolvidas e o comando para realizar o laço de histerese.

```
# Vetor Momento Magnético #

m = Uniform(0, 0, -1)
Minimize()# Encontra o estado fundamental usando o método do gradiente conjugado #

# Energias Envolvidas no Processo #

TableAdd(B_ext)
TableAdd(E_exch)
TableAdd(E_demag)
TableAdd(E_Zeeman)
TableAdd(E_anis)
TableAdd(E_total)

# Vetor Campo Magnético Aplicado sobre o Eixo z #

Bmax := 150.0e-3
Bstep := 5e-3
MinimizerStop = 1e-6

# Laço de Histerese #

for B:=Bmax; B>=-Bmax; B-=Bstep{
    B_ext = vector(0, 0, B)
    minimize()
    save(m)
    tablesave()
}

for B:=-Bmax; B<=Bmax; B+=Bstep{
    B_ext = vector(0, 0, B)
    minimize()
    save(m)
    tablesave()
}
```

Fonte: Produzida pelo autor.

Na Figura 78, defini-se a magnetização inicial, a qual se atribui um *Config* para $m =$

$Uniform(x, y, z)$, configurando-o em regiões separadas ou carregando um arquivo diretamente. Na nossa simulação, o vetor magnetização inicial possui direção negativa sobre o eixo z. As energias envolvidas na simulação estão elencadas como segue: E_{exch} , energia devido à interação de troca, E_{demag} , energia magnetostática, E_{Zeeman} , energia devido ao campo aplicado B_{ext} , E_{anis} , energia relacionada à anisotropia e E_{total} é a soma de todas as energias envolvidas no processo. Além desses parâmetros, foi utilizado o comando *for* para realizar o processo do laço de histerese, o qual especifica a configuração do campo externo aplicado, sendo $B_{ext} = vector(0, 0, B)$.

Figura 79 – Fragmento do código relacionado ao *Running*, que define variáveis como função do tempo.

```
# Vetor Momento Magnético #
m = uniform(0, 0, -1)
save(m)
autosave(m, 50e-12)
tableautosave(.1e-12)

# Energias Envolvidas no Processo #

TableAdd(B_ext)
TableAdd(E_exch)
TableAdd(E_demag)
TableAdd(E_Zeeman)
TableAdd(E_anis)
TableAdd(E_total)

# Vetor Campo Magnético Aplicado sobre o Eixo z #
B_ext = vector(0, 0, 500e-3)

# Executa a Simulação por um Tempo em Segundos: Caracteriza um Evento Dinâmico #
run(1.5e-9)
```

Fonte: Produzida pelo autor.

Para finalizar o *script* das simulações em MuMax3, mostramos na Figura 79 um fragmento do código, que define a execução da simulação de forma dinâmica, ou seja, com as variáveis em função do tempo. Assim, *Run (time)* executa a simulação por um determinado tempo em segundos. Com isso, os parâmetros da energia, por exemplo, E_{exch} , E_{demag} , E_{Zeeman} , E_{anis} , E_{total} , além dos termos de magnetização ($\vec{m}$) nos eixos x , y e z variam com o tempo.