



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

Ialy Fernanda Gonzaga Martins

**Dependência angular da coercividade para  
arranjos de nanofios de níquel: estudo por  
simulação micromagnética**

Recife  
2019

Ialy Fernanda Gonzaga Martins

**Dependência angular da coercividade para arranjos  
de nanofios de níquel:** estudo por simulação micromagnética

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de mestre.

**Área de concentração: Física da Matéria condensada e de Materiais**

Orientador: Eduardo Padrón Hernández

Recife

2019

Catálogo na fonte  
Bibliotecária Arabelly Ascoli CRB4-2068

M386d Martins, Ialy Fernanda Gonzaga  
Dependência angular da coercividade para arranjos de nanofios de níquel: estudo por simulação micromagnética / Ialy Fernanda Gonzaga Martins. – 2019.  
77 f.: il., fig., tab.

Orientador: Eduardo Padrón Hernández.  
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Física. Recife, 2019.  
Inclui referências.

1. Física da matéria condensada e de materiais. 2. Nanofios. 3. Simulação micromagnética. 4. Nmag I. Padrón Hernández, Eduardo (orientador). II. Título.

530.41            CDD (23. ed.)            UFPE-FQ 2019-64

**IALY FERNANDA GONZAGA MARTINS**

**DEPENDÊNCIA ANGULAR DA COERCIVIDADE PARA ARRANJOS DE  
NANOFIOS DE NÍQUEL: ESTUDO POR SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA**

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

Aprovada em: 29/08/2019.

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Eduardo Padrón Hernández  
Orientador  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Prof. Fernando Luis de Araujo Machado  
Examinador Interno  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Prof. Adolfo Franco Júnior  
Examinador Externo  
Universidade Federal de Goiás

## AGRADECIMENTOS

Agradeço a meus pais e minha irmã pelo suporte e apoio fornecido durante toda a minha vida acadêmica. A familiares e amigos que me receberam em seus lares quando precisei. Agradeço com todo carinho ao meu orientador Eduardo Padrón por todo cuidado e atenção fazendo com que esse trabalho acontecesse. Aos meus colegas de laboratório que trazem alegria ao ambiente diariamente. Agradeço em especial ao colega Yuset por sempre se mostrar disponível e disposto a me ajudar em todas as minhas dúvidas durante a pesquisa. Aos demais professores do departamento que contribuíram para minha formação. Ao meu treinador e amigo Adeildo, por todas as conversas e pelo apoio para que eu me tornasse sempre alguém melhor. A meus amigos da vida e/ou treino Anne, Breno, Wemerson. A Mah, Jeny, Jailson e Paulo por terem me salvado quando meu notebook quebrou me emprestando os seus e concertando o meu. A Mari e Gabriel por terem sido vizinhos incríveis durante todo o mestrado, obrigada pelas xícaras de açúcar. Agradeço a todos que contribuíram de forma acadêmica ou afetiva na minha vida.

Não menos importante, agradeço por fim à FINEP, FACEPE, CAPES e CNPq que fazem a ciência acontecer.

## RESUMO

Nesse estudo utilizamos simulação micromagnética com o pacote Nmag, baseado no método de elementos finitos. Foram simulados arranjos hexagonais de nanofios formados por partículas nos formatos de cilindro, elipsóides, cadeias de elipsóides (sendo um arranjo com todos os elipsóides alinhados em relação ao eixo do nanofio e outro com os elipsóides defletidos de angulações inferiores a  $5^\circ$ ) e cuboctaedros. Tendo como objetivo avaliar como a forma dos cristais de nanofios influencia nas propriedades magnéticas. Para tal, foram consideradas interação de troca, interação Zeeman e a contribuição magnetostática. Nestas simulações, foi considerado que os nanofios eram policristalinos, de forma que não foi incluída a anisotropia no Ni. Efeitos térmicos também não são levados em conta. Os ciclos de histerese para cada arranjo foram produzidos aplicando um campo externo em ângulos que variaram de  $0$  a  $90^\circ$  entre o campo magnético aplicado e o eixo dos nanofios. Nos arranjos, os nanofios distaram de  $50$  nm de centro a centro. As medidas de cada nanofio foram de  $40$  nm para o diâmetro médio,  $400$  nm para comprimento nos formatos com cadeias de elipsóides e de  $350$  nm para os demais formatos. O malhado produzido no Netgen teve o menor comprimento médio no arranjo formado pela cadeia de elipsóides alinhados,  $5.44$  nm, enquanto que para o arranjo com único elipsóide, representando cada nanofio, as arestas do malhado foram de  $6.9$  nm, maior malhado das simulações. Os ciclos de histerese permitiram comparar nossos resultados com trabalhos realizados por outros autores. Foi possível verificar também como a coercividade e a remanência modificavam seu comportamento de acordo com o ângulo de aplicação do campo externo. Para os fios compostos por uma cadeia de elipsóides, a coercividade mudou de aproximadamente  $700$  Oe a  $0$  entre os ângulos de  $0$  a  $90^\circ$ , apresentando uma queda no ângulo de  $60^\circ$ . Para o arranjo com a cadeia de elipsóides desalinhados, o comportamento obtido foi similar e o campo coercitivo variou de aproximadamente  $780$  Oe a  $0$ , o decaimento ocorreu também no ângulo de  $60^\circ$ . Esse comportamento é semelhante ao modo de reversão coerente. Para os nanofios compostos por uma cadeia de cuboctaedros, a variação na coercividade foi ainda menor e o campo coercitivo assumiu valores entre  $200$  Oe a  $0$  sem sofrer o padrão de decaimento observado nos modelos de reversão. A diminuição da coercividade para o arranjo formado por cuboctaedros pode ser associada a sua geometria. Os resultados obtidos para essas estruturas comprovam que o formato dos cristais, bem como as interações dipolares, afetam as propriedades magnéticas e os modos de reversão da magnetização nos nanofios.

**Palavras-chaves:** Nanofios. Simulação micromagnética. Nmag.

## ABSTRACT

In this study we use micromagnetic simulation with the Nmag package, based on the finite element method. Hexagonal arrangements of nanowires formed by cylinder-shaped particles, ellipsoids, ellipsoid chains (one arrangement with all ellipsoids aligned with the nanowire axis and the other with deflected ellipsoids of angles less than  $5^\circ$ ) and cuboctahedra were simulated, aiming to evaluate how the shape of nanowire crystals influences the magnetic properties. To this end, we considered exchange interaction, Zeeman interaction and magnetostatic contribution. In these simulations it was considered that the nanowires were polycrystalline, so that anisotropy in Ni was not included. Thermal effects were also not taken into account. The hysteresis cycles for each arrangement were produced by applying an external field at angles ranging from  $0$  to  $90^\circ$ , between the applied magnetic field and the axis of the nanowires. In the arrangements, the nanowires were  $50$  nm from center to center. The measurements of each nanowire were  $40$  nm for the average diameter,  $400$  nm for length in the ellipsoid chain formats and  $350$  nm for the other formats. The spotted netgen had the shortest average length in the arrangement formed by the aligned ellipsoid chain,  $5.44$  nm, while for the single ellipsoid arrangement representing each nanowire, the edges of the piebald were  $6.9$  nm, the largest piebald of the simulations. The hysteresis cycles allowed us to compare our results with studies by other authors. It was also possible to verify how coercivity and remnant modified their behavior according to the application angle of the external field. For arrangement composed of an ellipsoid chain, the coercivity shifted from approximately  $700$  Oe to  $0$  between the angles from  $0$  to  $90^\circ$ , showing a drop in the angle of  $60^\circ$ . For the arrangement with the misaligned ellipsoid chain, the behavior obtained was similar and the coercive field ranged from approximately  $780$  Oe to  $0$ , the decay also occurred at the angle of  $60^\circ$ . This behavior is similar to coherent reversal mode. For nanowires composed of a cuboctahedron chain, the variation in coercivity was even smaller and the coercive field assumed values between  $200$  Oe to  $0$  without suffering the decay pattern observed in the reversal models. The decrease in coercivity for the cuboctahedron arrangement can be associated with its geometry. The results obtained for these structures prove that the crystal shape, as well as the dipolar interactions, affects the magnetic properties and the reversal modes of magnetization in the nanowires.

**Keywords:** Nanowires. Micromagnetic simulations. Nmag.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – A,B) Membranas de óxido de alumínio anódico (AAO); C) Secção transversal de um filme poroso [1] . . . . .	15
Figura 2 – Representação da geometria de nanofios em: a) Cilindro; b) Cilindro de ponta arredondada; c) Halter; d) Diabolo [2] . . . . .	16
Figura 3 – A) Nanofio de Ni produzido por eletrodeposição em membranas de AAO [3]; B) Nanofio de Ni produzido por eletrodeposição em membranas de AAO [4]; C) Geometria de uma cadeia de cuboctaedros criada para simulação no Nmag [4] . . . . .	16
Figura 4 – Ciclos de histerese ilustrando pontos críticos e características magnéticas para diferentes materiais. Onde o material duro apresenta um grande campo coercitivo enquanto o material mole apresenta um campo coercitivo pequeno. Imagem produzida pela autora . . . . .	19
Figura 5 – Esquema de transição do vetor de magnetização entre domínios anti-paralelos para paredes de Bloch e paredes de Néel - Produzido pela autora . . . . .	22
Figura 6 – Eixos e ângulos definidos para a partícula no modelo de Stoner-Wohlfarth (a); Relação entre a energia e o ângulo de magnetização para campo externo nulo (linha contínua) e para um valor de campo externo menor do que o campo coercitivo (linha tracejada)(b) [5] . . . . .	26
Figura 7 – Ciclos de histerese calculados usando o modelo de S-W para partículas com anisotropia uniaxial, em monodomínio. $\theta$ é o ângulo entre o campo externo e o eixo uniaxial. [6] . . . . .	27
Figura 8 – Mecanismo de reversão por nucleação e propagação para um nanofio de 40 nm de diâmetro, 100 nm de distância entre os centros e comprimento 1 $\mu$ m. Realizado por simulação micromagnética utilizando discretização pelo método de elemento finito e o método de contorno. Da esquerda para direita há um ordenamento temporal crescente, com o mesmo passo.[7] . . . . .	28
Figura 9 – Coercividade para diferentes ângulos de aplicação do campo externo para um nanofio de 50 nm de acordo com [8] à esquerda. Modos de reversão da magnetização em nanofios, por rotação coerente e modo transversal, a direita[8]. . . . .	28

Figura 10 – Esquema para os modos de reversão coerente, buckling e curling. As setas representam os momentos. É possível verificar as diferenças entre os modos observando a visão do transversal. O modo buckling não foi representado mas em secções transversais ele possui modos de magnetização que se assemelham ao modo coerente [9]. . . . .	31
Figura 11 – (a) Esfera discretizada pelo método de elementos finitos, utilizando o Netgen; (b) Esfera discretizada pelo método de diferenças finitas [10] .	34
Figura 12 – (a) Membranas de AAO produzidas em nosso laboratório [11]; (b) Imagem de nanofios de Níquel, produzida por TEM, mostrando cristais com formato semelhante a uma cadeia de elipsóides [11];(c) Imagem de nanofios de Ni, produzida por TEM, com irregularidades que foram interpretadas como uma cadeia de cuboctaedros [4]; (d)Formato do nanofio real à esquerda, formato do nanofio representado em simulação computacional à direita [4]; (e) Ordenamento do arranjo da simulação micromagnética [4] . . . . .	36
Figura 13 – Vista superior das geometrias estudadas. Com todos os nanofios de diâmetro 40 nm e distando de 50 nm entre os centros, dispostos em arranjo hexagonal, como representado no arranjo cilíndrico (a); arranjo com um elipsóide (b); arranjo com elipsóides em cadeia alinhada (c); arranjo com cadeia de elipsóides com orientaçãoo aleatória em relação ao eixo do nanofio (d); cadeia de cuboctaedros (e). Abaixo, os arranjos com vista tridimensional e suas respectivas nomenclaturas. Para os fios em formato cilíndrico (Arranjo 1); Elipsoidal (Arranjo 2); Cadeia de elipsóides alinhados (Arranjo 3); Cadeia de elipsóides com deflexão no ângulo entre o eixo do elipsóide e o do fio (Arranjo 4); Cadeia de cuboctaedros (Arranjo 5) . . . . .	37
Figura 14 – Nesta imagem cada arranjo foi representado por apenas um nanofio: Arranjo 1, composto por cilindros de comprimento 350 nm; Arranjo 2, um único elipsóide de comprimento 350 nm; Arranjo 3, composto por uma cadeia de elipsóides alinhados, cada um com o comprimento de 80 nm totalizando o comprimento de 400 nm do nanofio; Arranjo 4, cadeia de elipsóides com pequenas deflexões entre o eixo do fio e o do elipsóide, comprimento de 80 nm para cada elipsóide e aproximadamente de 400 nm para o nanofio; Arranjo 5, composto por cuboctaedros de 40 nm de diâmetro médio e comprimento total do nanofio de 350 nm . . . . .	38
Figura 15 – Malhado gerado no Netgen para as geometrias: a) Arranjo 1; b) Arranjo 2; c) Arranjo 3; d) Arranjo 4; e) Arranjo 5 . . . . .	39
Figura 16 – Script do Arranjo 2, 7 nanofios em formato de elipsóides, para $\theta = 45^\circ$	41

Figura 17 – Laços de histerese para o arranjo hexagonal composto por sete nanofios de 350 nm representados por cilindros. Para os ângulos $\theta$ , entre o eixo principal do cilindro e o campo magnético aplicado: a) $0^\circ$ ; b) $30^\circ$ ; c) $60^\circ$ ; d) $90^\circ$ . . . . .	44
Figura 18 – Histerese produzida por Hertel [7] para um arranjo com sete cilindros, com o campo externo aplicado na direção dos fios (a esquerda). Histerese produzida por Hertel [12] para um arranjo com sete cilindros, com o campo externo aplicado na direção perpendicular aos fios (a direita). . . . .	44
Figura 19 – Coercividade para diferentes ângulos de aplicação do campo externo para um nanofio de 50 nm de acordo com [8]. . . . .	45
Figura 20 – Curva de coercitividade $H_C$ em função do ângulo $\theta$ de aplicação do campo externo, para nanofios do Arranjo 1. A coercitividade $H_C$ é obtida através das curvas de histerese. . . . .	46
Figura 21 – Curva de magnetização remanente $M_r$ em função ângulo $\theta$ , de aplicação do campo externo para os nanofios do Arranjo 1. A remanência $M_r$ é obtida através das curvas de histerese. . . . .	47
Figura 22 – Laços de histerese para o arranjo hexagonal composto por sete nanofios de 350 nm cada um representado por único elipsóide. Para os ângulos $\theta$ , entre o eixo principal do nanofio e o campo magnético aplicado: a) $0^\circ$ ; b) $30^\circ$ ; c) $60^\circ$ ; d) $90^\circ$ . . . . .	48
Figura 23 – Curva de coercitividade $H_C$ em função do ângulo $\theta$ de aplicação do campo externo, para nanofios do Arranjo 2. A coercitividade $H_C$ é obtida através das curvas de histerese. . . . .	49
Figura 24 – Curva de magnetização remanente $M_r$ em função ângulo $\theta$ , de aplicação do campo externo para os nanofios do Arranjo 2. A remanência $M_r$ é obtida através das curvas de histerese. . . . .	50
Figura 25 – Laços de histerese para o arranjo hexagonal composto por sete nanofios de 400 nm, onde cada nanofio foi composto por uma cadeia de cinco elipsóides alinhados com o eixo do nanofio (eixo x). Para os ângulos $\theta$ , entre o eixo principal do nanofio e o campo magnético aplicado: a) $0^\circ$ ; b) $30^\circ$ ; c) $60^\circ$ ; d) $90^\circ$ . . . . .	52
Figura 26 – Curva de coercitividade $H_C$ em função do ângulo $\theta$ de aplicação do campo externo, para nanofios do Arranjo 3. A coercitividade $H_C$ é obtida através das curvas de histerese. . . . .	53
Figura 27 – Curva experimental da coercitividade $H_C$ em função ângulo de aplicação do campo externo, $\theta$ . Em azul os valores de coercividade para nanofios que passaram por um tratamento térmico e em vermelho os valores para a amostra sem o tratamento [13]. . . . .	54

Figura 28 – Curva de magnetização remanente $M_r$ em função ângulo $\theta$ , de aplicação do campo externo para os nanofios do Arranjo 3. A remanência $M_r$ é obtida através das curvas de histerese. . . . .	54
Figura 29 – Curva experimental da remanência reduzida $M_r/M_s$ em função ângulo de aplicação do campo externo, $\theta$ . Em azul os valores de coercividade para nanofios que passaram por um tratamento térmico e em vermelho os valores para a amostra sem o tratamento [13]. . . . .	55
Figura 30 – Laços de histerese para o arranjo hexagonal composto por sete nanofios de 400 nm de comprimento onde cada nanofio foi composto por uma cadeia de cinco elipsóides de angulação aleatória em relação ao eixo do fio, porém de forma que o ângulo $\alpha$ não ultrapassasse o valor de $5^\circ$ . Para os ângulos $\theta$ , entre o eixo principal do nanofio e o campo magnético aplicado: a) $0^\circ$ ; b) $30^\circ$ ; c) $60^\circ$ ; d) $90^\circ$ . . . . .	56
Figura 31 – Curva de coercitividade $H_C$ em função do ângulo $\theta$ de aplicação do campo externo, para nanofios do Arranjo 4. A coercitividade $H_C$ é obtida através das curvas de histerese. . . . .	57
Figura 32 – Curva de magnetização remanente $M_r$ em função ângulo $\theta$ , de aplicação do campo externo para os nanofios do Arranjo 4. A remanência $M_r$ é obtida através das curvas de histerese. . . . .	58
Figura 33 – Laços de histerese para o arranjo hexagonal composto por sete nanofios de 350 nm cada, compostos por uma cadeia de cuboctaedros. Para os ângulos $\theta$ , entre o eixo principal do nanofio e o campo magnético aplicado: a) $0^\circ$ ; b) $30^\circ$ ; c) $60^\circ$ ; d) $90^\circ$ . . . . .	59
Figura 34 – Curva de coercitividade $H_C$ em função do ângulo $\theta$ de aplicação do campo externo, para nanofios do Arranjo 5 (. A coercitividade $H_C$ é obtida através das curvas de histerese. . . . .	60
Figura 35 – Curva de coercividade $H_c$ em função ângulo do campo aplicado $\theta$ , para nanofios produzidos e gerados em [4]. A curva azul corresponde as medidas da simulação de um arranjo hexagonal composto de uma cadeia de cuboctaedros de 30 nm. Enquanto que a curva em vermelho corresponde as medidas do nanofio eletrodepositado em membranas de AAO. . . . .	61
Figura 36 – Curva de magnetização remanente $M_r$ em função ângulo $\theta$ , de aplicação do campo externo para os nanofios do Arranjo 5. A remanência $M_r$ é obtida através das curvas de histerese. . . . .	61

Figura 37 – Curva de magnetização remanente $M_r/M_s$ em função ângulo do campo aplicado $\theta$ , para nanofios produzidos e gerados em [4]. A curva azul corresponde as medidas da simulação de um arranjo hexagonal composto de uma cadeia de cuboctaedros de 30 nm. Enquanto que a curva em vermelho corresponde as medidas do nanofio eletrodepositado em membranas de AAO. . . . .	62
Figura 38 – Variação angular do campo de comutação $H_{sw}$ para um fio de Niquel com aproximadamente 50 nm de diâmetro e 3.5 $\mu\text{m}$ de comprimento. Na parte interior um histograma de $H_{sw}$ para o ângulo 5°. [14]. . . . .	63
Figura 39 – Variação angular do campo de comutação $H_{sw}$ para um fio de Niquel com aproximadamente 50 nm de diâmetro e 3.5 $\mu\text{m}$ de comprimento. Na parte interior um histograma de $H_{sw}$ para o ângulo 5°. [14]. . . . .	63
Figura 40 – Variação angular do campo de comutação para diferentes fatores de forma [15]. . . . .	64
Figura 41 – Derivadas da histerese de multicamadas de Co/Pt em superfície com período de 100 nm a temperaturas variadas [16]. . . . .	65
Figura 42 – Derivada da curva de histerese para o Arranjo de cilindros em $\theta = 0^\circ$ . . . . .	66
Figura 43 – Derivada da curva de histerese para o Arranjo de elipsóides longos em $\theta = 0^\circ$ . . . . .	66
Figura 44 – Derivada da curva de histerese parao Arranjo de cadeias de elipsóides alinhados em $\theta = 0^\circ$ . . . . .	67
Figura 45 – Derivada da curva de histerese parao Arranjo de cadeias de elipsóides desalinhados em $\theta = 0^\circ$ . . . . .	67
Figura 46 – Derivada da curva de histerese para o Arranjo de cuboctaedros em $\theta = 0^\circ$ . . . . .	68
Figura 47 – Derivadas da curvas de histerese para todos so Arranjos em $\theta = 0^\circ$ . Em que A1 representa o Arranjo 1, na curva verde; A2, o Arranjo 2 na curva vermelha; A3, o Arranjo 3 na curva azul; A4, o Arranjo 4 na curva preta; A5, o Arranjo 5 na curva rosa . . . . .	68

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Relação do malhado, para cada arranjo, com a memória necessária para a simulação . . . . .	40
Tabela 2 – Valores de coercividade e remanência para o arranjo composto por cilindros, Arranjo 1 . . . . .	45
Tabela 3 – Valores de coercividade e remanência para o arranjo composto por elipsóides longos, Arranjo 2 . . . . .	49
Tabela 4 – Valores de coercividade e remanência para o arranjo composto por cadeias de elipsóides alinhados, Arranjo 3 . . . . .	53
Tabela 5 – Valores de coercividade e remanência para o arranjo composto por cadeias de elipsóides desalinhados, Arranjo 4 . . . . .	57
Tabela 6 – Valores de coercividade e remanência para o arranjo composto por cadeias de cuboctaedros, Arranjo 5 . . . . .	60

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO . . . . .	14
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA . . . . .	18
2.1	ENERGIAS EM SISTEMAS MAGNÉTICOS . . . . .	19
2.1.1	Energia Zeeman, $E_{Zeeman}$ . . . . .	20
2.1.2	Energia de troca . . . . .	20
2.1.3	Energias associadas à anisotropia magnética . . . . .	22
2.1.3.1	<i>Energia Magnetocristalina</i> . . . . .	22
2.1.3.2	<i>Energia Magnetostática, efeitos de forma</i> . . . . .	23
2.1.4	Mecanismos de reversão de magnetização em nanofios . . . . .	25
2.2	APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO, MODELO DE CADEIA DE ELIPSÓIDES E INTERAÇÃO DIPOLAR ENTRE FIOS NUM ARRANJO	31
2.3	EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT, LLG . . . . .	32
2.4	NMAG NA SOLUÇÃO NUMÉRICA DO MICROMAGNETISMO . . . . .	33
3	METODOLOGIA E APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA . . . . .	35
3.1	GEOMETRIA DOS ARRANJOS DE NANOFIOS E FORMA DOS CRISTAIS QUE OS COMPÕEM . . . . .	35
3.2	GERAÇÃO DO MALHADO E CONDIÇÕES PARA REALIZAR A SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA . . . . .	39
4	RESULTADOS . . . . .	43
4.1	CURVAS DE MAGNETIZAÇÃO EM FUNÇÃO DO ÂNGULO, $\theta$ . . . . .	43
4.1.1	Arranjo de Cilindros - Arranjo 1 . . . . .	43
4.1.2	Arranjo formado por elipsóides longos - Arranjo 2 . . . . .	48
4.1.3	Arranjo formado por cadeias de elipsóides alinhados, Arranjo 3	51
4.1.4	Arranjo formado por cadeias de elipsóides desalinhados, Ar- ranjo 4 . . . . .	55
4.1.5	Arranjo formado por uma cadeia de cuboctaedros, Arranjo 5 .	58
4.1.6	Campos de comutação, $H_{sw}$ . . . . .	62
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS . . . . .	69
	REFERÊNCIAS . . . . .	70

## 1 INTRODUÇÃO

O estudo de nanofios magnéticos com partículas de diferentes formatos, tamanho e morfologia cristalina nos proporciona analisar comportamentos magnéticos variados, de forma que uma simples modificação na geometria dos nanofios pode alterar sua funcionalidade. Sendo assim, por trás do entendimento físico há uma crescente motivação comercial, pois os nanofios têm aplicações que abrangem desde a produção de baterias de lítio [17] à spintrônica [18][19]. Sensores, atuadores, detectores de gás, dispositivos de armazenamento de informação, dispositivos lógicos e equipamentos biomédicos [20] [21] [22] são alguns exemplos de aplicações tecnológicas importantes que surgiram a partir da utilização dos resultados obtidos pelos grupos de pesquisa. Por tanto, a otimização e controle do comportamento magnético é fundamental nas aplicações e no nanomagnetismo.

Dos fatores pertinentes no estudo das propriedades magnéticas temos como principais influenciadores na resposta magnética: A natureza do material, a geometria da amostra e a temperatura em que as medidas são realizadas [23] [24] [25] [26].

Existem várias formas de produzir nanofios como as técnicas de soluções químicas dentre elas a auto-montagem, sol-gel ou emulsões e a epitaxia de feixe molecular [27] [28] [29] [30] [31]. Dos métodos eletroquímicos, o método proposto por Masuda et al [32], na produção de membranas, obteve destaque por ser um procedimento que permite a formação de nanofios a um baixo custo, fornecendo um arranjo denso e ordenado de poros paralelos que têm parâmetros geométricos ajustáveis [33]. Na Figura 1, têm-se em A e B membranas de óxido de alumínio anódico (AAO) que servirão de molde na produção de nanofios. Um arranjo com 50 nm de distanciamento entre os centros dos poros têm uma densidade que pode, por exemplo, ser a base para fabricação de discos rígidos de 300 Gbit/in<sup>2</sup> [34].

O estudo do comportamento magnético dessas estruturas ocorre através de trabalhos teóricos e experimentais. Nos últimos, o estudo das propriedades magnéticas se dá após a fabricação dos nanofios [35] [36] [37]. O material resultante que é de interesse para mídia de gravação magnética, em geral, na forma matrizes hexagonais [33]. Já nos trabalhos teóricos o estudo é realizado através de simulação micromagnética em plataformas como OMMF, Nmag e Mumax [38] [39] [40] [41] [42] [43].

Após a fabricação de nanofios, através de microscopia eletrônica, é possível verificar que dependendo da técnica utilizada ou de condições da solução, o formato do nanofio produzido varia. Mas, apesar desse formato variar, vários estudos teóricos, sejam eles analíticos ou computacionais, consideraram esses nanofios como cilindros perfeitos ou elipsóides [44] [45] [46].

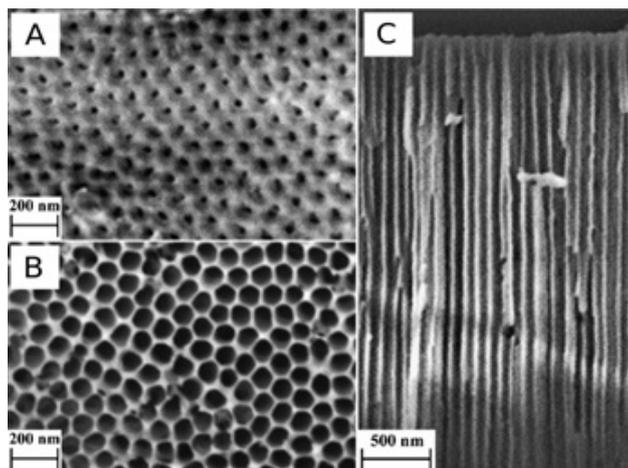


Figura 1 – A,B) Membranas de óxido de alumínio anódico (AAO); C) Secção transversal de um filme poroso [1]

No trabalho de Hertel [7], foram investigados processos de reversão da magnetização em nanofios de Ni, em geometrias cilíndricas. Utilizando o método de elementos finitos, a simulação foi realizada para arranjos com quantidades de nanofios variadas, partindo de nanofios isolados até arranjos de 16 cilindros. Para a situação com um nanofio isolado a coercividade apresentou apenas a mesma ordem de grandeza que as medidas experimentais, enquanto que para o arranjo com 16 nanofios, a magnitude da coercividade é muito próxima. Evidenciando a influência forte das interações magnéticas dipolares entre os nanofios.

Hongjian [47] investigou as propriedades magnéticas e processos desmagnetizantes para estruturas de elipsóides e cilindros. E comprovou que a morfologia dos nanofios, o raio e as interações dipolares afetam diretamente as propriedades magnéticas e o modo “switching”.

Além dos formatos de cilindros e elipsóides, outros formatos de nanofios foram estudados. Nas Figuras 2 e 3 têm-se alguns destas geometrias, variando desde geometrias similares a cilindros, como os de cilindros com a ponta arredondada (capped) e diábolo, à geometrias mais complexas com nanofios compostos de cadeias de elipsóides e cuboctaedros [47] [48] [2] [4].

Faith Zighem e Silvana Mercone [2], por meio de simulação micromagnética utilizando o Nmag nas estruturas de cilindro, diábolo, cilindro de ponta redonda e halteres, verificaram que quando a razão entre o comprimento e o diâmetro é superior a 10, o comprimento não é mais um fator pertinente nas propriedades magnéticas estáticas. Já a forma dos nanofios e o diâmetro interno afetavam a desmagnetização e portanto o campo coercitivo,  $H_c$ .

Trabalhos experimentais fornecem imagens de microscopia eletrônica de transmissão (TEM) que são fundamentais na escolha da forma apropriada a ser simulada nos trabalhos

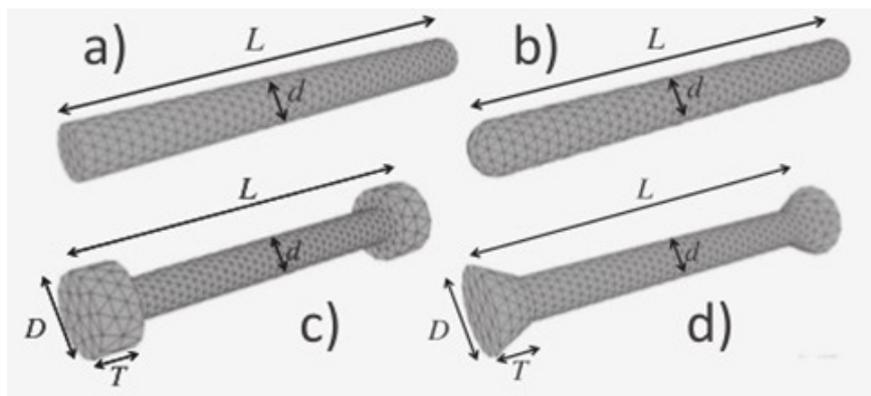


Figura 2 – Representação da geometria de nanofios em: a) Cilindro; b) Cilindro de ponta arredondada; c) Halter; d) Diabolo [2]

teóricos. J. Holanda [3] ao produzir nanofios de Ni em poros de óxido de Al anódico, observou que o nanofio tinha uma estrutura parecida com um conjunto de elipsóides. (Figura 3A)

Já os nanofios produzidos por C. França e colaboradores [4] apresentaram uma estrutura que foi representada na simulação, utilizando o Nmag, por uma cadeia de cuboctaedros. Neste trabalho os autores obtiveram uma correspondência entre os modos de reversão reais e simulados (Figura 3 "B" e "C"), mais adequada que a proposta por Hertel [7] ao assumir um cilindro ideal. Concluiu-se, assim, que a forma real do nanofio altera as propriedades magnéticas, coercividade e modos de reversão.

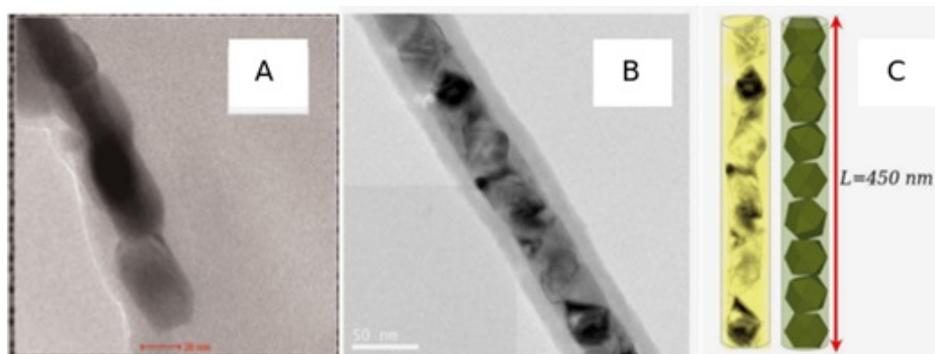


Figura 3 – A) Nanofio de Ni produzido por eletrodeposição em membranas de AAO [3]; B) Nanofio de Ni produzido por eletrodeposição em membranas de AAO [4]; C) Geometria de uma cadeia de cuboctaedros criada para simulação no Nmag [4]

O formato real do nanofio varia de acordo com a forma como é fabricado, ou seja, o tipo de membrana e a solução inicial afetam a microestrutura [49]. Estas alterações geométricas são refletidas nas propriedades magnéticas. Estudar os modos de reversão, a dependência angular do campo coercitivo e da magnetização remanente irá fornecer melhores resultados no domínio desses componentes, quando consideradas as variações geométricas, a fim de eliminar ambiguidades ainda presentes.

Com o propósito de entender melhor a influência da geometria na coercividade e por conseguinte na reversão da magnetização, neste trabalho foram estudados arranjos hexagonais de nanofios em forma de cilindros, elipsóides, cadeias de elipsóides e de cuboctaedros. Através da simulação micromagnética, é possível extrair dados de histerese, bem como a coercividade e remanência de acordo com a variação do ângulo de aplicação do campo externo.

O formato dos cristais que formam os nanofios determina fortemente as interações dipolares, e em escalas de tamanho típicas de arranjos aqui mencionados essa contribuição é intensa. O níquel possui uma baixa energia magnetocristalina, sendo ideal como material de estudo. Dessa forma, para um nanofio cilíndrico o eixo de fácil magnetização estaria definido pelas interações dipolares ao longo do eixo.

Além da Introdução, esta dissertação está dividida em mais três capítulos. O Capítulo 2 aborda conceitos necessários no estudo de materiais ferromagnéticos e a teoria micromagnética. O capítulo que segue explana a metodologia utilizada e apresenta o problema, justificando os arranjos estudados com uma breve revisão bibliográfica para fornecer um acervo teórico que nos permita analisar os resultados. No quarto capítulo, os resultados serão apresentados e analisados, avaliando os ciclos de histerese, a coercividade e remanência para todos os arranjos e ângulos aplicados e também o campo de comutação.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Um material ferromagnético é caracterizado por ter seus momentos de dipolo atômicos acoplados alinhados paralelamente. Mesmo na ausência de campo o momento magnético estará presente, pois, haverá magnetização espontânea desde que a temperatura não ultrapasse a temperatura de Curie, 354 °C para o Ni [50]. A partir desse valor de temperatura, característico de cada material, a energia térmica destrói o ordenamento magnético de longo alcance e o material passa a ser paramagnético. Poucos são os materiais que têm esse comportamento e são considerados materiais ferromagnéticos estes incluem Fe, Ni, Co, Gd, Dy e suas ligas com elementos terra rara [51].

Outra característica marcante de materiais ferromagnéticos é o ciclo de histerese. Da própria origem da palavra ‘histerese’ que significa retardo [52], esses materiais conservam características após a remoção do estímulo que as gerou, o campo magnético. Os materiais ferromagnéticos possuem memória, apresentando em geral uma magnetização remanente  $M_r$ , também chamada de remanência, após a remoção de um campo  $\vec{H}$  que seja intenso o bastante para levar o material a uma saturação da magnetização. Ou seja, a magnetização desses materiais é um reflexo do tratamento prévio ao qual foi submetido, seja ele térmico, magnético ou de outro tipo. Para levar a remanência a zero, é necessário aplicar um campo  $-H_c$ . [6]

Sendo assim, diante da histerese é possível obter informações sobre as características magnéticas dos materiais ferromagnéticos. Na Figura 4, os três ciclos servirão de base para ilustrar os pontos e os formatos importantes na análise magnética. A histerese é a relação da magnetização,  $\vec{M}$ , do material com o campo magnético externo,  $\vec{H}$ . A magnetização muda de sentido quando  $\vec{H}$  atinge um valor,  $H_c$ , denominado coercividade ou campo coercitivo. Além desses pontos característicos, há um terceiro ponto chamado de magnetização de saturação,  $M_s$ . Este é o ponto a partir do qual a magnetização não pode ser aumentada (Figura 4). No micromagnetismo, se assume que a temperatura é fixa. Então os parâmetros do material, como magnetização de saturação são fixos.

Além dos pontos mencionados, ao avaliar um laço de histerese podemos observar a largura do laço. Um ciclo estreito significa que é necessário aplicar um campo menor para desmagnetizar a amostra do que é necessário em um ciclo largo. Ou seja, quando o laço é largo, a coercividade é alta e o material é dito como “duro”, característica necessária para os ímãs permanentes. Do contrário, para laços estreitos temos materiais “moles” como é o caso do ferro. Ambos os tipos de materiais possuem aplicações industriais importantes, melhorar a histerese para os primeiros significa aumentar a coercitividade. Para os moles, diminuí-la. Nos materiais utilizados para o armazenamento de dados, é de se esperar que o dispositivo tenha uma coercitividade larga para que a perda da magnetização devido

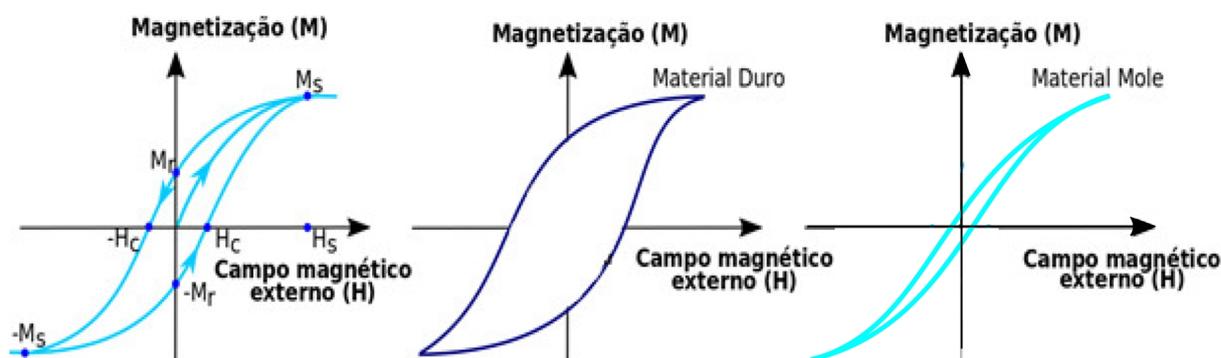


Figura 4 – Ciclos de histerese ilustrando pontos críticos e características magnéticas para diferentes materiais. Onde o material duro apresenta um grande campo coercitivo enquanto o material mole apresenta um campo coercitivo pequeno. Imagem produzida pela autora

desmagnetizações locais seja baixa porém que a reversão de magnetização ainda seja possível e assim poder ser gravado, de uma forma que forneça um sinal legível para a cabeça de leitura.[6]

Do processo de entendimento da magnetização de partículas magnéticas, a teoria Micromagnética é um dos conceitos teóricos fundamentais. Esta teoria, que envolve aproximações e mescla teorias de eletrodinâmica clássica com matéria condensada, permite o estudo da magnetização a uma escala maior que a escala atômica [53]. Outros modelos como a Teoria de nível atômico, Teoria de Domínio [54], Teoria de fase e a Histerese magnética foram propostos na tentativa de descrever os materiais ferromagnéticos na escala macroscópica. Cada teoria quando se utiliza de certas simplificações, descreve bem o sistema apenas em determinadas escalas. Quando as dimensões das partículas se comparam com a dimensão da parede de domínio, o micromagnetismo se torna mais adequado. De tal forma que apesar das equações do modelo micromagnético poderem ser resolvidas numericamente apenas para sistemas relativamente grandes, ainda assim se mostrou como a teoria mais adequada numa escala de 1 a 1000 nm. [55]

O micromagnetismo descreve o campo vetorial de magnetização pela equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG). Para o caso específico de materiais ferromagnéticos, é possível considerar magnetos elementares que distando de um valor menor que a medida de interação de troca. A distribuição dos momentos magnéticos  $m_i$  pode ser aproximada a uma densidade contínua de magnetização  $\vec{M}(\mathbf{r})$ .

## 2.1 ENERGIAS EM SISTEMAS MAGNÉTICOS

A energia de materiais ferromagnéticos tem descrições oriundas tanto da física clássica quanto da quântica. No estudo de nanofios, a energia magnética é representada

pelas contribuições:  $E_{Zeeman}$  (Energia Zeeman, descreve as interações do campo aplicado e a magnetização da partícula),  $E_{an}$  (Energia magnetocristalina, se origina da interação spin-órbita),  $E_{ex}$  (Energia de troca, advém da mecânica-quântica e provoca o alinhamento de momentos vizinhos),  $E_{mag}$  (Energia magnetostática, consequência da forma do material). A soma de todas essas energias fornece a energia livre total da partícula,  $E_{tot}$  (Equação 2.1), e seus estados de equilíbrio determinam a configuração magnética do sistema. Outras contribuições podem surgir, porém não serão levadas em conta nesse estudo.

$$E_{tot} = E_{Zeeman} + E_{an} + E_{ex} + E_{mag} \quad (2.1)$$

Como descrito na Equação 2.1, a Energia total do sistema é a soma de todas as energias magnéticas presentes, na maioria das vezes essas energias estão relacionadas com a anisotropia magnética que depende da orientação da magnetização. Levando em conta essas energias, ao submeter um arranjo de nanofios a um campo externo e minimizar a energia livre total, é possível obter as curvas de histerese [56].

### 2.1.1 Energia Zeeman, $E_{Zeeman}$

Denomina-se energia Zeeman a energia responsável pela descrição da interação magnética do material com um campo externo. Quando é colocado um campo externo ao material é possível magnetizar a amostra em uma determinada direção e estudar a variação dos modos de reversão. Esta interação dos momentos magnéticos do material como o campo externo é definida como:

$$E_{Zeeman} = - \int \vec{M} \cdot \vec{H} dV \quad (2.2)$$

Para  $\vec{M}$  uniforme a Equação 2.2 pode ser simplificada à Equação 2.3 :

$$E_{Zeeman} = -V(\vec{M} \cdot \vec{H}) \quad (2.3)$$

A energia Zeeman atinge seu valor mínimo quando  $\vec{M}$  é paralelo a  $\vec{H}$ , fazendo com que um campo externo ao material tenda a alinhar a magnetização em sua direção.

### 2.1.2 Energia de troca

A contribuição energética de troca surge devido à indistinguibilidade dos elétrons [57], possuindo origem mecano-quântica e dois conceitos a serem levados em conta:

1. O princípio da exclusão de Pauli, apenas um elétron pode ocupar um estado quântico de energia, por vez.

2. Funções de onda associadas a eletrons podem se sobrepor quando os átomos são colocados próximos.

A energia de troca em materiais ferromagnéticos é uma interação dominante para distâncias curtas, provocando o alinhamento de momentos vizinhos. Por ter sua origem na mecano-quantica a interação de troca pode ser descrita pelo Hamiltoniano de Heisenberg, como segue na equação 2.4, para dois spins vizinhos.  $J$  é a integral de troca e  $\vec{S}_i$  e  $\vec{S}_j$  são operadores de spin.

$$E_{i,j} = -J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.4)$$

Considerando que os operadores de spin  $\vec{S}_i$  e  $\vec{S}_j$  têm a mesma magnitude e fazendo uma pequena manipulação algébrica, ao considerar todos os spins vizinhos do objeto magnético, chega-se à Equação 2.5. Aqui  $J_{i,j}$  é a integral de troca para os spins  $i$  e  $j$ .

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

Para sistemas macroscópicos é possível aproximar a Equação 2.5 a uma integral sobre todo o volume da amostra, onde as contribuições oriundas da inhomogeneidade de magnetização interferem na energia (Equação 2.6).  $A$  é a constante de rigidez de troca, que se relaciona com  $J$  seguindo a Equação 2.7, para materiais isotrópicos e cúbicos independe da dimensão e  $m$  é a magnetização reduzida, definida como a razão entre a magnetização do sistema e magnetização de saturação.

$$E = \int A[\nabla m_x^2 + \nabla m_y^2 + \nabla m_z^2] dV \quad (2.6)$$

$$A = \frac{JS^2z}{a}, \quad (2.7)$$

Na equação 2.7,  $a$  é a distância entre os primeiros vizinhos e  $z$  é uma constante que depende da estrutura cristalina e assume os valores de 1, 2 ou 4 para as estruturas cúbica simples, cúbica de face centrada (fcc) ou cúbica de corpo centrado (ccc), respectivamente.

Como a Equação 2.6 é derivada do modelo de Heisenberg, se assume que os spins são localizados. A interação de troca entre spins localizados de orbitais "d", em condutores como Ni e Fe, tipicamente ocorre por meio de elétrons de condução. Ou seja, a Equação 2.5 não é estritamente adequada para descrever a troca em materiais ferromagnéticos como o Ni e o Fe. Por outro lado, a equação 2.6 descreve a interação de troca de forma fenomenológica em primeira ordem destes materiais.

Para minimizar a energia do sistema ocorre um balanceamento da energia de troca com as demais energias. Surgem então, regiões em que os momentos magnéticos de cada

átomo se alinham paralelamente em uma determinada direção. Enquanto que em outras regiões os momentos estão alinhados a outra direção. Essas regiões são chamadas de “domínios magnéticos”, cuja formação ocorre em materiais ferromagnéticos e ferrimagnéticos. Os domínios são dispostos e orientados de forma aleatória. Entretanto, dentro de cada domínio a magnetização será homogênea e paralela a uma das direções do material, de acordo com a sua anisotropia [55].

A região de transição entre domínios vizinhos é chamada de parede de domínio. E como descrito por Bloch, a transição entre os dominios é contínua [58]. Uma transição abrupta implicaria em uma alta energia de troca. Quando o campo magnético é aplicado, ocorre um deslocamento das paredes de domínio fazendo com que a magnetização cresça na direção do campo efetivo.

Na descrição das paredes de domínio existem dois tipos fundamentais de classificações para as paredes entre domínios antiparalelos (Figura 5); as paredes de Bloch e as paredes de Néel. Nas paredes de Bloch a transição gradativa se dá com um giro do vetor magnetização de forma paralela ao plano da parede. Já nas paredes de Néel o vetor da magnetização gira de forma perpendicular ao plano da parede.

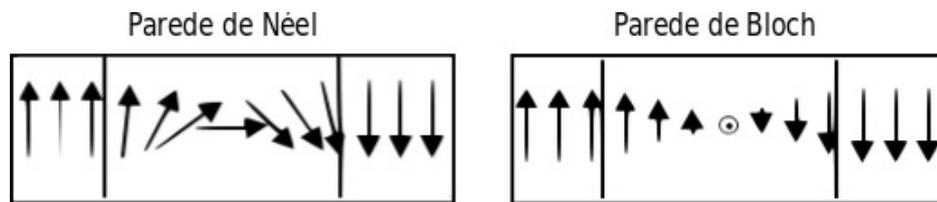


Figura 5 – Esquema de transição do vetor de magnetização entre domínios antiparalelos para paredes de Bloch e paredes de Néel - Produzido pela autora

### 2.1.3 Energias associadas à anisotropia magnética

Anisotropia é a característica de ter propriedades que variam de acordo com a direção. Em outras palavras, as propriedades magnéticas de um material podem ser afetadas pela direção, fazendo com que os momentos magnéticos se alinhem preferivelmente em relação a determinados eixos [59]. Essas diferenças podem ser observadas comparando as curvas de magnetização para campos aplicados em diferentes direções, como analisados nos arranjos de nanofios neste trabalho. No estudo de arranjo de nanofios ferromagnéticos há dois tipos de contribuições anisotrópicas relevantes: A anisotropia de forma e a magnetocristalina.

#### 2.1.3.1 Energia Magnetocristalina

Na anisotropia magnetocristalina os dipolos atômicos preferem se orientar em certas direções dos eixos cristalinos do material. Há então facilidade de ocorrer saturação da magnetização quando o campo externo é aplicado nos eixos de fácil magnetização, como são

denominados. Em termos energéticos, esses seriam mínimos de energia magnetocristalina. Onde  $E(m_{\min}) = E(-m_{\min})$ , já que os sentidos de orientação desses eixos são equivalentes. Quando um campo externo é aplicado em direções não favorecidas pela anisotropia, a saturação também poderá ser atingida, entretanto o campo externo deverá possuir uma magnitude maior do que a necessária caso o campo estivesse orientado no eixo de fácil magnetização. Para movimentar os dipolos de uma direção de eixo fácil para uma difícil (menos favorável energeticamente) é necessário uma quantidade de energia denominada de energia de anisotropia magnetocristalina. É essa energia que retém a magnetização orientada em direções bem definidas, em certos materiais.

A origem dessa anisotropia é na interação spin-orbita entre os spins de elétrons localizados responsáveis pelo ferromagnetismo e o campo produzido no movimento orbital dos elétrons no cristal. O alinhamento desses spins ocorre de forma natural já que os orbitais eletrônicos estão atrelados à estrutura cristalina. A forma mais comum de descrever essa energia é partindo de expressões fenomenológicas, que utilizam expansões em séries de potência e consideram a simetria cristalina do material.

Considerando um material com simetria uniaxial, há apenas um eixo de fácil magnetização (ou difícil, de acordo com o sinal de  $K_u$ ), a energia magnetocristalina é dada pela Equação 2.8 que é uma expansão, com relação aos cossenos diretores, da energia em série de Taylor até a quarta ordem. Na equação,  $\hat{e}_u$  é um vetor unitário na direção do eixo fácil e  $K_{u1}$  e  $K_{u2}$  são constantes de anisotropia do material. Apenas os termos de potências pares são considerados, já que a energia é uma função par, como descrito acima. Essa anisotropia uniaxial é característica de materiais que possuem estrutura cristalina hexagonal ou tetragonal.

$$E = \int_{\Omega} K_{u1} [\vec{m} \cdot \hat{e}_u]^2 + K_{u2} [\vec{m} \cdot \hat{e}_u]^4 dV \quad (2.8)$$

Alguns materiais têm anisotropia cúbica, como é o caso do Ni e do Fe de estrutura cúbica de face centrada e corpo centrado respectivamente. A energia, nesses casos, é descrita por uma expansão de  $m_i$  em relação aos eixos do cristal e é descrita por:

$$E = \int_{\Omega} K_{c1} [m_1^2 m_2^2 + m_2^2 m_3^2 + m_3^2 m_1^2] + K_{c2} [m_u]^4 dV \quad (2.9)$$

Para o níquel os valores das constantes de anisotropia magnetocristalina são de  $K_1 = -4.5 \times 10^3 J/m^3$  e  $K_2 = -2.3 \times 10^3 J/m^3$  à temperatura ambiente, e de  $K_1 = -12 \times 10^3 J/m^3$  e  $K_2 = 3.0 \times 10^3 J/m^3$  a 4.2 K [60].

### 2.1.3.2 Energia Magnetostática, efeitos de forma

A anisotropia de forma como sugere o nome é uma consequência da geometria da amostra. E portanto, para um corpo que não apresenta anisotropia magnetocristalina, ou

seja, caso não possua direções preferenciais de magnetização (devido à organização dos cristais), a forma das partículas e da amostra será determinante nas curvas de magnetização. Apenas uma partícula esférica, por ser altamente simétrica teria suas curvas de histerese inalteradas com a variação na direção do campo externo.

Para materiais ferromagnéticos, um campo externo faz com que a magnetização da amostra se alinhe na direção do campo. Quando isso ocorre, no interior da amostra, surge um campo de direção oposta ao campo externo, conhecido como campo desmagnetizante,  $\vec{H}_D$  que é proporcional à magnetização, caso o objeto seja simétrico. Este fenômeno é decorrente de interações magnetostáticas ou dipolares. A energia,  $E_{str}$ , devido a esse campo é dada por:

$$E_{str} = -\frac{1}{2} \int \mu_0 \vec{H}_D \cdot \vec{M} dV \quad (2.10)$$

A Equação 2.10 é bastante complicada de resolver para formatos arbitrários, entretanto em objetos que possuem alguma simetria, como ocorre com o elipsóide, esta equação se torna mais simples. Para um elipsóide,  $\vec{H}_D$  é constante e dado pela Equação 2.11, em que  $\hat{N}$  é o tensor desmagnetizante, que depende da relação de aspecto entre os eixos principais.

$$\vec{H}_D = \hat{N}\vec{M} \quad (2.11)$$

Com este resultado, para o elipsóide, a energia devido ao campo desmagnetizante é dada por:

$$E_{str} = \frac{1}{2} \mu_0 \vec{M} \hat{N} \vec{M} \quad (2.12)$$

Caso o elipsóide tenha seus eixos correspondendo aos eixos de um sistema coordenando,  $\hat{N}$  será um tensor diagonal, com traço 1. Para outras geometrias, cilíndricas e cúbicas, apesar do tensor ser diferente, poderá ser diagonalizado, graças à simetria [61].

Para um nanofio de Ni, a magnetização espontânea ocorre preferivelmente ao longo do eixo principal, e assim a anisotropia de forma domina as propriedades magnéticas do material.

Por conveniência, um nanofio isolado pode ser aproximado a um único elipsóide, de forma a descrever a anisotropia uniaxial em arranjos de nanofios de Ni em ordenamento hexagonal. Esta seria a base para um modelo fenomenológico que leva em conta as interações magnéticas dipolares e a anisotropia de forma em uma aproximação de campo médio [62]. Ao se assumir que a magnetização está saturada na direção do campo externo

e admitindo um elipsóide muito longo, é possível considerar que um nanofio cilíndrico tem como campo desmagnetizante:

$$\vec{H}_D = 2\pi\vec{M}, \quad (2.13)$$

De maneira mais geral, quando  $\vec{H}$  e  $\vec{M}_S$  formam um ângulo  $\theta$  com o eixo do nanofio, o campo desmagnetizante ao longo do direção perpendicular ao nanofio devido à anisotropia de forma é de acordo com a expressão seguinte:

$$H_D = 2\pi M_S \sin\theta \hat{u}_r, \quad \hat{u}_r: \text{vetor unitário de direção radial ao nanofio} \quad (2.14)$$

#### 2.1.4 Mecanismos de reversão de magnetização em nanofios

Motivados pela crescente aplicação tecnológica, em especial em armazenamento de dados, os mecanismos de reversão vêm sendo bastante discutidos [14]. São vários os parâmetros que contribuem para a magnetização de uma amostra. Como explanado anteriormente, a geometria, cristalinidade, interações dipolares, interações de troca e a temperatura são determinantes na energia livre do sistema. Além desses fatores, o campo externo dependendo de sua direção e intensidade, contribui de formas distintas no processo de magnetização. Diversos modos idealizados de reversão da magnetização, em nanofios, foram estudados e a influência da geometria foi identificada [7] [63]. Sendo os mecanismos de reversão mais conhecidos os de modo coerente e modo curling.

Para estudar esses modos, vários modelos foram propostos e dentre eles, proposto no final da década de 40, o modelo de Stoner-Wohlfarth [64] teve uma posição de destaque. Uma das aplicações é a dependência angular da coercividade no modo coerente. Neste modelo é considerado uma magnetização uniforme através do material resultante da interação de troca, mantendo assim todos os momentos paralelos entre si. O resultado é uma energia de troca fixa durante a reversão. Foi proposto também que o material seria formado por partículas não-interagentes, ou seja, toda a contribuição energética oriunda da interação dipolar no material seria ignorada. Nessa descrição apenas os termos energéticos advindos da anisotropia magnética e do campo externo seriam relevantes.

Ao considerar as partículas em monodomínio, na presença de um campo  $\vec{H}$  formando um ângulo  $\theta$  com a direção de eixo de magnetização uniaxial, a energia da partícula,  $\epsilon$ , é descrita pela Equação 2.15 de acordo com [65]:

$$\epsilon = K_1 V \sin^2(\phi - \theta) - \mu H \cos \phi \quad (2.15)$$

O vetor magnetização forma um ângulo  $\phi$  com a direção do campo, e portanto, estará em um ângulo  $\phi - \theta$  do eixo de fácil, como mostrado na Figura 6.  $V$  é o volume e  $\mu$  é o momento magnético da partícula.

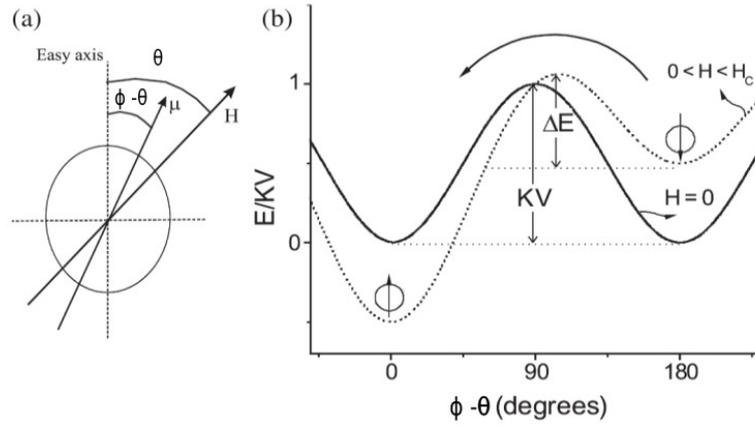


Figura 6 – Eixos e ângulos definidos para a partícula no modelo de Stoner-Wohlfarth (a); Relação entre a energia e o ângulo de magnetização para campo externo nulo (linha contínua) e para um valor de campo externo menor do que o campo coercitivo (linha tracejada)(b) [5]

Stoner e Wohlfarth trabalharam com a energia reduzida, na qual a definição de energia zero é diferente e o  $\sin^2$  é substituído pelo cosseno do dobro do ângulo  $\phi - \theta$ . A energia reduzida é descrita por:

$$\eta = \frac{\epsilon}{2K_1V} + const = -\frac{\cos 2(\phi - \theta)}{4} - h \cos \phi \quad (2.16)$$

$$h = \frac{M_s \vec{H}}{2K_1} \quad (2.17)$$

Para certos valores de  $\theta$  e  $h$ , a magnetização será direcionada nos valores de  $\phi$  que minimizem a energia. De tal forma que as condições de primeira derivada nula e segunda derivada positiva devem ser atendidas:

$$\frac{d\eta}{d\phi} = \sin 2(\phi - \theta) + 2h \sin \phi = 0, \quad (2.18)$$

$$\frac{d^2\eta}{d\phi^2} = \cos 2(\phi - \theta) + h \cos \phi > 0 \quad (2.19)$$

Para especificar apenas uma solução é necessário conhecer a história de  $h$  para cada valor de  $\theta$  (Figura 6). Uma solução em um estado de energia não pode simplesmente passar para o outro estado caso haja uma barreira de energia. Na Figura 7, são calculadas histereses para  $\theta = 0, 20^\circ, 45^\circ, 70^\circ$  e  $90^\circ$  de acordo com o modelo de S-W.

Para estudar partículas aleatoriamente orientadas, as curvas de histerese podem ser computadas para cada valor de  $\theta$  para diferentes grupos de partículas com distribuições aleatórias de eixos com fácil magnetização. E assim, muitas curvas experimentais puderam

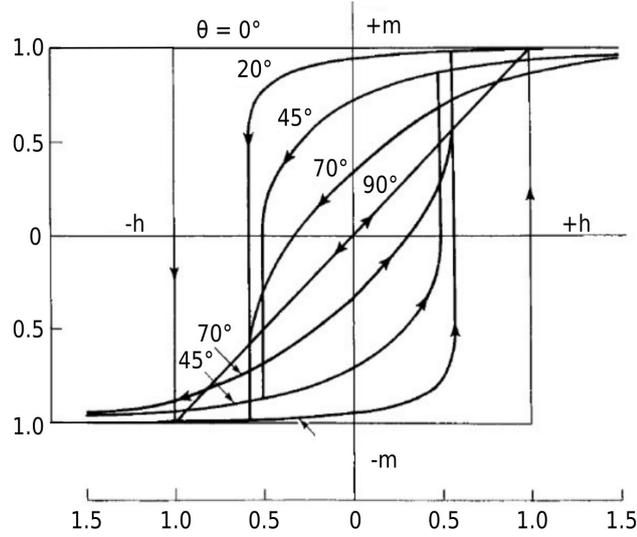


Figura 7 – Ciclos de histerese calculados usando o modelo de S-W para partículas com anisotropia uniaxial, em monodomínio.  $\theta$  é o ângulo entre o campo externo e o eixo uniaxial. [6]

ser analisadas de acordo com a teoria de S-W, que tem como principal vantagem a facilidade de adicionar recursos extras e fazer substituições em  $\theta$  convenientes com o material estudado.

Lavin et al. [8] propuseram um modelo analítico para investigar a dependência de  $H_c$  com  $\theta$ . Ao considerar variações na geometria do nanofio, apresentaram três diferentes modos de reversão idealizados. São eles o modo coerente, vortex e o modo transversal. A Figura 8 descreve as curvas de coercividade para os três modos. O último ocorre em fios finos com diâmetro inferior a 60 nm. Nesse modo os momentos se invertem progressivamente via propagação de uma parede de domínio transversal (Figura 8). Para o modo coerente, Stoner-Wohlfarth já havia proposto que o campo coercitivo,  $H_c$  se relacionava de acordo com a dependência angular da nucleação de acordo com a Equação 2.20.

$$\frac{H_n^C(\theta)}{M_s} = \frac{1 - 3N_z(L)}{2} \frac{\sqrt{1 - t^2 + t^4}}{1 + t^2} \quad (2.20)$$

Para o modo transversal, foi realizada uma adaptação do modelo S-W, onde é usada a largura da parede de domínio,  $w_T$ , ilustrada a direita na Figura 8, como o comprimento da região de rotação coerente. O campo de nucleação  $H_n^T$  é descrito na Equação 2.21. Para o modo coerente,  $L$  é o comprimento total do fio, entretanto para o modo transversal, a coercividade é praticamente independente de  $L$  [66]. Caso  $L > w_T$  a coercividade do modo coerente será maior que a do transversal e vice-versa.

$$\frac{H_n^T(\theta)}{M_s} = \frac{1 - 3N_z(w_T)}{2} \frac{\sqrt{1 - t^2 + t^4}}{1 + t^2} \quad (2.21)$$

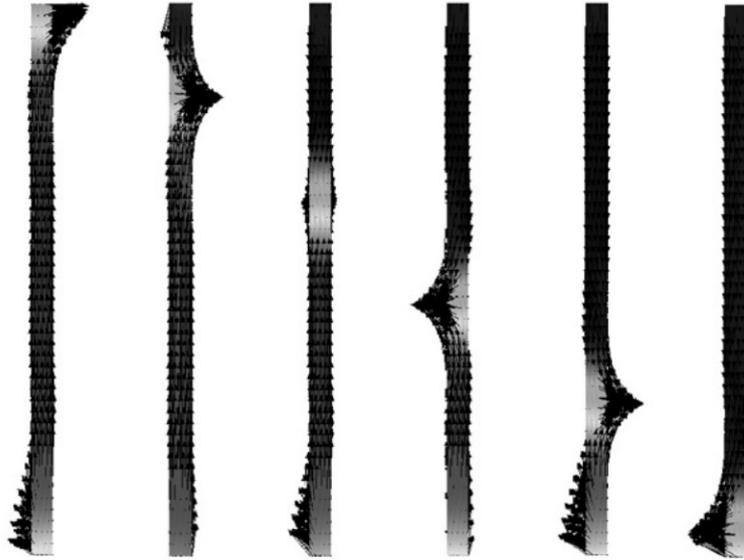


Figura 8 – Mecanismo de reversão por nucleação e propagação para um nanofio de 40 nm de diâmetro, 100 nm de distância entre os centros e comprimento 1  $\mu\text{m}$ . Realizado por simulação micromagnética utilizando discretização pelo método de elemento finito e o método de contorno. Da esquerda para direita há um ordenamento temporal crescente, com o mesmo passo.[7]

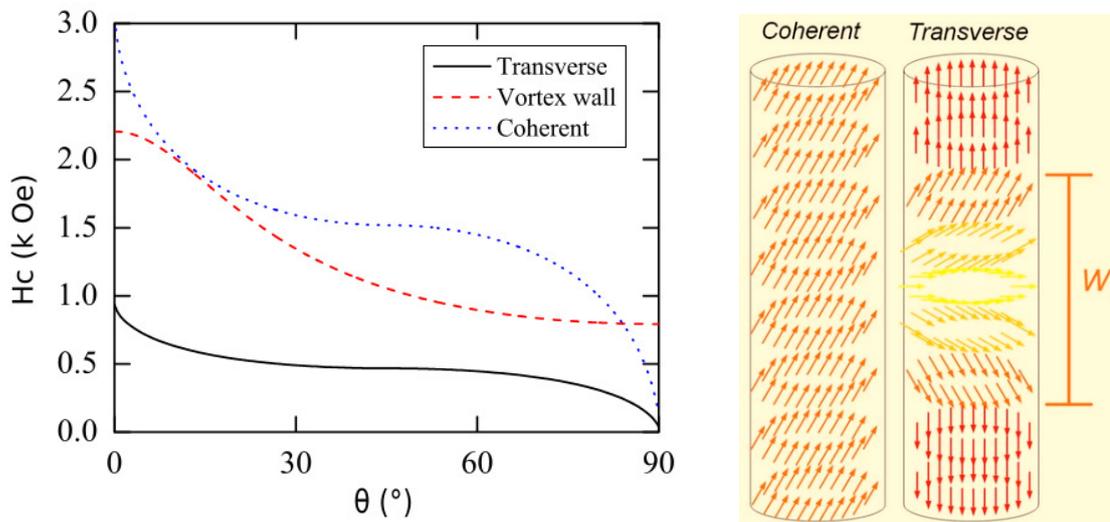


Figura 9 – Coercividade para diferentes ângulos de aplicação do campo externo para um nanofio de 50 nm de acordo com [8] à esquerda. Modos de reversão da magnetização em nanofios, por rotação coerente e modo transversal, a direita[8].

Já para o modo curling, uma expressão para o campo de nucleação de um elipsóide prolato e finito foi proposto de acordo com a expressão 2.22 [67].

$$\frac{H_n^V(\theta)}{M_s} = \frac{(N_z - \frac{q^2 l_{ext}^2}{R^2})(N_x - \frac{q^2 l_{ext}^2}{R^2})}{\sqrt{(N_z - \frac{q^2 l_{ext}^2}{R^2})^2 \sin^2 \theta_0 + (N_x - \frac{q^2 l_{ext}^2}{R^2})^2 \cos^2 \theta_0}} \quad (2.22)$$

Nas Equações 2.20, 2.21 e 2.22,  $H_n^C$ ,  $H_n^T$  e  $H_n^V$  são os campos de nucleação para os modos coerente, transverso e curling respectivamente.  $t = \tan \theta^{\frac{1}{3}}$ ,  $M_s$  é a magnetização de saturação,  $N$  é o tensor desmagnetizante ( $N_z$ , a componente  $z$ ),  $l_{\text{ext}}$  é o comprimento de troca e  $R$  é o raio.

Partindo das equações descritas acima, Lavin e colaboradores obtiveram uma relação da coercividade com o ângulo  $\theta$ . Para nanofios de 50 nm de diâmetro  $12 \mu\text{m}$  de comprimento, a dependência angular de  $H_c$  com  $\theta$  segue de acordo com a figura 8. A linha pontilhada representa o campo coercitivo quando a reversão é coerente, a tracejada é para quando a magnetização do fio se reverte por propagação de vortéx e para a reversão através do modo transverso têm-se a curva com linha cheia.

Geometrias com alguma simetria, como cilindros longos e filmes finos foram estudadas utilizando do modelo de Stoner-Wolffarth utilizando de aproximações para a magnetização. Mas devido ao modelo proposto por S-W não ter uma vasta aplicabilidade em problemas com nanofios reais, tendo suas previsões de histerese aplicáveis em sistemas bem específicos, por considerar que a magnetização é uniforme através do material e assim desconsiderar efeitos relevantes, outros modelos foram propostos. A teoria de Brown que leva em conta não apenas as energias de anisotropia e Zeeman como também a Energia de troca e a magnetostática. Esta teoria trata a magnetização como um vetor clássico, subdividindo o material em elementos diferenciais de volume  $dV$  maiores que as dimensões atômicas e muito menores que o tamanho da amostra. Dentro de cada  $dV$ , a magnetização é considerada como uma função uniforme e diferenciável da posição  $\vec{r}$ ,  $\vec{M}(r)$ . O modelo consiste na minimização da energia livre do sistema através de cálculo variacional levando a equações não lineares cuja solução descreve a magnetização em um estado de equilíbrio.

Devido às dificuldades na resolução das equações de Brown surge o conceito denominado de nucleação que possibilita a linearização de tais equações. O campo  $H_n$ , é denominado campo de nucleação apesar de nem sempre ocorrer nucleação próxima ao ponto, é definido como o ponto de instabilidade próximo ao estado de saturação [57]. Ou seja, para uma partícula submetida a um campo magnético capaz de saturá-la magneticamente, ao diminuir esse campo, o ponto onde a magnetização sai do estado de saturação é o ponto onde o campo magnético é chamado de campo de nucleação. Em campos de gravação magnética o termo mais usado é campo de comutação (switching field) [55] e será abordado dessa forma no capítulo de resultados.

A linearização das equações de Brown se dá ao se utilizar a componente da magnetização perpendicular à direção do campo, que após  $H_n$ , é não nula. Obtidas as autofunções que descrevem a fase inicial da reversão, resolver as equações se torna menos trabalhoso. Dentre as soluções obtidas, apenas a associada a o maior campo de nucleação terá significado físico [65]. A teoria de Brown além de prever o modo coerente proposto pelo modelo de Stoner-Wolffarth, também prevê outros modos de reversão, os modos curling e

buckling (Figura 10 [68]) .

O modo curling é uma solução comum quando se trata de elipsóides. Para a situação inicial de todos os momentos estarem alinhados na direção do fio, o processo de reversão desse modo se dá quando as projeções da magnetização no plano transversal se agrupam em forma de vórtice. Comparando com o modo coerente, a energia de troca é aumentada e a energia magnetostática diminui. A competição entre essas energias faz com que o sistema se revertam de um modo ou de outro; de tal forma que existe uma dimensão crítica denominada de diâmetro de coerência  $D_{coe}$ , dado pela Equação 2.23.  $D_{coe}$  determina que tipo de modo de reversão ocorrerá na amostra.

$$D_{coe} = 7.31 \sqrt{\frac{A}{4\pi} M_s^2}, \quad (2.23)$$

Para o Níquel,  $A = 8.6 \times 10^{-7} \text{ erg/cm}$  e  $D_{coe} = 40 \text{ nm}$  [34]. Para valores acima desse diâmetro de coerência a reversão é do tipo curling, abaixo do tipo coerente. Entretanto, quando o valor do diâmetro é próximo a  $D_{coe}$ , a direção de aplicação do campo passa a ter um papel determinante na reversão. Sendo do modo curling quando os ângulos de aplicação são pequenos, e do modo coerente para ângulos maiores [69].

Há também o modo de reversão buckling, presente em elipsóides prolatos [70]. Para este modo a reversão é encarada como uma combinação entre os modos coerente e curling. Olhando para os planos perpendiculares ao eixo do fio a magnetização se reverteria de forma coerente. Enquanto que observando através do eixo do fio, a magnetização variaria sua amplitude de forma sinusoidal (Figura 10).

Vários foram os modelos propostos para explicar os mecanismos de reversão. O modelo de Stoner-Wohlfarth [64] de uma forma geral é utilizado quando a reversão é coerente. Para o modo curling, Aharoni [67] calculou como o campo de nucleação variava de acordo com o ângulo. Lavín et al [8], apresentaram adaptações do modelo de S-W para explicar outros modos de reversão nos nanofios de Ni. Porém, estes modelos ainda apresentam falhas, há um distanciamento significativo quando comparados aos resultados experimentais e os modelos ainda carecem de explicações sobre a influência da anisotropia e das propriedades estruturais dos nanofios na reversão da magnetização [13].

Neste trabalho, os nanofios serão de 40 nm de diâmetro, como será visto em mais detalhes no capítulo de Metodologia. Para esse diâmetro, Hertel através de simulações micromagnéticas, verificou que as reversões da magnetização em nanofios de Ni ocorreram por nucleação e propagação em sequência (Figura 8). As paredes de domínio são geradas nas extremidades e em seguida propagadas

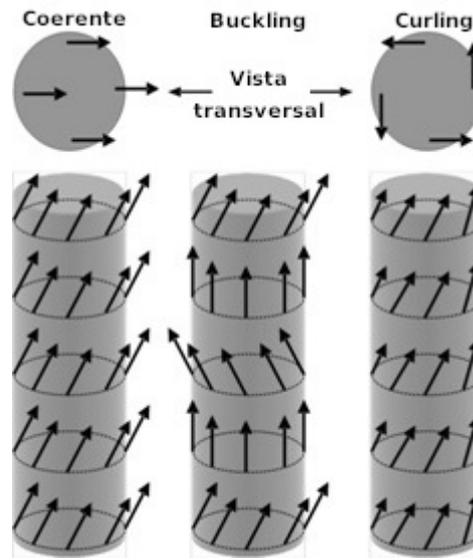


Figura 10 – Esquema para os modos de reversão coerente, buckling e curling. As setas representam os momentos. É possível verificar as diferenças entre os modos observando a visão do transversal. O modo buckling não foi representado mas em secções transversais ele possui modos de magnetização que se assemelham ao modo coerente [9].

## 2.2 APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO, MODELO DE CADEIA DE ELIPSÓIDES E INTERAÇÃO DIPOLAR ENTRE FIOS NUM ARRANJO

Nos trabalhos de Skomski et al [71] [72], o comportamento magnético de nanofios ferromagnéticos é justificado por uma idéia de inversão de magnetização que teria origem em modos localizados. A justificativa para o surgimento dessas regiões se baseia na existência de irregularidades na estrutura real dos nanofios. A seguir, G.C. Han e colaboradores [38] propuseram uma expressão para o campo de anisotropia (também chamado de campo efetivo), ao estudar a coercividade em termos do ângulo em que o campo externo era aplicado. Na Equação(2.24) a idéia de que a reversão ocorre pelo modo curling é mantida.  $R$  é o raio dos nanofios,  $d$  é a distância entre os fios e  $L$  é o comprimento. Quando, nesta expressão, os fios são muito longos, os valores do campo de anisotropia se tornam cada vez mais negativos contradizendo medidas já realizadas em experimentos [73].

$$H_A = 2\pi M_s - 6, 3\pi \frac{R^2 L}{d^3} \quad (2.24)$$

U. Netzelmann [74] ao estudar campo de anisotropia em fitas de gravação magnética, propôs uma densidade de energia,  $f_{dip}$ , dada pela Equação 2.25, que descreveria as interações dipolares do sistema. Sendo  $p$  o empacotamento volumétrico das partículas nas fitas de gravação,  $\hat{N}^t$  e  $\hat{N}$ , tensores que descrevem os fatores desmagnetizantes da amostra como um todo e das partículas individuais respectivamente.

$$f_{dip} = \frac{1}{2}(1 - p)\vec{M}\hat{N}\vec{M} + \frac{1}{2}p\vec{M}\hat{N}^t\vec{M} \quad (2.25)$$

A partir dessa densidade de energia, quando se analisa a expressão 2.25 para um sistema composto de um arranjo extenso de fios e se admite que o sistema está na saturação, é possível reescrever a energia de interação dipolar, de forma a obter uma expressão de um sistema com anisotropia uniaxial. Considerando apenas o termo com dependência angular [73]:

$$f_{dip} = \frac{H_A M_S}{2} \sin^2 \theta \quad (2.26)$$

Com o objetivo de realizar um estudo sobre a influência do fator de empacotamento  $P$  nas propriedades magnéticas de arranjos, Encinas-Oropesa et al [19], realizaram um estudo experimental analisando quanto o fator de empacotamento,  $P$ , afeta as propriedades magnéticas de arranjos de nanofios de níquel. De acordo com o modelo por eles proposto, o campo de anisotropia  $H_A$ , é descrito pelas contribuições que advêm da:

1. Magnetização ao longo dos fios devido à forma individual de cada fio
2. Forma da amostra
3. Interação entre os fios

Dessa forma  $H_A$  é descrito por:

$$H_A = 2\pi M_S - 2\pi P M_S - 4\pi P M_S = 2\pi M_S(1 - 3P) \quad (2.27)$$

Onde  $P = \frac{2\pi R^2}{\sqrt{3}d^2}$  é o empacotamento volumétrico de fios em um arranjo hexagonal. Para a Equação 2.27 no limite em que  $P \rightarrow 0$ , se obtem  $H_A = 2\pi M_S$  (limite de fios isolados), e  $H_A = -4\pi M_S$  no limite de filme contínuo  $P \rightarrow 1$ . Sendo  $P = 1/3$  um valor crítico, acima do qual a magnetização é perpendicular ao fio, abaixo do qual a magnetização é na direção do fio e quando  $P = 1/3$ , a anisotropia é eliminada implicando em um comportamento isotrópico [75].

### 2.3 EQUAÇÃO DE LANDAU-LIFSHITZ-GILBERT, LLG

A equação de movimento de magnetização,  $\vec{M}$ , em presença de um campo externo,  $\vec{H}$ , é determinada pelo fato que eletrons também possuem momento angular, na mesma direção que seus momentos magnéticos [55]. Uma equação de movimento, sem considerar termos de amortecimento, onde  $\gamma$  é a razão girométrica, é dada por:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma \vec{M} \times \vec{H} \quad (2.28)$$

A equação de Landau-Lifshitz (LL, Equação 2.28) é uma equação não linear e descreve a dinâmica da magnetização de ferromagnetos, filamentos de vórtex, etc [76]. A

Equação 2.28 é local e permite estudos de diversos fenômenos: estruturas dinâmicas como ondas de spin, funções de ondas elípticas, sólitons, vórtices, caos, entre outros. Por isso, é utilizada no micromagnetismo na descrição da dinâmica de magnetização.

A equação de LL possui conexões com equações integráveis de sóliton, incluindo a equação não linear de Schrodinger e as equações de sine-Gordon. A priori, Landau e Lifshitz propuseram uma equação dinâmica de magnetização de spin baseada fenomenologicamente, que inclui interações tais como anisotropia magnetocristalina, campo magnético aplicado, campo de desmagnetização, troca biquadrática e outras interações fracas que influenciam as estruturas magnéticas. Entretanto, baseado na formulação de Lagrange, Gilbert introduziu uma forma mais convincente para este termo [76].

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma[\vec{M} \times [\vec{H}_{eff} - \frac{\alpha}{\gamma M_s} \frac{d\vec{M}}{dt}]] \quad (2.29)$$

$\vec{M}$  é a magnetização,  $\vec{H}_{eff}$  é o campo magnético efetivo,  $\vec{M}_s$  é a magnetização de saturação,  $\gamma$  é a razão giromagnética e  $\alpha$  é o parâmetro fenomenológico de amortecimento. O primeiro termo leva a magnetização a precessionar ao redor do campo efetivo, formando um ângulo de precessão constante. O segundo termo, puramente fenomenológico, induz a magnetização a se mover na direção do campo efetivo, sendo dissipativo. A composição desses torques faz com que  $\vec{M}$  convirja para  $\vec{H}$  ao longo de um espiral não planar. O processo de amortecimento leva a magnetização para o estado de energia mínima. A equação de Landau-Lifshitz pode ser usada apenas para pequenos amortecimentos. No ano de 1955 Gilbert, notou que para amortecimentos muito grandes, o termo de amortecimento se tornava maior que o torque  $\vec{M} \times \vec{H}$  e a magnetização não se moveria na direção do torque [77]. Ele propôs, então, que o amortecimento dependia da taxa de variação da magnetização com o tempo. Sendo  $\alpha$  um parâmetro de amortecimento de Gilbert, que quando  $\alpha \ll 1$ , caso de pequenos amortecimentos, a equação LLG se reduz à forma mais simples de Landau e Lifshitz.

## 2.4 NMAG NA SOLUÇÃO NUMÉRICA DO MICROMAGNETISMO

No estudo micromagnético se faz necessário resolver equações diferenciais parciais, que descreve a dinâmica do magnetização dos sistemas magnéticos. Resolver analiticamente tais equações se torna complexo, por isso o uso de métodos numéricos se tornou uma saída viável para a solução desses problemas. Códigos abertos e simuladores comerciais são ferramentas usadas para o estudo micromagnético.

Os métodos mais utilizados para discretizar estruturas são o método de elementos finitos (FEM) e o método de diferenças finitas (FDM). Ambos integram o conjunto acoplado de equações diferenciais ou subdividindo a geometria em pequenos tetraedros, para o método de elemento finito, ou subdividindo em cubóides, para o método FDM [78].

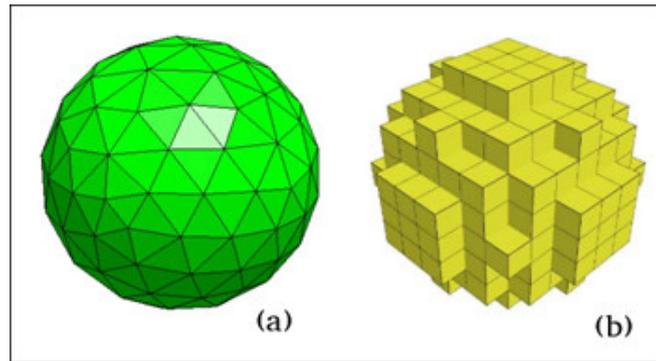


Figura 11 – (a) Esfera discretizada pelo método de elementos finitos, utilizando o Netgen; (b) Esfera discretizada pelo método de diferenças finitas [10]

O método de diferenças finitas discretiza a função de referência nos pontos da malha, substituindo as derivadas espaciais por diferenças finitas entre os pontos do malhado. Grande parte dos simuladores baseados em FDM se utilizam de um malhado regular para discretizar a amostra. Ou seja, as células desse malhado são idênticas. Isso permite que os métodos de convolução aplicados sejam mais rápidos.

O método de elementos finitos discretiza a estrutura em uma malha composta por tetraedros que formam uma estrutura de discretização complexa composta por elementos de vários tamanhos. Sendo assim, o FEM é ideal para geometrias curvas e complicadas. Pois o método anterior traria muitos erros de borda.

A Figura 11 demonstra as diferenças de discretização entre os métodos de elemento finito e diferença finita. Para o segundo, caso a discretização seja grosseira, a esfera não será bem representada, fazendo com que a influência da anisotropia de forma na magnetização afete os resultados de forma indesejada [10].

Os simuladores que discretizam a amostra pelo método FDM, como é o caso do OMMF [79] e o MuMax3 [80], são, em geral, mais rápidos que os que utilizam do método FEM pois utilizam de métodos de convolução mais velozes no cálculo da desmagnetização. No caso especial do MuMax3 a simulação leva um tempo ainda mais curto por utilizar o GPU no processo da simulação. Assim sendo, na escolha do simulador apropriado para o estudo é imprescindível levar em conta a precisão desejada e o tempo de simulação, bem como os requisitos do sistema computacional.

Neste trabalho, foi utilizado o Nmag que utiliza o método de elemento finito juntamente com o método de elemento de borda [81]. Isto tornaria a ferramenta ideal para as formas escolhidas, que serão discutidas em detalhes no capítulo seguinte. O Nmag é um pacote de simulação, gratuito, desenvolvido pela University of Southampton e lançado em 2007, baseado na linguagem Python [82]. Usado por diversos trabalhos com nanofios estudando os mecanismos de reversão, interações dipolares, coercividade, etc [83][84][85][86].

### 3 METODOLOGIA E APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA

#### 3.1 GEOMETRIA DOS ARRANJOS DE NANOFIOS E FORMA DOS CRISTAIS QUE OS COMPÕEM

As discussões à respeito dos modos de reversão, bem como a observação das imagens por TEM da forma real de nanofios, conduziram os pesquisadores a considerar que o formato real do nanofio influencia as propriedades magnéticas do material. Já que modos de reversão curling, buckling e coerente não explicam amplamente os resultados experimentais, surgiu a proposta da existência de modos localizados que ocorreriam graças à existência de inhomogeneidades na estrutura dos nanofios, causando assim perturbações do material.[71]

E. P. Hernández e colaboradores [87] propuseram uma forma alternativa de expressar a energia livre em nanofios policristalinos, utilizando uma cadeia de elipsóides para explicar as interações dipolares ao longo do arranjo hexagonal. Com o objetivo de analisar a geometria dos nanofios e como as propriedades magnéticas do material são afetadas por esta contribuição energética, outros trabalhos foram publicados em nosso laboratório e serão comentados logo a seguir.

Em [11] e [3] foram produzidos nanofios com um formato que semelhante a uma cadeia de elipsóides. Os nanofios produzidos por G.P. Fuentes et al, em membranas de AAO de 25 nm de diâmetro e 42 nm de distância de centro a centro, possuíam um comprimento médio de 600 nm. O formato do nanofio, que se assemelha à cadeia de elipsóides, devido à presença de nitratos usados como precursores na eletrodeposição do níquel, possuía uma relação 2:1 no que diz respeito aos comprimentos de eixo principal e diâmetro do elipsóide (Figura 12 a e b).

Outro formato foi observado na produção de nanofios por C.A. França e colaboradores (Figura 12 c). No mesmo trabalho, um modelo geométrico (Figura 12 d) composto por uma cadeia de cuboctaedros foi proposto para representar o material em simulação micromagnética, obtendo uma boa correspondência entre as curvas simuladas e experimentais. A eletrodeposição do Ni foi realizada em poros de 40 nm de diâmetro e 100 nm de separação entre os fios, enquanto na simulação os nanofios distaram 70 nm (de centro a centro) e eram compostos de cuboctaedros que mediam 30 nm, orientados aleatoriamente [4]. (Ver Figura 12 d)

Das simulações micromagnéticas, para estudar a magnetização da amostra, pode-se usar de um modo geral, sistemas com uma grande quantidade de nanofios, ou sistemas com um fio isolado [88] [89] [90]. A maioria dos trabalhos sobre modos de reversão foram baseados em geometria cilíndrica, de forma que os nanofios ideais são aqueles cuja geometria pode ser tratada como um cilindro infinito. Para essas situações, a discussão da reversão dos

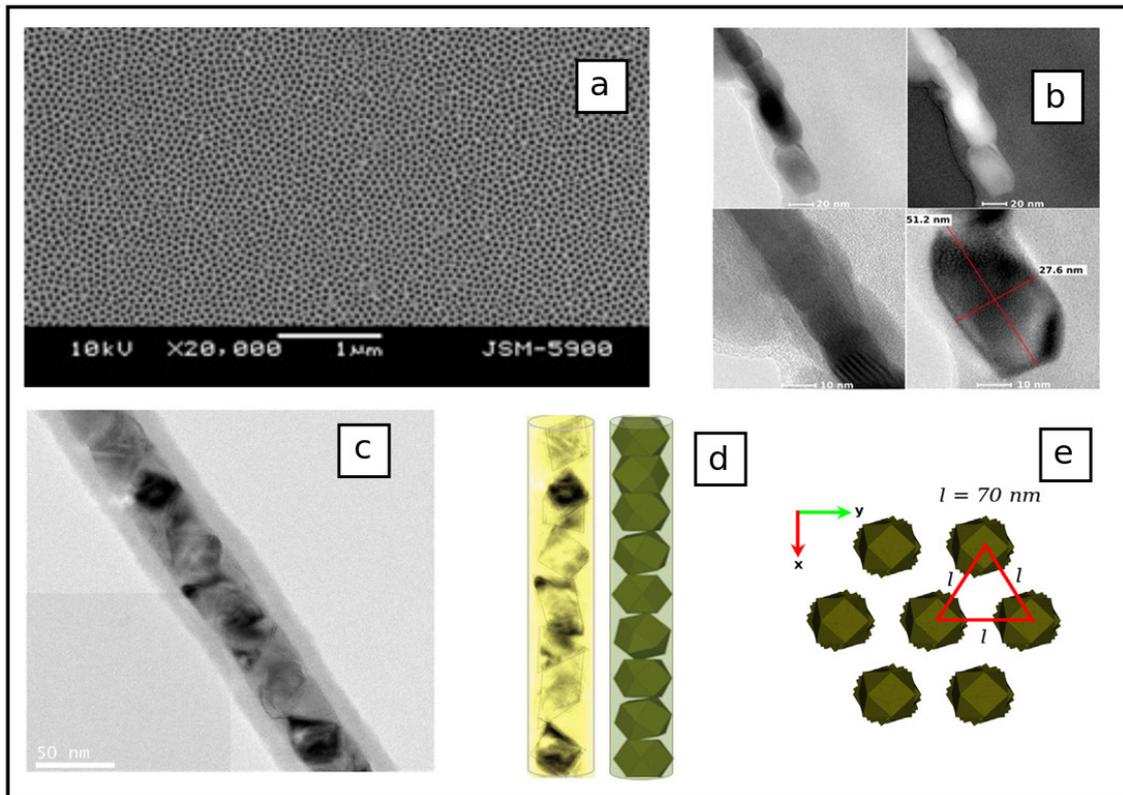


Figura 12 – (a) Membranas de AAO produzidas em nosso laboratório [11]; (b) Imagem de nanofios de Níquel, produzida por TEM, mostrando cristais com formato semelhante a uma cadeia de elipsóides [11]; (c) Imagem de nanofios de Ni, produzida por TEM, com irregularidades que foram interpretadas como uma cadeia de cuboctaedros [4]; (d) Formato do nanofio real à esquerda, formato do nanofio representado em simulação computacional à direita [4]; (e) Ordenamento do arranjo da simulação micromagnética [4]

momentos pode ser feita utilizando de conceitos bem difundidos como a rotação coerente e o modo curling [71]. Hertel em [12] investigou a reversão em nanofios de Ni utilizando simulação micromagnética para um arranjo de fios com diâmetro 40 nm, comprimento de 1  $\mu\text{m}$  e período de 100 nm. Quando o campo era aplicado na direção do eixo do fio, o mecanismo de reversão se dava através de propagação de nucleação iniciada pelas extremidades dos fios.

Outros trabalhos, consideram o modelo idealizado do nanofio representado por um único elipsóide. Para essa situação são considerados dois modos de reversão: rotação coerente e curling. Sendo o diâmetro crítico 40 nm para o Ni [34] [91].

Os trabalhos apresentados neste capítulo justificam as escolhas das microestruturas dos nanofios no presente trabalho. Foram estudadas cinco geometrias, partindo do formato cilíndrico, que foi bastante utilizado na literatura, passando pelo modelo teórico ideal de nanofios representados por um único elipsóide, estudando também o modelo de uma cadeia de elipsóides e a relação com nanofios produzidos com geometria equivalente. E por fim a

geometria observada por Cláudio França, que também será representada por uma cadeia de cuboctaedros.

Neste trabalho, os nanofios de Níquel dos arranjos foram dispostos em um ordenamento hexagonal e posicionados a uma distância entre os centros de 50 nm (Figura 9). Embora a distância entre os centros e o diâmetro máximo do nanofio tenham sido representados apenas para o primeiro arranjo (Figura 9 a), essa geometria foi obedecida para os demais. Cada arranjo possuía um total de sete nanofios, um localizado no centro e os outros seis localizados nos vértices de um hexágono regular. Os arranjos foram posicionados de forma que o eixo principal dos fios correspondesse ao eixo  $x$ , o campo externo  $\vec{H}$  fosse aplicado no plano  $z = 0$ , e fizesse um ângulo  $\theta$  com o eixo  $x$  (Figura 10).

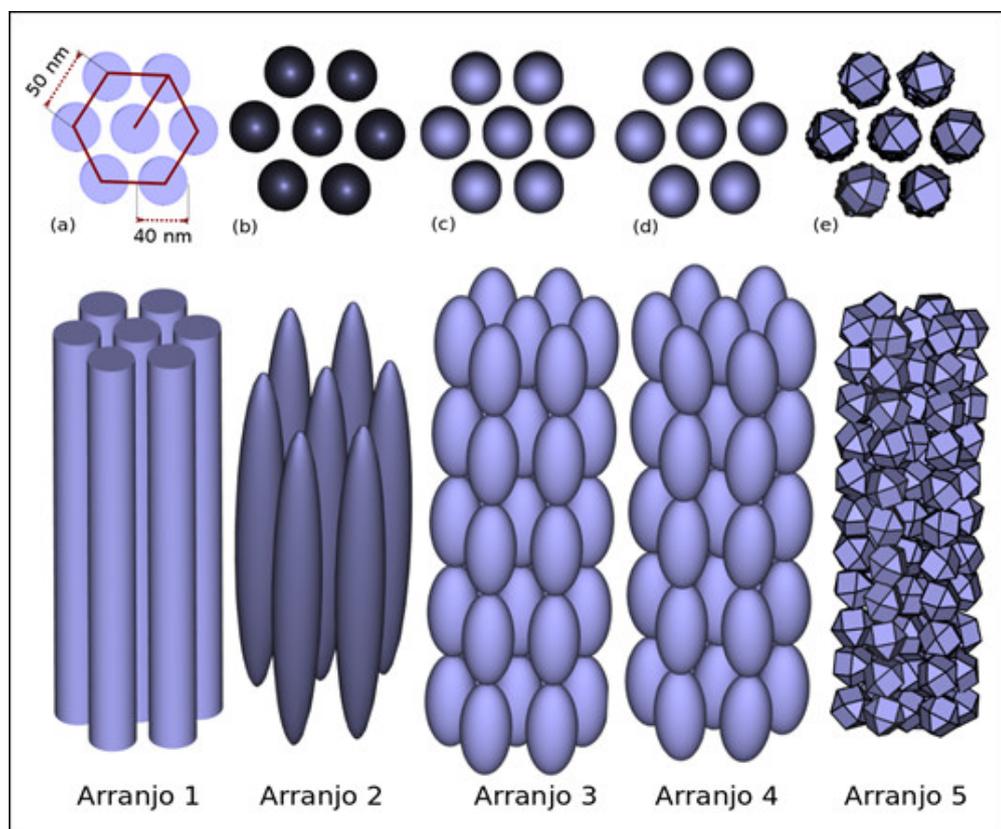


Figura 13 – Vista superior das geometrias estudadas. Com todos os nanofios de diâmetro 40 nm e distando de 50 nm entre os centros, dispostos em arranjo hexagonal, como representado no arranjo cilíndrico (a); arranjo com um elipsóide (b); arranjo com elipsóides em cadeia alinhada (c); arranjo com cadeia de elipsóides com orientação aleatória em relação ao eixo do nanofio (d); cadeia de cuboctaedros (e). Abaixo, os arranjos com vista tridimensional e suas respectivas nomenclaturas. Para os fios em formato cilíndrico (Arranjo 1); Elipsoidal (Arranjo 2); Cadeia de elipsóides alinhados (Arranjo 3); Cadeia de elipsóides com deflexão no ângulo entre o eixo do elipsóide e o do fio (Arranjo 4); Cadeia de cuboctaedros (Arranjo 5)

Para simplificar a leitura, cada arranjo foi nomeado como segue na Figura 13. E uma análise mais detalhada da geometria dos nanofios, observando um nanofio isolado

de cada arranjo, pode ser vista na Figura 14. Os nanofios do Arranjo 1 eram cilíndricos com raio de 40 nm e comprimento de 350 nm (a). O Arranjo 2 foi constituído de nanofios representados por elipsóides de semieixo transversal ao fio com valor de 40 nm e de 350 nm de comprimento ao longo do fio (b). O Arranjo 3 foi composto por cinco elipsóides alinhados em cada nanofio, cada elipsóide possui 40 nm de semieixo transversal e 80 nm de comprimento ao longo do fio (c). No Arranjo 4, foram feitas pequenas alterações na angulação entre o eixo ao longo do fio e o eixo principal dos elipsóides (d), de forma que o valor do ângulo  $\alpha$ , descrito em (f), não ultrapassasse  $5^\circ$ . Por fim, no Arranjo 5 os nanofios foram constituídos de cuboctaedros com diâmetro médio de 40 nm dispostos com angulações aleatórias e totalizando um comprimento total de aproximadamente 350 nm (e).

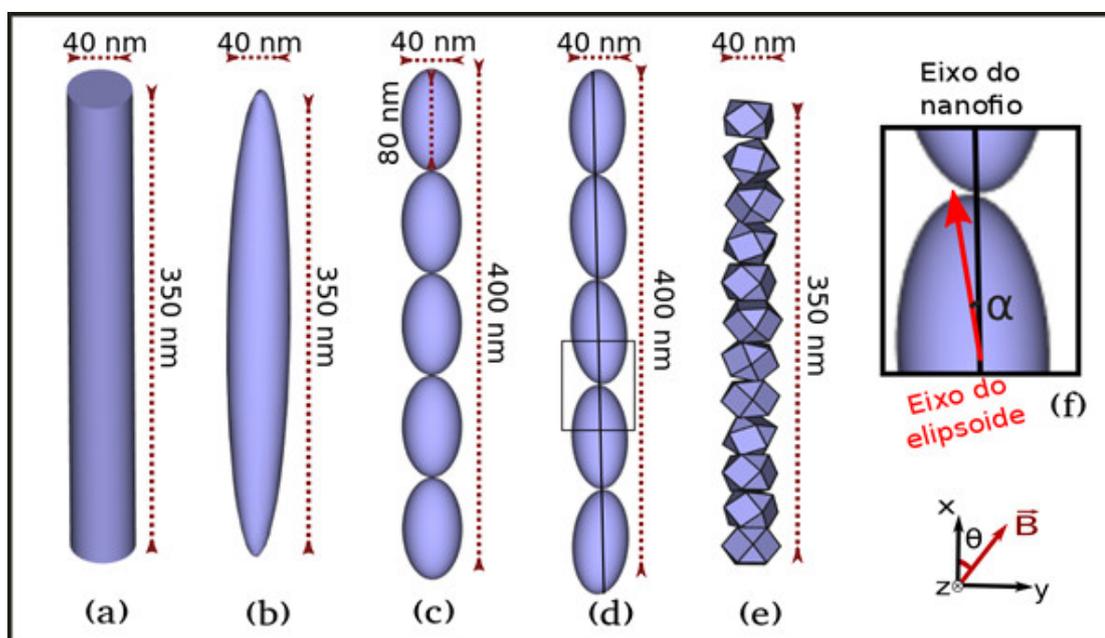


Figura 14 – Nesta imagem cada arranjo foi representado por apenas um nanofio: Arranjo 1, composto por cilindros de comprimento 350 nm; Arranjo 2, um único elipsóide de comprimento 350 nm; Arranjo 3, composto por uma cadeia de elipsóides alinhados, cada um com o comprimento de 80 nm totalizando o comprimento de 400 nm do nanofio; Arranjo 4, cadeia de elipsóides com pequenas deflexões entre o eixo do fio e o do elipsóide, comprimento de 80 nm para cada elipsóide e aproximadamente de 400 nm para o nanofio; Arranjo 5, composto por cuboctaedros de 40 nm de diâmetro médio e comprimento total do nanofio de 350 nm

Toda a geometria foi gerada usando o FreeCad, programa de código aberto desenvolvido para modelar objetos tridimensionais que possibilita a criação de estruturas complexas, como os Arranjos 3, 4 e 5. Criadas as geometrias, foi possível carregá-las no Netgen e gerar o malhado, que é a base para discretizar as equações que descrevem a magnetização.

### 3.2 GERAÇÃO DO MALHADO E CONDIÇÕES PARA REALIZAR A SIMULAÇÃO MICROMAGNÉTICA

O gerador de malha utilizado para a criação do malhado foi o Netgen, que é de código aberto e se utiliza de métodos de elementos finitos. O programa tem uma interface gráfica do usuário e uma biblioteca em C++, para se conectar a outras aplicações [92]. Nele é possível variar parâmetros do tamanho do malhado que minimizem o comprimento da aresta a um valor menor que o comprimento de troca, entretanto grande o suficiente para não sobrecarregar a memória dos computadores utilizados. Esse comprimento é definido por  $l_{ext} = \left( \frac{2A}{\mu_0 M_s^2} \right)^{1/2}$ , para o Ni é de aproximadamente 7.72nm, onde os parâmetros magnéticos do Ni são:  $A = 9 \cdot 10^{-11}$  J/m,  $M_s = 4.9 \cdot 10^5$  A/m [4].

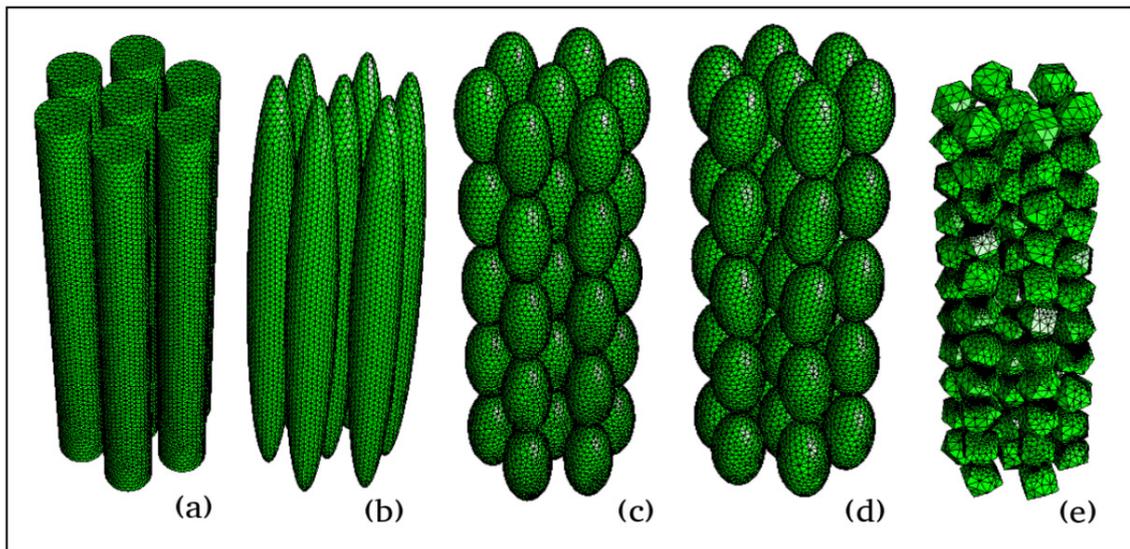


Figura 15 – Malhado gerado no Netgen para as geometrias: a) Arranjo 1; b) Arranjo 2; c) Arranjo 3; d) Arranjo 4; e) Arranjo 5

Para cada arranjo foi gerado um único malhado que foi utilizado durante toda a simulação, o comprimento médio das arestas para cada arranjo e a memória necessária para realização da simulação está descrita da Tabela 1 e o malhado pode ser visualizado na Figura 15. Para realizar a simulação foi utilizado o *Nmag*, que é uma parte do pacote *Nsim* voltada para o micromagnetismo e é considerado como o mais evoluído em termos de otimização de funcionalidade e velocidade. O pacote *Nsim* tem como características a facilidade de uso, a descrição de problemas independentes, a estrutura multifísica e paralelização [93]. Diante desses atributos, e por permitir a extração de dados que possibilitam o estudo das propriedades magnéticas dos materiais, tais como a histerese, energia de anisotropia, campo desmagnetizante e mapas de momentos. As simulações que serão apresentadas neste trabalho foram realizadas utilizando este pacote, por meio de quatro computadores com as características: 5,8 GB, Intel® Core™ i5-2310 CPU @ 2.90GHz × 4 ; 5,5 GiB Intel® Core™ i7-3770 CPU @ 3.40GHz × 8; 3,7 GiB Intel® Core™ i5-3330S CPU @

Tabela 1 – Relação do malhado, para cada arranjo, com a memória necessária para a simulação

	<i>Arranjo 1</i>	<i>Arranjo 2</i>	Arranjo 3	Arranjo 4	Arranjo 5
Comprimento médio da aresta dos tetraedros	6.09 nm	6.9 nm	5.44 nm	5.7 nm	6.88 nm
Memória necessária	1952 MB	2058 MB	2327 MB	2525 MB	986MB

2.70GHz  $\times$  4; 8 Gb de RAM e processador Intel® Core™ i5-7200U CPU @ 2.50GHz  $\times$  4. O terceiro, usado apenas para as simulações do Arranjo 1, 2 e 5 que requeriam de menos memória.

A magnetização inicial dos nanofios foi estabelecida na direção do eixo dos fios. Em cada ciclo gerado, o ângulo de aplicação do campo externo foi previamente fixado para um ângulo de valor  $\theta$ , entre o campo e o eixo dos fios, que assumiu valores de  $0^\circ$ ,  $5^\circ$ ,  $10^\circ$ , ... ,  $85^\circ$  e  $90^\circ$ . Em cada simulação o campo externo foi variado de forma que o campo inicial era o campo máximo,  $H_{\max} = 0,7$  MA/m, e foi decrescido em passos de 0,01 MA/m até que o valor de campo mínimo,  $H_{\min} = -0,7$  MA/m, fosse atingido. Após esse procedimento, o valor do campo foi aumentado até que  $H_{\max}$  fosse atingido novamente. Esse valor foi suficiente para saturar todos os ciclos dos cinco arranjos estudados.

A Figura 16, apresenta o código utilizado para o Arranjo 2. Além da escolha do módulo e direção do campo externo, da direção inicial da magnetização do material, também são inseridos valores de grandezas próprias do Níquel, como a magnetização de saturação e a constante de troca. O programa também permite considerar a anisotropia cristalina, entretanto aqui consideramos o nanofio como policristalino. Nas primeiras linhas são importados módulos, pacotes do *Nmag*, e o módulo *math*. Logo em seguida, na linha 6 é criado o objeto de simulação, que irá conter e promover informações a respeito do sistema físico. As informações do material são inseridas na linha 9, na qual definiu-se o nome do material para "Ni",  $M_s = 0.49 \cdot 10^6$  A/m e  $A = 10 \cdot 10^6$  A/m de acordo com [94]. Na linha 14, utilizando o comando *sim.load\_mesh*, é carregado o arquivo de malha gerado pelo netgen (para esse arranjo, "*MalhaA2.nmesh.h5*") e associado a cada elipsóide do arranjo o tipo de material correspondente. O comando *sim.set\_m* determina qual é a magnetização inicial, *m* descreve a direção de magnetização como um campo de vetores normalizados,  $|m| = 1$ , enquanto que *M* contém também a magnitude da magnetização. Entre as linhas 22 e 24 são determinados a direção, os valores máximo e mínimo e o passo do campo externo. Sendo a direção do ângulo determinada em  $[0.7071, 0.7071, 0]$ , nessa simulação específica, a seguir é inserida uma lista de magnitudes dos campos e a unidade de um multiplicador que define a dimensão física dos campos aplicados. O parâmetro *save* é usado para informar ao comando de histerese quais dados salvar e com que frequência (linha 28). Quando escrito dessa forma, é solicitado que os campos e os dados de reinicialização sejam salvos no ponto do tempo em que a convergência é alcançada. O Nmag dispõe de

```

1 import nmag
2 from nmag import SI, at
3 import math as m
4
5 #create simulation object
6 sim = nmag.Simulation()
7
8 # define magnetic material
9 Ni = nmag.MagMaterial(name="Ni",
10                      Ms = SI(0.49e6, "A/m"),
11                      exchange_coupling = SI(9e-12, "J/m"))
12
13 # load mesh
14 sim.load_mesh("MalhaA2.nmesh.h5", [("elipsoide1", Ni), ("elipsoide2", Ni), ("elipsoide3", Ni),
15 ("elipsoide4", Ni), ("elipsoide5", Ni), ("elipsoide6", Ni), ("elipsoide7", Ni)], unit_length = SI(1e-9, "m"))
16
17 # set initial magnetisation
18
19 sim.set_m([0.1,0,0])
20
21 # set external field
22 Hs = nmag.vector_set(direction=[0.7071, 0.7071, 0],
23                      norm_list=[ 0.70, 0.69, [], -0.70,
24                                -0.69, -0.68, [], 0.70],
25                      units=1e6*SI('A/m'))
26
27
28 sim.hysteresis(Hs, save=[('restart', 'fields', at('convergence'))])

```

Figura 16 – Script do Arranjo 2, 7 nanofios em formato de elipsóides, para  $\theta = 45^\circ$

outros comandos que podem ser encontrados em [95].

A execução do programa pode ser realizada em computadores comuns como os utilizados neste estudo. A duração das simulações variou de acordo com o arranjo e angulação do campo externo, levando em média 10 h. O Arranjo 5 apresentou problemas de convergência para praticamente todos os ângulos e foi necessário introduzir no programa um critério que aumentava a tolerância da variação  $\frac{dm}{dt}$ . Aumentar esse valor diminui a precisão e há uma flutuação maior dessa taxa. Entretanto, é possível fazer um teste utilizando o próprio *Nmag* para verificar se a diferença entre o ângulo de dois vetores de magnetização vizinhos é pequeno o bastante para que as medidas ainda sejam confiáveis. Trabalhando próximo ao limite desse valor, foi possível simular o Arranjo 5 com exceção dos ângulos  $70^\circ$  e  $80^\circ$  por não convergirem nessas situações.

Os valores de magnetização fornecidos pelo programa geram uma curva  $M_H \cdot H$  em que a magnetização não está projetada na direção do campo. O *Nmag* fornece valores de  $M_x$ ,  $M_y$ ,  $M_z$ ,  $H_x$ ,  $H_y$  e  $H_z$ . Após obter esses dados foi realizada uma projeção multiplicando

cada uma das componentes de  $M$  e  $H$  pelos cossenos diretores respectivos do ângulo de aplicação do campo. Além de calcular o módulo de  $H$  foi realizada uma conversão de A/m para Oe. Possibilitando a comparação com medidas experimentais de outros estudos.

## 4 RESULTADOS

Tendo em conta que parâmetros geométricos do nanofio, sejam eles o diâmetro e o comprimento dos nanofios, a distância que os separa e a forma afetam as propriedades magnéticas dos arranjos. O objetivo desse capítulo é expor como as propriedades magnéticas obtidas do ciclo de histerese, as das relações da coercividade e da magnetização remanente com o ângulo  $\theta$  que foram obtidos neste trabalho e comparar com trabalhos com situações físicas semelhantes a cada um dos arranjos.

Os dados obtidos através da simulação micromagnética serão apresentados neste capítulo de forma que para a histerese apenas os valores de  $\theta = 0$ ,  $30^\circ$ ,  $60^\circ$  e  $90^\circ$  serão apresentados. Em seguida a relação da magnetização remanente, do campo coercitivo e campo de comutação com  $\theta$  será estudada.

### 4.1 CURVAS DE MAGNETIZAÇÃO EM FUNÇÃO DO ÂNGULO, $\theta$

#### 4.1.1 Arranjo de Cilindros - Arranjo 1

Para o Arranjo 1, composto por sete cilindros de raio 40 nm e comprimento 350 nm. Tem-se, na Figura 17, de forma geral, um estreitamento no laço à medida que o ângulo é aumentando. Para  $\theta$  nulo, o ciclo apresenta um aspecto retângular, enquanto que a partir do ângulo de  $30^\circ$  já é possível observar um decaimento de magnetização menos abrupto em  $H_c$ . É possível verificar também, que para casos em que o campo externo foi aplicado ao longo do eixo dos cilindros e para valores pequenos de  $\theta$ , a saturação foi atingida para intensidades de campo  $\vec{H}$  menores. Isto é esperado para sistemas com anisotropia uniaxial na direção dos fios. De tal forma que obtivemos resultados semelhantes para os arranjos com elipsóides. O campo em que a magnetização atinge a saturação decaiu à medida que a direção de aplicação de  $\vec{H}$  se afastava da direção axial.

Arranjos de cilindros são bastante utilizados para representar os nanofios pela sua simplicidade. Hertel em [7] simulou arranjos cilíndricos utilizando o método de discretização de elementos finitos, em situações que divergiam pela quantidade de nanofios em cada arranjo, de 1 a 16 cilindros, a fim de verificar como as propriedades magnéticas eram alteradas quando essa quantidade variava. Os nanofios modelados por Hertel possuíam 40 nm, 1  $\mu\text{m}$  e 100 nm para os valores de diâmetro, comprimento e distância de centro a centro, respectivamente. A anisotropia magnetocristalina foi desconsiderada de tal forma que os efeitos magnetostáticos são os únicos responsáveis pela histerese. Para o arranjo com sete cilindros, de Hertel, a histerese obtida em [7] (Figura 17) apresentou características também presentes aqui. O formato retangular da histerese magnética foi obtido para campo externo aplicado paralelamente ao eixo do nanofio (Figura 18), enquanto para  $\vec{H}$

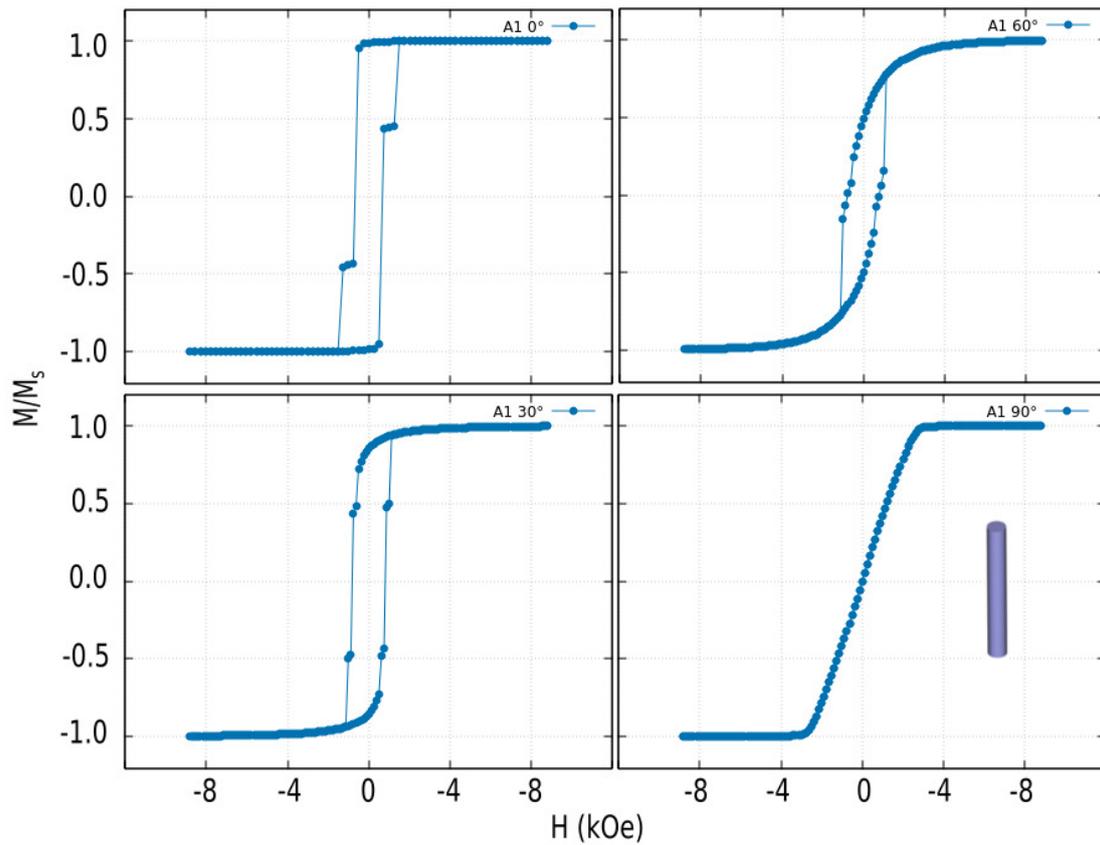


Figura 17 – Laços de histerese para o arranjo hexagonal composto por sete nanofios de 350 nm representados por cilindros. Para os ângulos  $\theta$ , entre o eixo principal do cilindro e o campo magnético aplicado: a)  $0^\circ$ ; b)  $30^\circ$ ; c)  $60^\circ$ ; d)  $90^\circ$

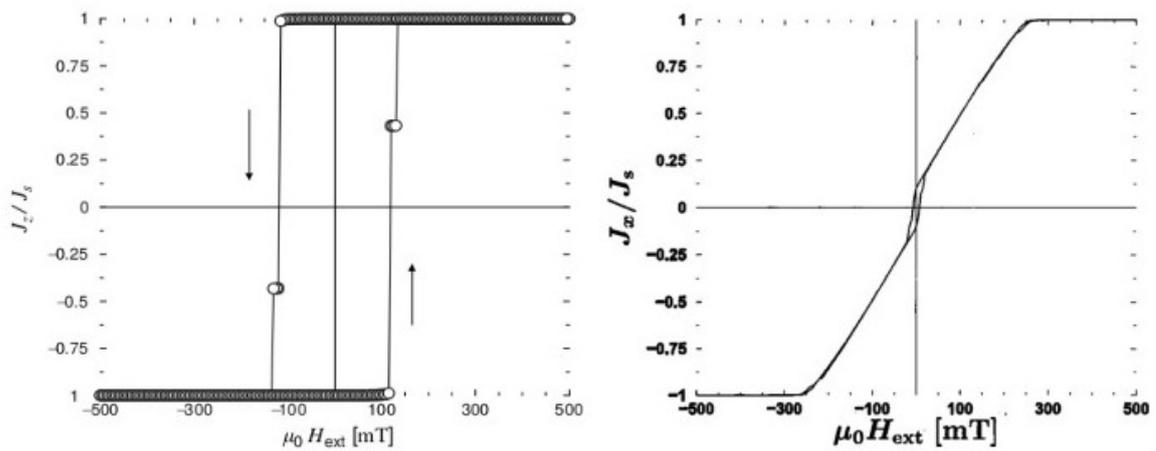


Figura 18 – Histerese produzida por Hertel [7] para um arranjo com sete cilindros, com o campo externo aplicado na direção dos fios (a esquerda). Histerese produzida por Hertel [12] para um arranjo com sete cilindros, com o campo externo aplicado na direção perpendicular aos fios (a direita).

perpendicular ao fio, o laço de histerese é fino e área é quase nula.

Uma relação completa de todos os valores de campo coercitivo e magnetização

Tabela 2 – Valores de coercividade e remanência para o arranjo composto por cilindros, Arranjo 1

Ângulo $\theta$	$H_c$ (Oe)	$M_r/M_s$ ( $10^{-1}$ )	Ângulo $\theta$	$H_c$ (Oe)	$M_r/M_s$ ( $10^{-1}$ )
0°	674.61	9.8484	50°	893.91	6.3306
5°	712.87	9.8098	55°	882.83	5.6490
10°	1015.0	9.6977	60°	773.16	4.9243
15°	847.09	9.5127	65°	702.21	4.1622
20°	845.92	9.2544	70°	622.78	3.3684
25°	819.06	8.9257	75°	479.75	2.5488
30°	814.09	8.5290	80°	325.28	1.7099
35°	925.48	8.0674	85°	82.45	3.7190
40°	904.43	7.5444	90°	4.84	2.1696
45°	906.58	6.9640			

remanente (normalizada) pode ser vista na Tabela 2. O campo coercitivo,  $H_c$  tem o valor de 674.61 Oe para 0° e sofre um aumento abrupto até 10° onde atinge o valor  $H_c = 1015$  Oe. Em seguida decai para 847.00 Oe e permanece praticamente constante até 30°. Em 35°, os valores da curva atingem o valor de 925.48 Oe e após esse ângulo, o campo coercitivo decresce até o valor mínimo de 4.84 Oe, situação em que o campo externo é aplicado na direção perpendicular ao eixo do cilindro.

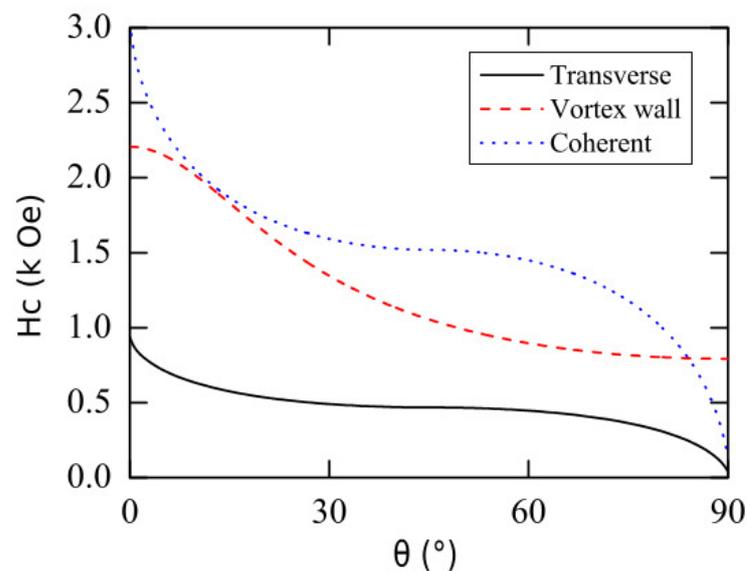


Figura 19 – Coercividade para diferentes ângulos de aplicação do campo externo para um nanofio de 50 nm de acordo com [8].

A curva  $H_c \times \theta$  presente na Figura 20, quando comparada com as curvas de reversão do trabalho de Lavin [8] (Figura 19) teria melhor proximidade ao modo de reversão coerente. Pois, o formato das curvas são semelhantes na região de  $35^\circ$  a  $90^\circ$ . A coercividade deste trabalho apresenta um decaimento a partir do ângulo de  $55^\circ$ . Porém, a intensidade de  $H_c$  nesta simulação é muito inferior a obtida em [8], na região de entre  $20^\circ$  e  $70^\circ$  chega a diferir cerca de 0.8 kOe. É importante acrescentar que na região onde  $\theta < 30^\circ$ ,  $H_c$  apresentou irregularidades na curva que não ocorreram em [8].

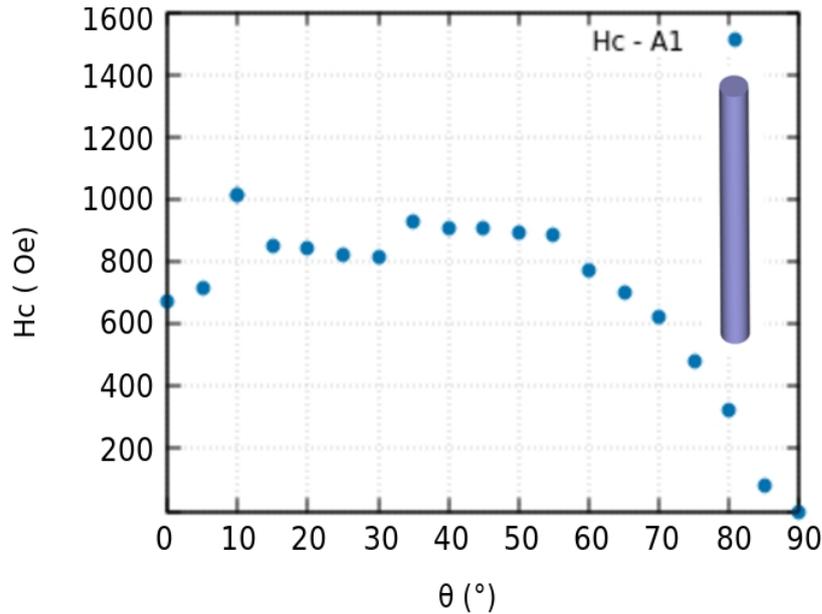


Figura 20 – Curva de coercitividade  $H_c$  em função do ângulo  $\theta$  de aplicação do campo externo, para nanofios do Arranjo 1. A coercitividade  $H_c$  é obtida através das curvas de histerese.

Para o campo externo na direção do eixo do fio, no que se refere ao valor de  $H_c$ , Hertel obteve aproximadamente 1200 Oe (Figura 18) enquanto que no presente trabalho foi obtido cerca de 675 Oe, essa diferença pode está relacionada às interações dipolares, já que são bastante sensíveis à distância entre os fios. K. Nielsch em [34] obteve 1000 Oe para o campo coercitivo em nanofios de Ni produzidos em membranas de alumina com 100 nm,  $1 \mu\text{m}$  e 40 nm para distância de centro a centro, comprimento do nanofio e diâmetro respectivamente.

Com Arranjos idênticos, Nielsch e Hertel obtiveram coercividades que diferiam de 200 Oe. Isto leva a crer que a microestrutura, imperfeições/rugosidade dos nanofios no experimento de Nielsch, influencia as características magnéticas da amostra. Quando comparados a este trabalho também deve-se levar em conta o campo desmagnetizante, como será discutido adiante, é cerca de 4 vezes maior neste trabalho.

Comparando os valores de  $M_r/M_s$  com  $\theta$ , quando o campo externo estava na direção do arranjo, a remanência é máxima  $M_r/M_s = 0.98$  decaindo continuamente até o valor 0.21 ser atingido em  $90^\circ$  (Figura 21). Apesar dos trabalhos de Hertel e Nielsch não

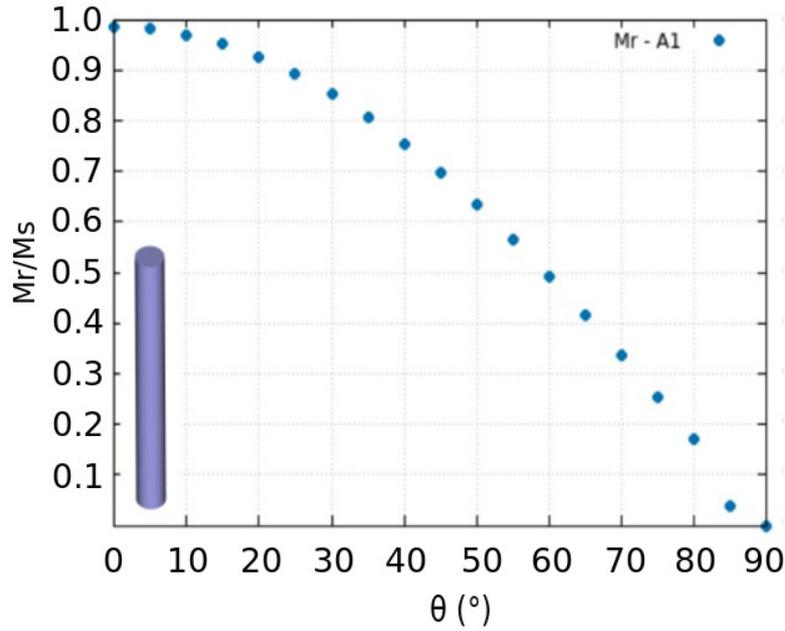


Figura 21 – Curva de magnetização remanente  $M_r$  em função ângulo  $\theta$ , de aplicação do campo externo para os nanofios do Arranjo 1. A remanência  $M_r$  é obtida através das curvas de histerese.

apresentarem uma relação de  $M_r$  com  $\theta$ , é possível observar que para as situações que o campo foi aplicado paralelo ou perpendicular ao fio os resultados foram semelhantes. Para os trabalhos de Hertel e Nielsch os valores de  $M_r/M_s$  também foram próximos a 1, caracterizando curvas de histerese com formato retangular, situação presente quando o campo foi aplicado a  $0^\circ$ . Para  $\theta = 90^\circ$ , a razão  $M_r/M_s$  é próxima de zero, pois a magnetização nesse ângulo é muito pequena.

Segundo L Schultz [96] apud K. Nielsch [34], nanofios de Ni com diâmetro inferior a 55 nm têm características de monodomínio e três contribuições energéticas devem ser consideradas para uma estrutura hexagonal. São elas o campo desmagnetizante que equivale a  $-4\pi MsP$ , o efeito de forma de cada nanofio ( $2\pi Ms = 3200$  Oe caso esteja magnetizado na direção do fio) e uma contribuição que advém da energia de anisotropia magnetocristalina ( $-4K_1/3Ms$ , cerca de 120 Oe para o Ni com anisotropia  $K_1$ ). O campo desmagnetizante esta relacionado a  $P$ , fator de porosidade que depende da distância entre os nanofios  $D$  e o diâmetro  $d$ , sendo expressado pela Equação 4.1 para um arranjo hexagonal [75][62]. Os arranjos presentes neste trabalho possuem  $d = 40$  nm e  $D = 50$  nm, então  $P = 0,5804$ . De forma que o campo desmagnetizante é de  $-4.491$  kOe, 4.9 vezes mais intenso que o calculado por Nielsch ( $-920$  Oe), para o arranjo de cilindros com o mesmo diâmetro que aqui, porém distando 100 nm de centro a centro.

$$P = \frac{d^2}{D} \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \quad (4.1)$$

### 4.1.2 Arranjo formado por elipsóides longos - Arranjo 2

No Arranjo 2, tem-se os fios como um único elipsóide de raio 40 nm e comprimento de 350 nm, distando 50 nm entre si (Figura 13). Arranjos com um único elipsóide são bastante utilizados em estudos analíticos sendo os mais importantes os modelos de Stoner-Wolfarth e o de Osbornv [64, 99].

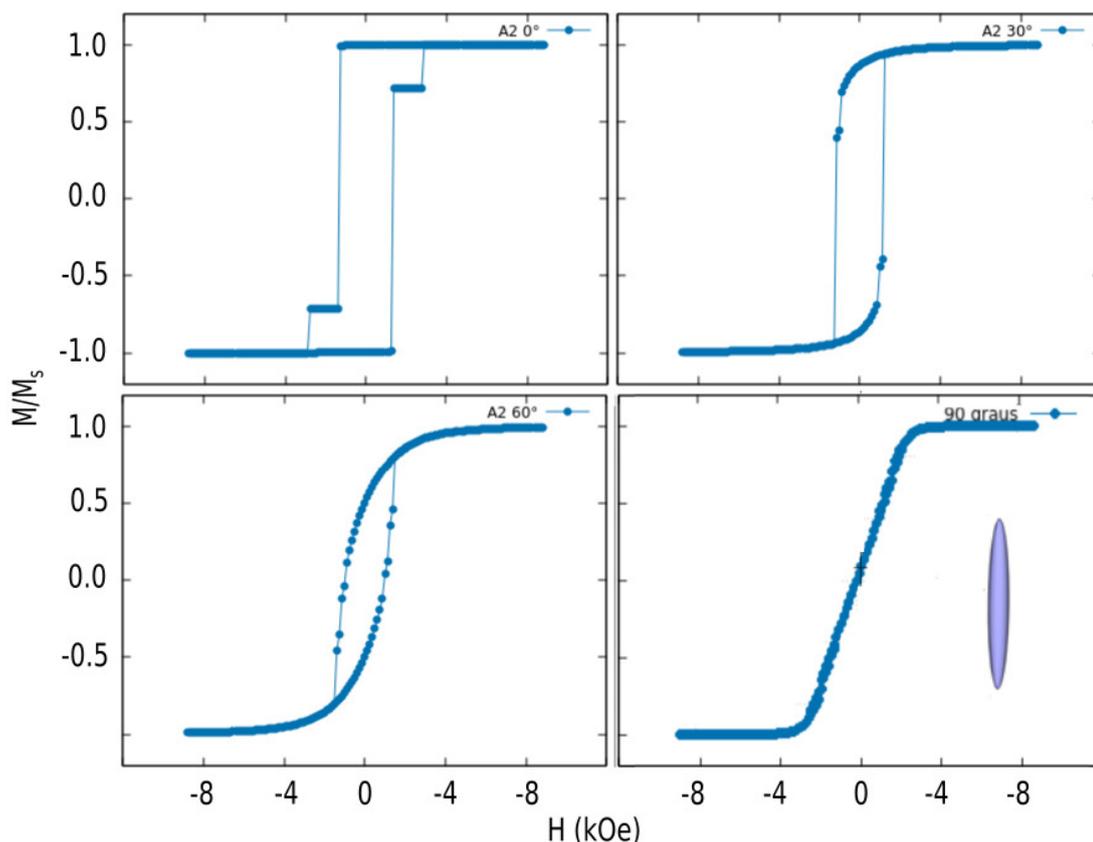


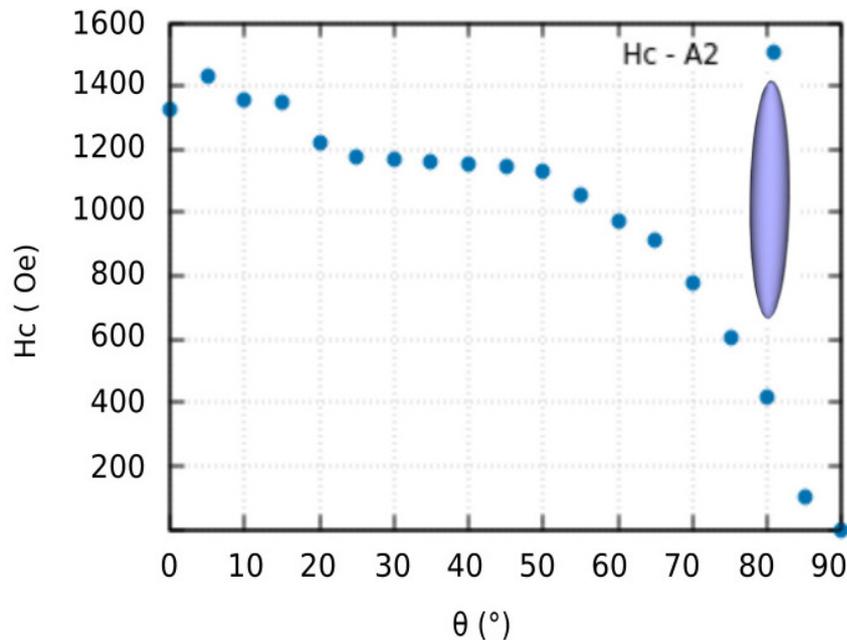
Figura 22 – Laços de histerese para o arranjo hexagonal composto por sete nanofios de 350 nm cada um representado por único elipsóide. Para os ângulos  $\theta$ , entre o eixo principal do nanofio e o campo magnético aplicado: a) 0°; b) 30°; c) 60°; d) 90°

Analisando as histereses geradas no Arranjo 2, Figura 22, se observa que para o ângulo de 0° a histerese assume um formato retangular que vai sendo suavizado à medida que o ângulo  $\theta$  é aumentado. Há um estreitamento nos laços para os ângulos maiores. Quando comparadas as histereses dos Arranjo 1 e Arranjo 2, verifica-se que ambas possuem esse estreitamento a medida que  $\theta$  aumenta, porém os ciclos do Arranjo 2 são mais largos. A magnetização de saturação  $M_s$  é atingida rapidamente para  $H$  aplicado na direção do fio, enquanto que para ângulos maiores  $M_s$  só é atingida para valores maiores de  $H$ .

Os dados de coercividade e remanência do Arranjo 2 (Tabela 3), juntamente com os gráficos nas Figuras 23 e 24, nos mostra que para o campo coercitivo  $H_c$  há uma pequena queda entre 5° e 20°, uma região com derivada próxima de zero entre 20° e 50°, logo em

Tabela 3 – Valores de coercividade e remanência para o arranjo composto por elipsóides longos, Arranjo 2

Ângulo $\theta$	$H_c$ (Oe)	$M_r/M_s$ ( $10^{-1}$ )	Ângulo $\theta$	$H_c$ (Oe)	$M_r/M_s$ ( $10^{-1}$ )
0°	1329.6	9.9655	50°	1140.0	6.3802
5°	1434.0	9.9276	55°	1057.9	5.7160
10°	1356.3	9.8140	60°	975.07	4.9826
15°	1350.1	9.6257	65°	916.83	4.2113
20°	1220.9	9.3640	70°	778.06	3.4085
25°	1172.9	9.0311	75°	607.26	2.5792
30°	1167.9	8.6296	80°	415.81	1.7309
35°	1161.6	8.1626	85°	100.97	0.3736
40°	1154.0	7.6331	90°		
45°	1145.1	7.0460			

Figura 23 – Curva de coeritvidade  $H_c$  em função do ângulo  $\theta$  de aplicação do campo externo, para nanofios do Arranjo 2. A coeritvidade  $H_c$  é obtida através das curvas de histerese.

seguida um decaimento acentuado até o ângulo de 90°. A coeritvidade máxima foi atingida no ângulo de 5°,  $H_{c,max} = 1434.0$  Oe, e a mínima foi para o campo aplicado na direção do nanofio  $H_{c,min} = 1434.0$  Oe. Comparando  $H_c$  desse Arranjo, com a Figura 19 verifica-se que a partir de  $\theta = 15^\circ$  a coeritvidade tem um comportamento similar a reversão coerente proposta pelo modelo de Stoner-Wohlfarth.

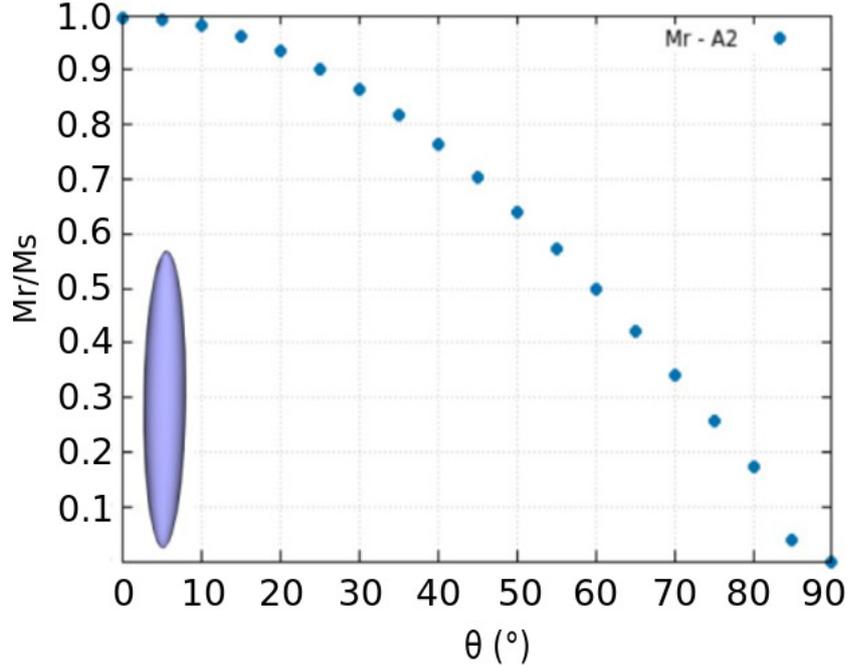


Figura 24 – Curva de magnetização remanente  $M_r$  em função ângulo  $\theta$ , de aplicação do campo externo para os nanofios do Arranjo 2. A remanência  $M_r$  é obtida através das curvas de histerese.

Para a magnetização remanente, assim como no Arranjo 1, observamos um decaimento contínuo, sem mudanças de sinal da derivada seguindo um decaimento de acordo com o modelo de Stoner-Wohlfarth. O valor máximo de  $M_r/M_s$  ocorre em  $0^\circ$  assumindo o valor de 0.99 e o valor mínimo em  $90^\circ$ .

De acordo com o modelo de Stoner-Wohlfarth, a energia total do sistema está relacionada com a uma anisotropia efetiva,  $K_{\text{eff}}$  (Equação 4.2). Essa anisotropia foi estudada em alguns trabalhos [13][38] [5] [25] [56] e se relaciona com o campo de anisotropia,  $H_A = 2 K_{\text{eff}} / M_s$ . Para a situação em que o campo é aplicado na direção do eixo fácil,  $H_c = H_k$  [97]. Dessa forma é possível calcular a anisotropia efetiva dos Arranjos 1 e 2. Para o Níquel,  $M_s = 0.49 \times 10^3$  emu/cm<sup>3</sup> e os valores de  $H_c$  para os Arranjos 1 e 2 em  $\theta = 0^\circ$  foram de 674.61 Oe 1329.6 Oe. Então, a anisotropia efetiva de cada arranjo é de  $3.3 \times 10^5$  erg/cm<sup>3</sup> e  $6.5 \times 10^5$  erg/cm<sup>3</sup>, respectivamente. Vega [62] e Sellmyer [98] obtiveram valores de anisotropia efetiva. O modelo proposto por Sellmyer obteve um valor de  $K_{\text{eff}} = 3.5 \times 10^5$  erg/cm<sup>3</sup>, para nanofios de 5 nm. Já no trabalho de Vega, nanofios de níquel de cerca de 35 nm de diâmetro, espaçados de 105 nm e com o comprimento de 3  $\mu\text{m}$ , foi obtido anisotropia efetiva de  $5.7 \times 10^5$  erg/cm<sup>3</sup>, utilizando a técnica MTM (magnetic torque magnetometry). Além disso, através de simulações, Vega gerou curvas do torque da anisotropia magnética e também obteve valores de  $K_{\text{eff}}$  de acordo com o modelo considerando apenas anisotropia de forma  $K_{\text{eff}} = 7.4 \times 10^5$  e considerando anisotropia de forma e interações dipolares  $K_{\text{eff}}$

$= 5.2 \times 10^5$ , verificando a intensidade da influência das interações dipolares.

$$E = K_{eff} \sin^2 \theta - M_s H \cos(\phi - \theta) \quad (4.2)$$

Como apresentado, ao representar arranjos de nanofios com geométricas de cilindros e elipsóides surgem diferenças entre os resultados obtidos via simulação e obtidos por experimentos. A dependência angular do campo coercitivo para os Arranjos 1 e 2 segue o formato da curva de reversão coerente, porém com algumas diferenças em relação a intensidade de  $H_c$  e o comportamento da curva para pequenos ângulos. Também foi calculado o campo desmagnetizante do presente trabalho, que apresentou uma diferença de quase 5 vezes para os obtidos em [34] graças ao fator de empacotamento,  $P$ . Por fim, foi calculada a anisotropia efetiva que para o arranjo de elipsóides apresenta a mesma ordem de grandeza que os valores obtidos em [62]. Enquanto que para o arranjo de cilindros permaneceu na ordem de grandeza de  $K_{eff}$  para o modelo de Sellmyer [98]. Outros trabalhos também apresentaram diferenças que os modelos teóricos não conseguem explicar, como ocorreu nos trabalhos de Nielsch [34] e de Hertel [7] que obtiveram valores diferentes de coercividade para a mesma geometria dos arranjos. Neste sentido, os arranjos que seguem possuem formatos que foram baseadas em imagens TEM obtidas por nanofios do nosso laboratório.

### 4.1.3 Arranjo formado por cadeias de elipsóides alinhados, Arranjo 3

Prosseguindo com a análise dos laços de histerese conseguimos perceber uma mudança sutil das propriedades magnéticas quando são levados em conta o formato real do nanofio ao produzir uma geometria composta por elipsóides. Neste caso, o arranjo de nanofios é formado por cadeias de elipsóides alinhados, onde cada nanofio possui cinco elipsóides de diâmetro 40 nm e comprimento 80 nm. Observando a largura da histerese geradas nestes arranjos, Figura 25 podemos perceber um estreitamento significativo quando comparado com as histereses das geometrias anteriores (Figuras 17 e 22).

Apesar desse estreitamento, os aspectos gerais dos gráficos se mantiveram semelhantes aos das geometrias já discutidas. Apresentando um formato retangular para ângulos pequenos, e estreitamento da largura da histerese à medida que o ângulo  $\theta$  foi elevado. O campo em que a magnetização satura também permanece reduzido para menores valores de  $\theta$ .

A relação de  $H_c$  com  $\theta$ , descrita na Tabela 4 e na Figura 26 mostra uma coercividade de 707 Oe para  $H$  na direção do fio, e de 15 Oe para a direção perpendicular. A relação da coercividade com  $\theta$  dada na Figura 26 tem um formato semelhante a reversão de modo coerente proposto em [8], quando se leva em conta que o decaimento da curva ocorreu no ângulo de  $60^\circ$ . Por outro lado, avaliando a região de  $0^\circ$  a  $30^\circ$  o decaimento da curva

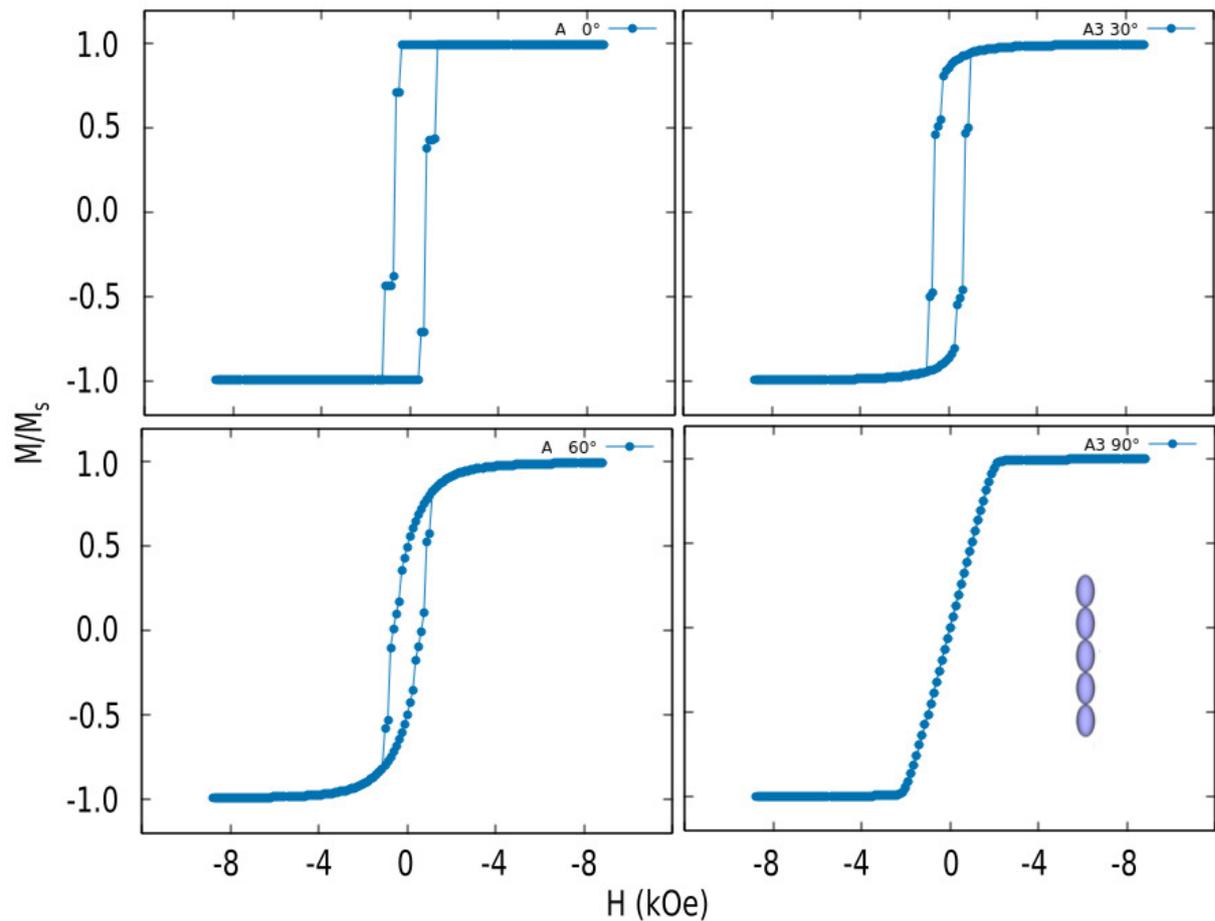


Figura 25 – Laços de histerese para o arranjo hexagonal composto por sete nanofios de 400 nm, onde cada nanofio foi composto por uma cadeia de cinco elipsóides alinhados com o eixo do nanofio (eixo x). Para os ângulos  $\theta$ , entre o eixo principal do nanofio e o campo magnético aplicado: a)  $0^\circ$ ; b)  $30^\circ$ ; c)  $60^\circ$ ; d)  $90^\circ$

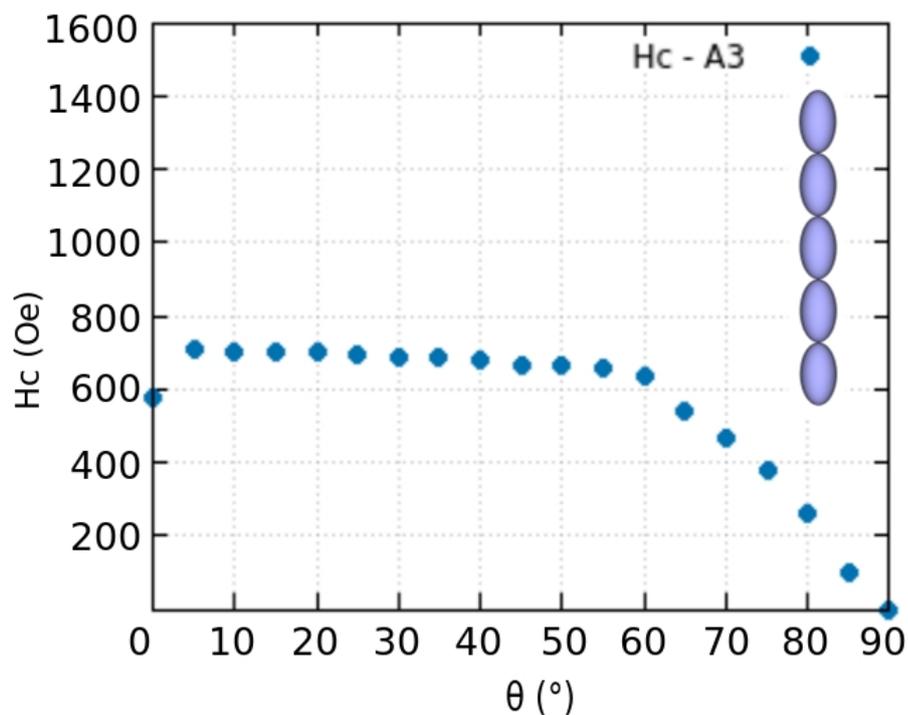
difere bastante do modo coerente por não apresentar o decaimento brusco e dessa forma se aproximaria melhor da reversão da magnetização pelo modo transversal.

Esse formato foi estudado previamente em [13] que obteve  $H_c = 947$  Oe para  $\theta$  nulo, 222 Oe para  $\theta = \pi/2$  para a amostra com tratamento térmico, e os valores de 558 Oe e 158 Oe respectivamente para a amostra sem tratamento. As imagens TEM deste trabalho mostraram que a amostra sem tratamento térmico tinha uma geometria semelhante a uma cadeia de elipsóides enquanto a geometria da amostra com tratamento se assemelhava a cilindros. A curva de coercividade da Figura 26 quando comparada as curvas da Figura 27 possui um decaimento diferente das curvas obtidas em [13].

Para a relação de  $m_r$  com  $\theta$  as curvas dos Arranjos 1,2 e 3 representadas nas Figuras 21, 24 e 28 têm as mesmas características e não há diferenças significativas entre elas. Sendo os valores de  $M/M_s = 0.98, 0.99$  e  $0.99$  respectivos para os Arranjos 1,2 e 3 em  $0^\circ$ .

Tabela 4 – Valores de coercividade e remanência para o arranjo composto por cadeias de elipsóides alinhados, Arranjo 3

Ângulo $\theta$	$H_c$ (Oe)	$M_r/M_s$ ( $10^{-1}$ )	Ângulo $\theta$	$H_c$ (Oe)	$M_r/M_s$ ( $10^{-1}$ )
0°	707.77	9.9472	50°	667.61	6.3937
5°	709.02	9.8755	55°	660.79	5.7053
10°	704.92	9.7962	60°	637.67	4.9733
15°	702.70	9.6084	65°	542.74	4.2036
20°	699.55	9.3474	70°	463.43	3.4019
25°	695.43	9.0153	75°	378.31	2.5743
30°	690.30	8.6145	80°	260.75	1.7270
35°	684.11	8.1482	85°	98.79	0.5931
40°	676.77	7.6199	90°	30.65	0.1586
45°	668.13	7.0336			

Figura 26 – Curva de coerçitividade  $H_c$  em função do ângulo  $\theta$  de aplicação do campo externo, para nanofios do Arranjo 3. A coerçitividade  $H_c$  é obtida através das curvas de histerese.

Para o trabalho de Holanda [13], as curvas diferiram bastante, em  $\theta = 0^\circ$ , a remanência reduzida foi de 0.15 para os nanofios com tratamento térmico e de 0.1 para as curvas sem tratamento térmico (Figura 29).

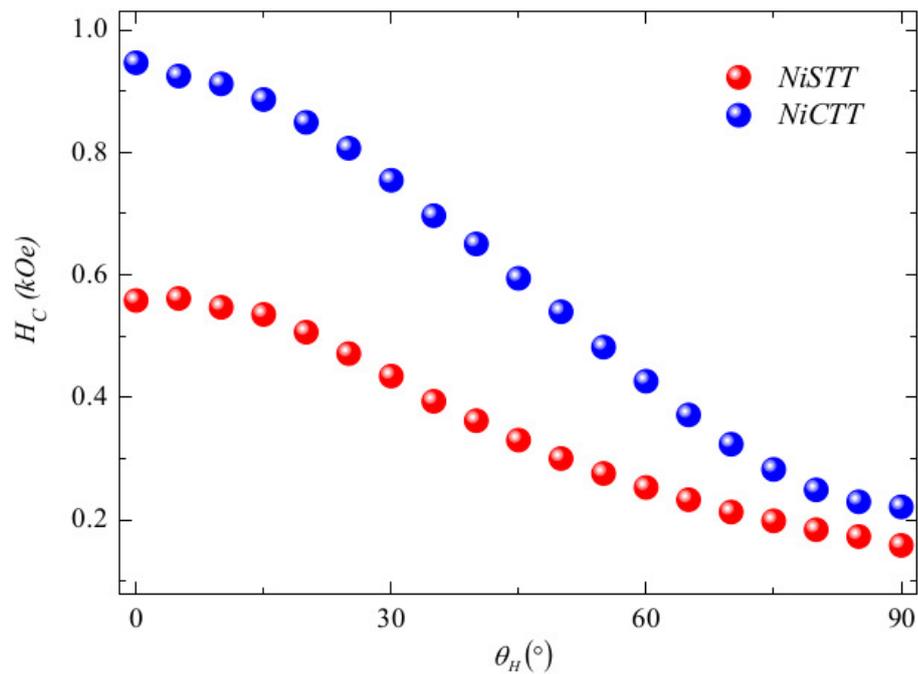


Figura 27 – Curva experimental da coercitividade  $H_c$  em função ângulo de aplicação do campo externo,  $\theta$ . Em azul os valores de coercitividade para nanofios que passaram por um tratamento térmico e em vermelho os valores para a amostra sem o tratamento [13].

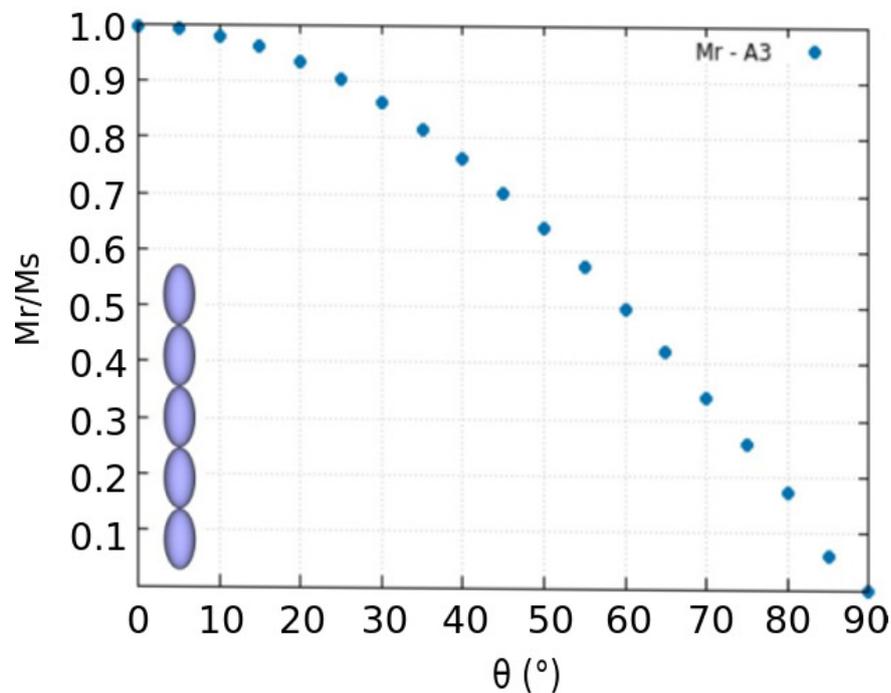


Figura 28 – Curva de magnetização remanente  $M_r$  em função ângulo  $\theta$ , de aplicação do campo externo para os nanofios do Arranjo 3. A remanência  $M_r$  é obtida através das curvas de histerese.

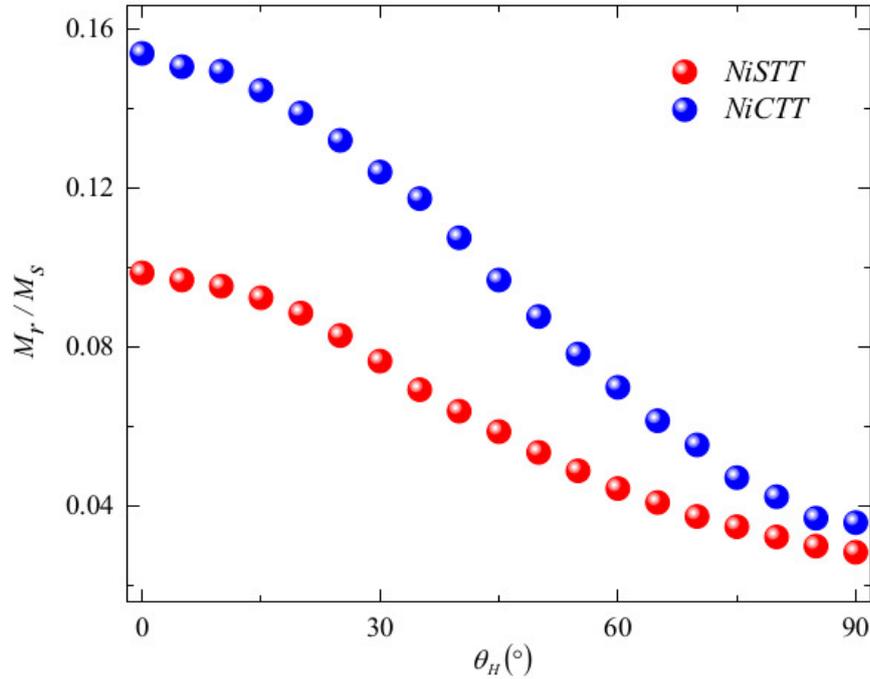


Figura 29 – Curva experimental da remanência reduzida  $M_r/M_s$  em função ângulo de aplicação do campo externo,  $\theta$ . Em azul os valores de coercividade para nanofios que passaram por um tratamento térmico e em vermelho os valores para a amostra sem o tratamento [13].

#### 4.1.4 Arranjo formado por cadeias de elipsóides desalinhados, Arranjo 4

O Arranjo 4 tem uma geometria levemente modificada em relação ao Arranjo 3, nesse arranjo o alinhamento relativos dos elipsóides é "aleatório", com deflexões em relação ao eixo do fio de até  $5^\circ$ . Dessa forma, os laços de histerese sofrem pequenas mudanças quando comparados às histereses para o caso da cadeia de elipsóides alinhados. Tendo como diferença visível apenas o ciclo gerado em  $\theta = 0^\circ$ . (Figura 30)

Para  $\theta = 0^\circ$ , a histerese apresenta o formato retangular observado também nos arranjos de cilindros, elipsóides e cadeia de elipsóides. À medida que o ângulo aumenta a área da histerese diminui, atingindo o mínimo em  $90^\circ$ , ângulo em que a relação de  $M/M_s$  com  $H$  é uma linha e não ocorre a histerese, como ocorre no modelo de S-W.

Os valores de campo coercitivo e magnetização remanente estão presentes na Tabela 5. Para  $H_c$  o valor máximo ocorre em  $\theta = 5^\circ$ ,  $H_{c,máx} = 746.98$  Oe e o mínimo  $H_{c,min} = 16.61$  Oe ocorre em  $90^\circ$ , valores bem próximos do arranjo com os elipsóides alinhados, que apresentou  $H_{c,máx} = 709.02$  Oe e  $H_{c,min} = 306.5$  Oe. Porém valores bem distantes dos obtidos nos dois primeiros arranjos, nos quais o campo máximo atingiu cerca do dobro do valor deste arranjo. A curva de remanência, Figura 31, permanece quase constante entre os ângulos  $0^\circ$  e  $60^\circ$ , havendo a presença de um mínimo local em  $35^\circ$  onde  $H_c = 6.1921$  Oe, a partir de  $60^\circ$  a curva de coercividade com  $\theta$  começa decair. As modificações geométricas

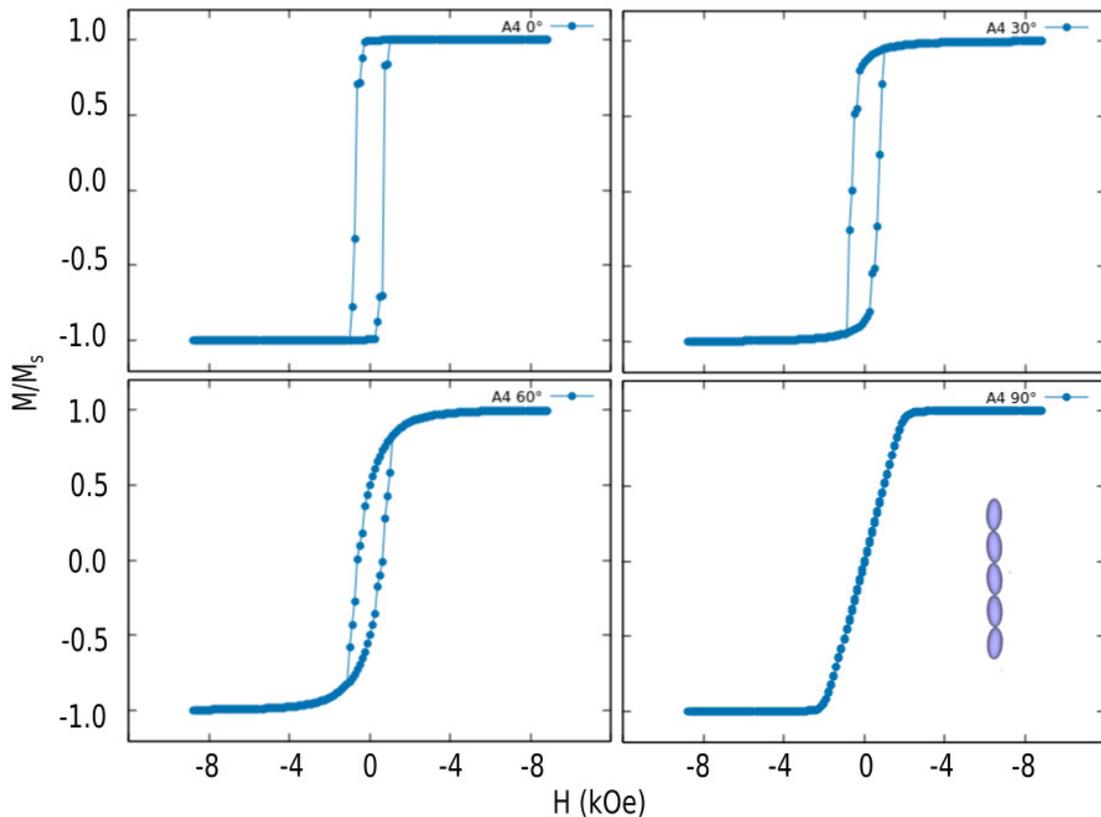


Figura 30 – Laços de histerese para o arranjo hexagonal composto por sete nanofios de 400 nm de comprimento onde cada nanofio foi composto por uma cadeia de cinco elipsóides de angulação aleatória em relação ao eixo do fio, porém de forma que o ângulo  $\alpha$  não ultrapassasse o valor de  $5^\circ$ . Para os ângulos  $\theta$ , entre o eixo principal do nanofio e o campo magnético aplicado: a)  $0^\circ$ ; b)  $30^\circ$ ; c)  $60^\circ$ ; d)  $90^\circ$

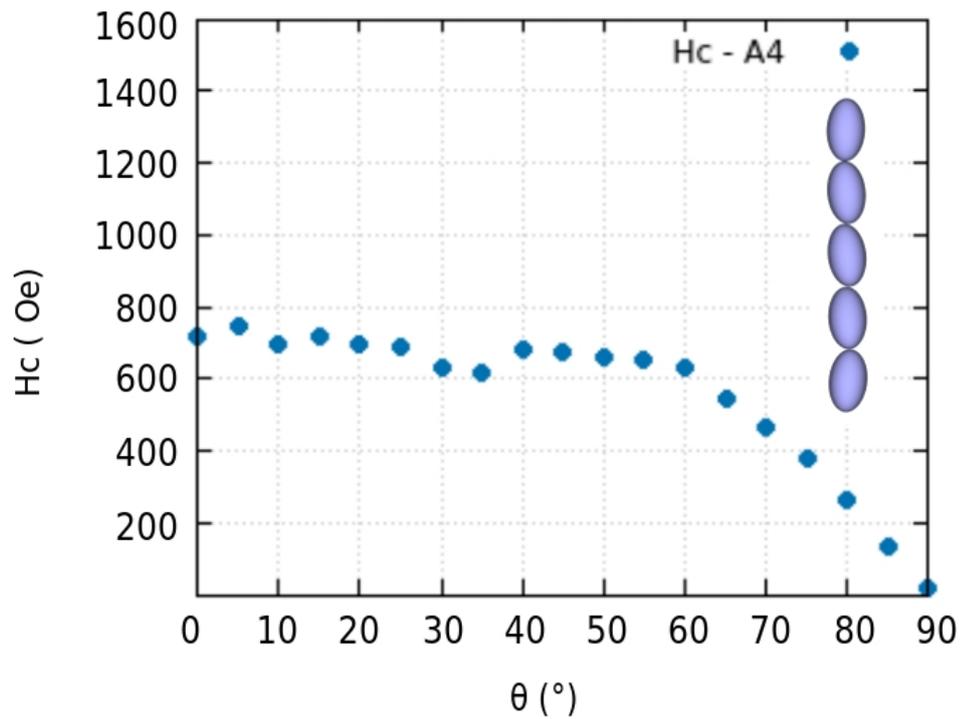
entre os Arranjos 3 e 4 alteraram pouco a dependência angular de  $H_c$ . A análise do formato da curva de acordo com os modos de reversão das curvas de Lavin segue a mesma lógica do Arranjo 3. Pois, para o Arranjo 4 também há um decaimento da remanência no  $\theta = 60^\circ$  e não há um decaimento abrupto em ângulos pequenos. Sendo difícil caracterizar a reversão como coerente ou transversa observando apenas a coercividade.

Comparando a curva de coercividade do Arranjo 4 (Figura 31) com a do arranjo anterior (Figura 26) e as geradas por J. Holanda em [13] (Figura 27), é possível verificar que as alterações geométricas que ocorreram entre os Arranjos 3 e 4 não foram suficientes para que a curva  $H_c \times \theta$  se adequasse melhor a curva observada por J. Holanda.

No tocante à magnetização remanente, as curvas deste trabalho, sofreram diferenças sutis. O decaimento dos arranjos anteriores apresentam a mesma forma, tendo as derivadas da curva basicamente inalteradas. A magnetização remanente máxima ocorre em  $90^\circ$  e a mínima em  $0^\circ$  assumindo os valores respectivos: 0.99 e 0.01. Assim como o arranjo com a cadeia de elipsóides alinhados, este arranjo também diferiu bastante dos valores

Tabela 5 – Valores de coercividade e remanência para o arranjo composto por cadeias de elipsóides desalinhados, Arranjo 4

Ângulo $\theta$	$H_c$ (Oe)	$M_r/M_s$ ( $10^{-1}$ )	Ângulo $\theta$	$H_c$ (Oe)	$M_r/M_s$ ( $10^{-1}$ )
0°	714.22	9.9204	50°	662.89	6.4065
5°	746.98	9.8861	55°	651.42	5.7219
10°	697.60	9.7765	60°	631.97	4.9938
15°	720.51	9.5926	65°	544.15	4.2277
20°	693.01	9.3355	70°	464.08	3.4295
25°	692.49	9.0075	75°	378.43	2.6052
30°	630.16	8.6108	80°	265.96	1.7016
35°	619.21	8.1487	85°	136.63	0.9034
40°	685.02	7.6245	90°	16.61	0.0863
45°	674.91	7.0423			

Figura 31 – Curva de coeritvidade  $H_c$  em função do ângulo  $\theta$  de aplicação do campo externo, para nanofios do Arranjo 4. A coeritvidade  $H_c$  é obtida através das curvas de histerese.

experimentais obtidos em [13].

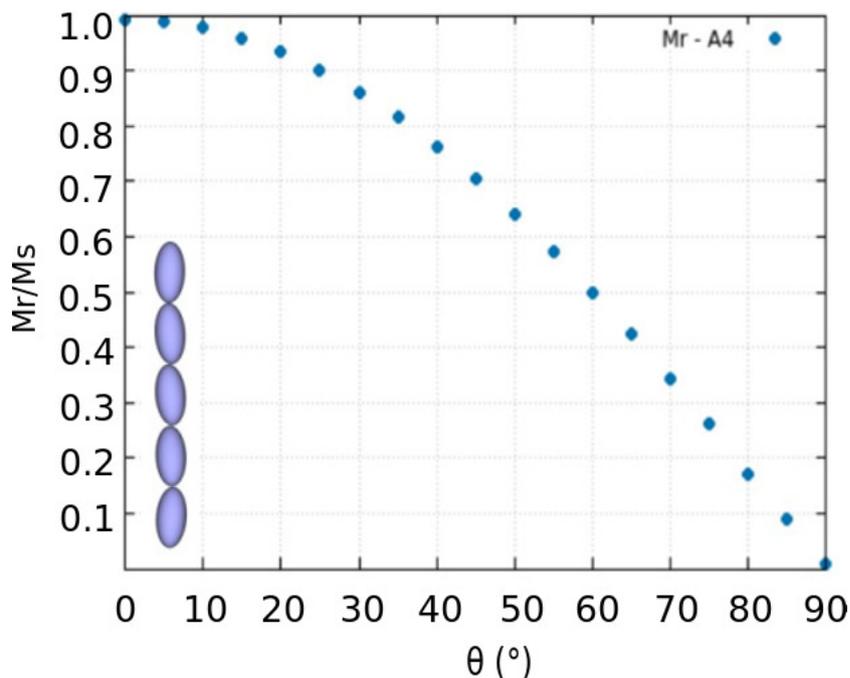


Figura 32 – Curva de magnetização remanente  $M_r$  em função ângulo  $\theta$ , de aplicação do campo externo para os nanofios do Arranjo 4. A remanência  $M_r$  é obtida através das curvas de histerese.

#### 4.1.5 Arranjo formado por uma cadeia de cuboctaedros, Arranjo 5

O arranjo 5, composto por uma cadeia de cuboctaedros tem alterações mais bruscas nos laços de histerese e na correspondência da coercividade e remanência com o ângulo quando comparados, esses gráficos, com os arranjos anteriores.

Analisando a histerese, as áreas dentro das curvas desse arranjo são ainda menores que os demais e a magnetização de saturação é atingida mais rapidamente como mostrado na Figura 33. O padrão de curva retangular, presente nos arranjos anteriores, não ocorre nesse arranjo, divergindo do modelo de S-W. A ausência desse perfil retângular, sugere que nos Arranjos anteriores o mínimo de energia para a magnetização alinhada ao eixo dos fios é mais intensa que no presente arranjo.

Toda a relação dos valores de campo coercitivo e magnetização remanente reduzida ( $M_r/M_s$ ) estão presentes na Tabela 6. Que fornece para  $H_C$  os limites de máximo e mínimo: 156.44 Oe em 55° e 18.79 Oe em 90°. Os valores obtidos aqui diferem bastante dos Arranjos já estudados. Para o arranjo com elipsóides longos, a coercividade dos Arranjos foi 8 vezes mais intensa. Já em relação a remanência,  $M_r/M_s$  foi de 0.68 para 0° e 0.02 para 90°, também diferindo dos outros modelos que para 0° obtiveram essa razão próxima a 1. Os ângulos de 70° e 80° não foram calculados pois durante a simulação desse arranjo ocorreram problemas de convergência no programa e especificamente nesses valores os critérios de parada (descritos na metodologia) não foram suficientes para solucionar o problema.

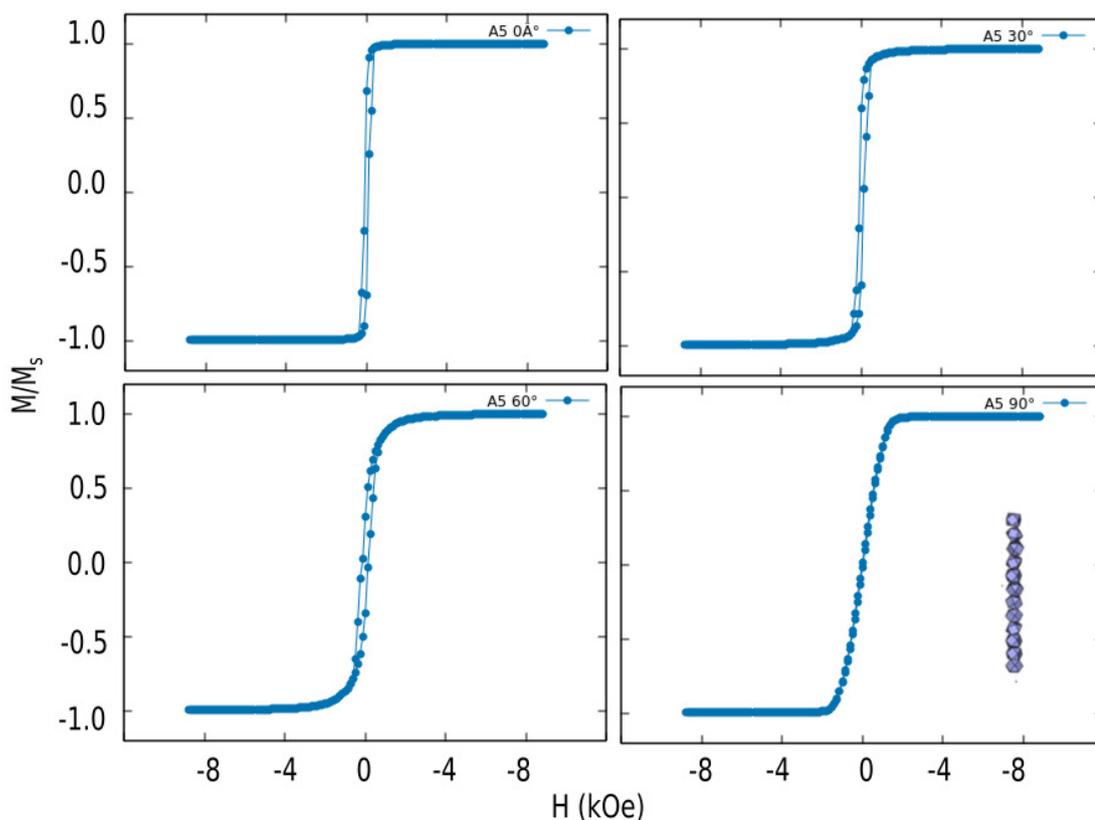


Figura 33 – Laços de histerese para o arranjo hexagonal composto por sete nanofios de 350 nm cada, compostos por uma cadeia de cuboctaedros. Para os ângulos  $\theta$ , entre o eixo principal do nanofio e o campo magnético aplicado: a)  $0^\circ$ ; b)  $30^\circ$ ; c)  $60^\circ$ ; d)  $90^\circ$

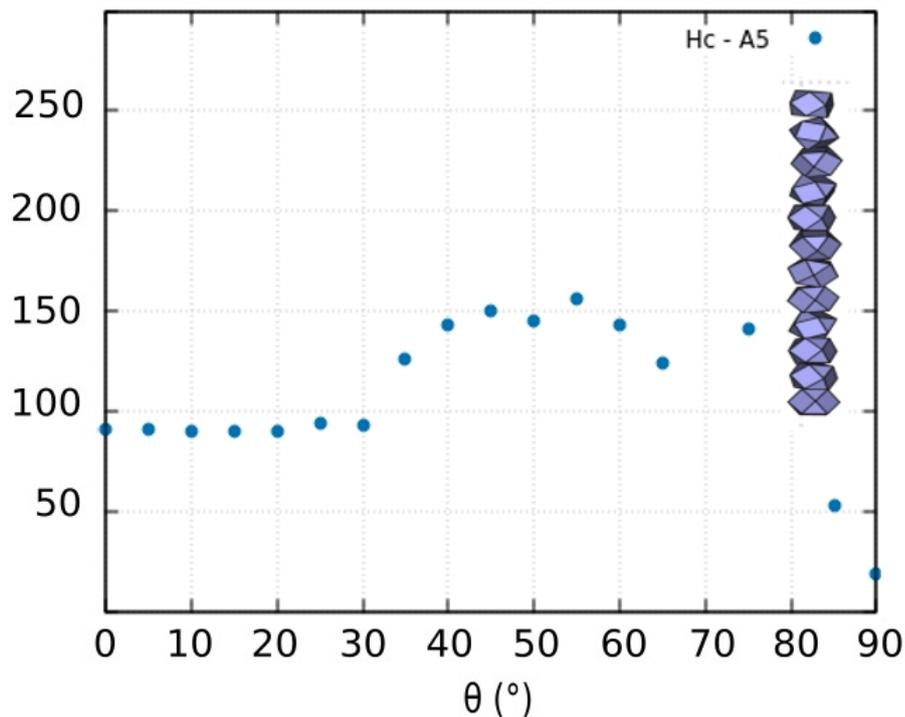
Na relação da coercividade com  $\theta$  para o Arranjo 5 a curva não se enquadra em nenhuma das reversões propostas por [8], Figura 19. Como pode ser visto na Figura 34, a coercividade permanece praticamente constante até  $30^\circ$ , havendo um crescimento suave até  $55^\circ$ , decrescendo logo em seguida até  $65^\circ$ , quando volta a crescer até o máximo local em  $75^\circ$  e decai abruptamente até  $90^\circ$ .

Um arranjo composto por cuboctaedros já havia sido simulado em outros trabalhos do nosso laboratório nos trabalhos de C. A. França et al. [4] e Y. Guerra [94]. A relação de  $H_C$  com  $\theta$  presente na Figura 35 tem a curva azul (pontos em círculo) referente aos dados experimentais, para um arranjo hexagonal composto por uma cadeia de cuboctaedros de 30 nm de raio médio, distando 70 nm entre si e com um comprimento de 450 nm. A curva em vermelho (pontos em triângulo) corresponde as medidas de nanofios produzido em membranas de AAO com poros de 40 nm de diâmetro, 70 nm de separação e 4  $\mu\text{m}$  de comprimento.

Ao comparar as coercividades das Figuras 34 e 35 verifica-se que a curva gerada no Arranjo 5 têm uma correspondência com menor similaridade em relação à curva simulada

Tabela 6 – Valores de coercividade e remanência para o arranjo composto por cadeias de cuboctaedros, Arranjo 5

Ângulo $\theta$	$H_c$ (Oe)	$M_r/M_s$ ( $10^{-1}$ )	Ângulo $\theta$	$H_c$ (Oe)	$M_r/M_s$ ( $10^{-1}$ )
0°	90.506	6.8053	50°	145.56	3.9416
5°	90.420	6.7861	55°	156.44	3.9662
10°	90.302	6.7151	60°	142.97	3.0641
15°	90.156	6.5932	65°	124.21	2.8961
20°	90.051	6.4212	70°		
25°	93.589	6.2004	75°	141.40	1.4087
30°	92.914	5.9322	80°		
35°	126.23	5.0260	85°	52.24	0.4935
40°	143.03	4.6995	90°	18.79	0.1722
45°	149.95	4.3372			

Figura 34 – Curva de coerçitividade  $H_c$  em função do ângulo  $\theta$  de aplicação do campo externo, para nanofios do Arranjo 5 (. A coerçitividade  $H_c$  é obtida através das curvas de histerese.

em [4] por C. França, quando comparada a experimental (Curva vermelha - Figura 35). Sendo importante ressaltar as diferenças entre os comprimentos dos fios produzidos e simulados bem como a distância de centro a centro e o diâmetro, fatores fundamentais na

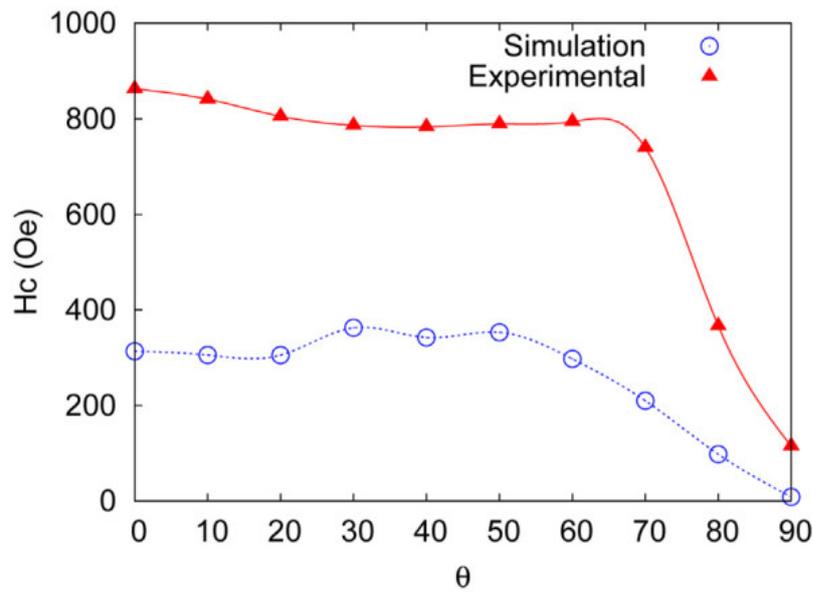


Figura 35 – Curva de coercedividade  $H_c$  em função ângulo do campo aplicado  $\theta$ , para nanofios produzidos e gerados em [4]. A curva azul corresponde as medidas da simulação de um arranjo hexagonal composto de uma cadeia de cuboctaedros de 30 nm. Enquanto que a curva em vermelho corresponde as medidas do nanofio eletrodepositado em membranas de AAO.

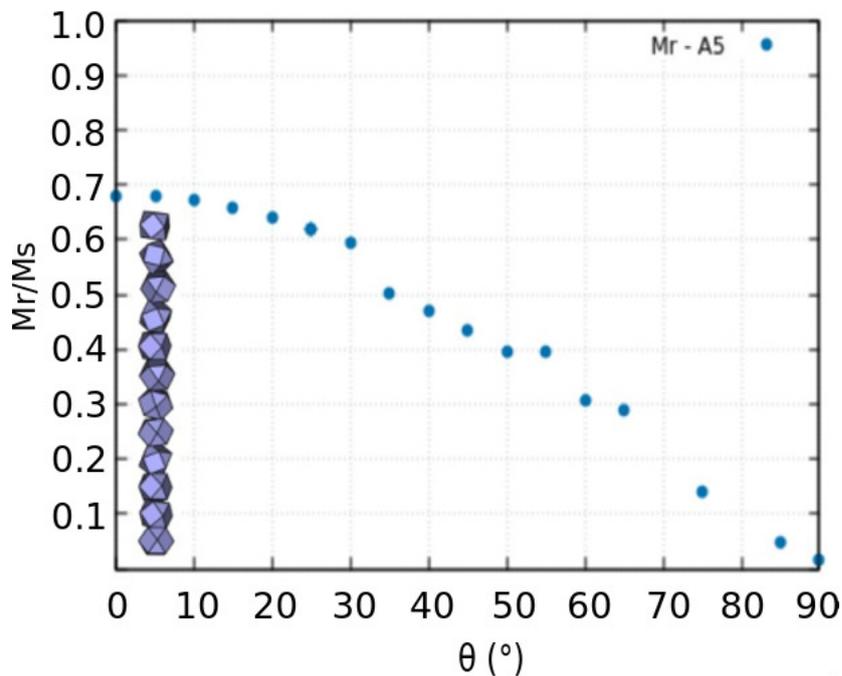


Figura 36 – Curva de magnetização remanente  $M_r$  em função ângulo  $\theta$ , de aplicação do campo externo para os nanofios do Arranjo 5. A remanência  $M_r$  é obtida através das curvas de histerese.

resposta magnética. Se mostrando mais sensíveis nesse arranjo específico.

A magnetização remanente do Arranjo 5 apresenta grandes diferenças quando comparada com os arranjos anteriores. Os arranjos de cilindros, elipsóides longos e cadeias

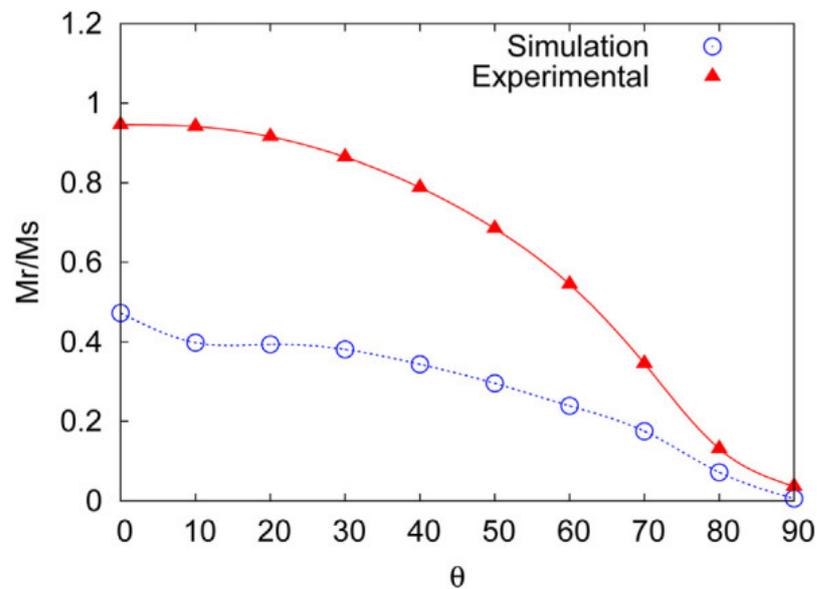


Figura 37 – Curva de magnetização remanente  $M_r/M_s$  em função ângulo do campo aplicado  $\theta$ , para nanofios produzidos e gerados em [4]. A curva azul corresponde as medidas da simulação de um arranjo hexagonal composto de uma cadeia de cuboctaedros de 30 nm. Enquanto que a curva em vermelho corresponde as medidas do nanofio eletrodepositado em membranas de AAO.

de elipsóides tinham como a razão  $M_r/M_s$  um valor próximo à 1, enquanto que para esse problema a magnetização remanente é inferior a magnetização de saturação. O valor máximo dessa razão correspondendo a 0.68 em  $\theta = 0^\circ$ , indicando que a direção de eixo fácil de magnetização ainda é na direção do fio, porém atuando de forma menos intensa que os arranjos anteriores. A de curva de  $M_r/M_s$  do Arranjo 5 (Figura 36) se aproxima mais à curva experimental (Figura 37 - curva em vermelho) que a simulada para os nanofios com 30 nm de diâmetro (Figura 37 - curva em azul).

#### 4.1.6 Campos de comutação, $H_{sw}$

Como visto nas seções anteriores, utilizando variadas geometrias (cilindros, elipsóides longos, cadeias de elipsóides e cadeia de cuboctaedros) os valores de remanência e coercividade em nanofios de níquel, sofrem grandes alterações quando se considera que o nanofio possui irregularidades. Para entender o mecanismo de reversão de magnetização, além do campo coercitivo, a dependência angular do campo de comutação é um ponto chave [15] [18] já que, ele é responsável pela inversão na direção de magnetização da partícula.

No trabalho de Wernsdorfer [14] é apresentado uma relação entre o de campo de comutação e o ângulo, para nanofios isolados de Ni para os diâmetros de 92 nm e 50 nm (Figuras respectivamente 39). Na primeira situação, a relação do campo de comutação tem um mínimo na região em que  $\theta = 0^\circ$ , explicado pelo modo curling. No nanofio com

diâmetro de 55 nm, a dependência angular do campo apresenta dois mínimos locais nas regiões em que o ângulo  $\theta$  era cerca de  $35^\circ$ . A presença desses mínimos não é explicada pelos modos de reversão coerente ou curling, causando uma discrepância com o método de Brown [100].

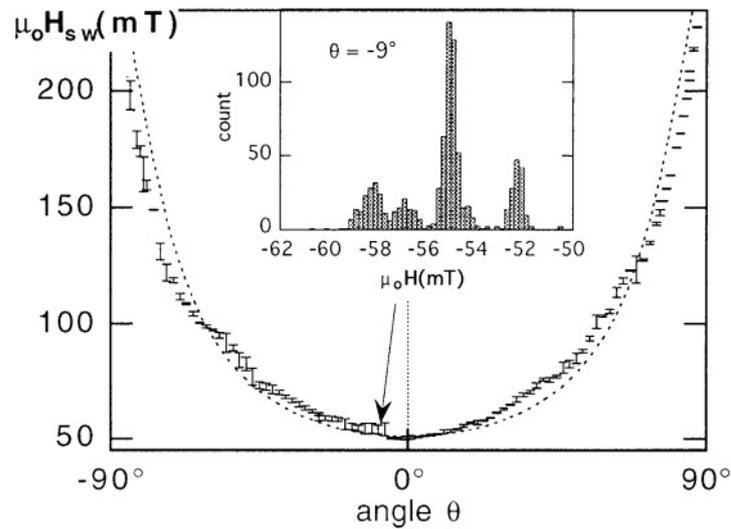


Figura 38 – Variação angular do campo de comutação  $H_{sw}$  para um fio de Niquel com aproximadamente 50 nm de diâmetro e  $3.5 \mu\text{m}$  de comprimento. Na parte interior um histograma de  $H_{sw}$  para o ângulo  $5^\circ$ . [14].

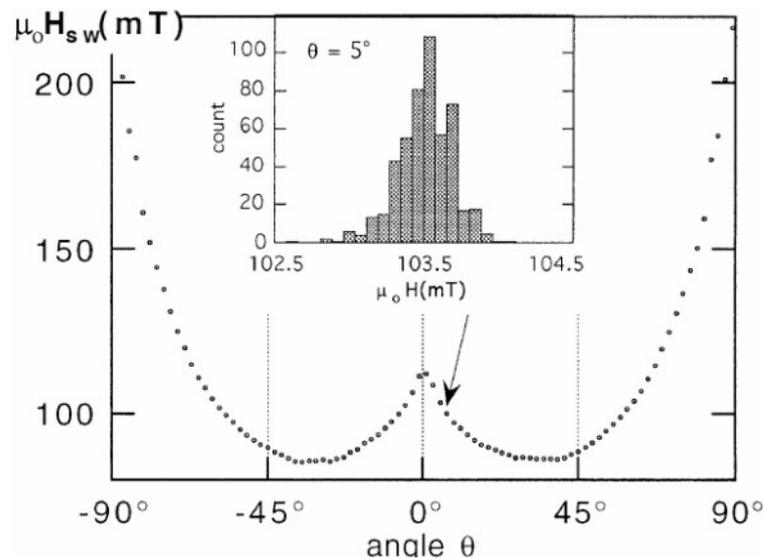


Figura 39 – Variação angular do campo de comutação  $H_{sw}$  para um fio de Niquel com aproximadamente 50 nm de diâmetro e  $3.5 \mu\text{m}$  de comprimento. Na parte interior um histograma de  $H_{sw}$  para o ângulo  $5^\circ$ . [14].

Dessa forma, Xiangcong [15], modelando cadeia de cristais em forma de elipsóides em monodomínio, com anisotropia uniaxial e fazendo mais algumas considerações bem específicas (presentes em [100]) conseguiu reproduzir a situação do trabalho de Wernsdorfer. Xiangcon pôde verificar que ao variar a razão entre os eixos do elipsóide surgia uma alteração

significativa na curva  $H_{sw} \times \theta$  (Figura 40). A razão entre os eixos, denominada de fator de forma,  $m$ , é a razão  $m = c/a$ , onde  $c$  é o eixo do elipsóide na direção do nanofio e  $a$  é o eixo perpendicular ao nanofio. As curvas de Xiangcong mostraram que para valores em que o fator de forma,  $m$ , é superior a 1, ou seja, situação em que os elipsóides são prolatos, surgem os dois mínimos locais que Wernsdorfer observou.

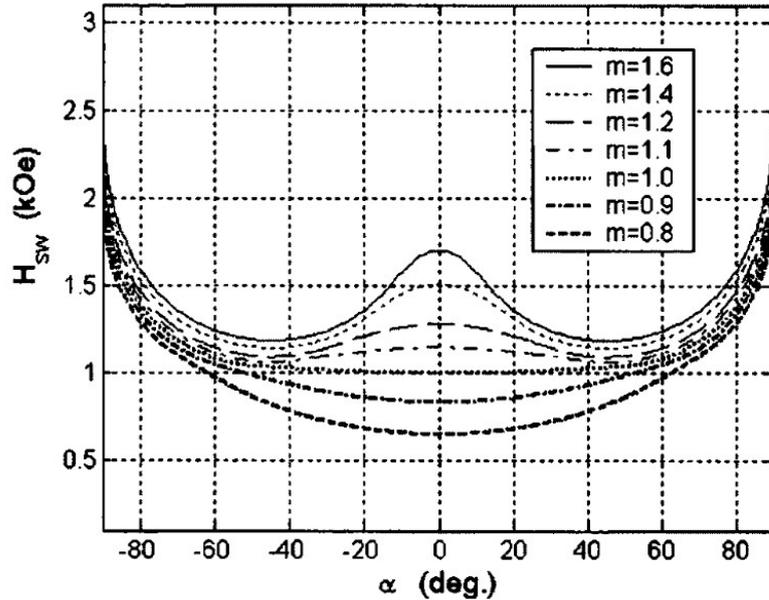


Figura 40 – Variação angular do campo de comutação para diferentes fatores de forma [15].

T. Hauet et al em [16] calcula a derivada dos ciclos de histerese para um sistema composto por multicamadas de Co/Pt nas temperaturas: 20 K, 100 K, 200K e 300K. Revelando nas curvas, uma característica de pico duplo, típico em reversões de duas etapas, também presente neste trabalho. Para as curvas de Hauet, presentes na Figura 41 essa característica revelou uma competição entre as interações dipolar forte e acoplamento de troca, confirmadas por imagens MFM (magnetic force microscopy).

Tendo em vista a importância do campo de comutação, aqui foram calculadas as curvas de distribuição de campos de comutação  $H_{sw}$  para  $\theta = 0$  em cada um dos arranjos simulados, a partir da derivada da curva de histerese onde foram obtidos os valores de  $H_{sw,máx}$ , valor do campo de comutação para o qual a derivada atingia o máximo.

A distribuição dos campos de comutação dos arranjos para  $\theta = 0$  são apresentadas nas figuras a seguir. Os primeiros gráficos são as distribuições de cada arranjo, onde a imagem da geometria está presente para relacionar a distribuição ao Arranjo. O último gráfico apresenta todas as distribuições juntas, onde em verde tem-se o Arranjo 1, em vermelho o Arranjo 2, em azul o Arranjo 3, em preto o Arranjo 4 e em rosa o Arranjo 5.

A derivada da histerese do Arranjo de cilindros (Figura 42), apresentou dois picos, sendo o máximo em  $H_{sw,máx} = -0.50$  Oe, outro pico foi observado em  $H_{sw} = -1.25$  Oe.

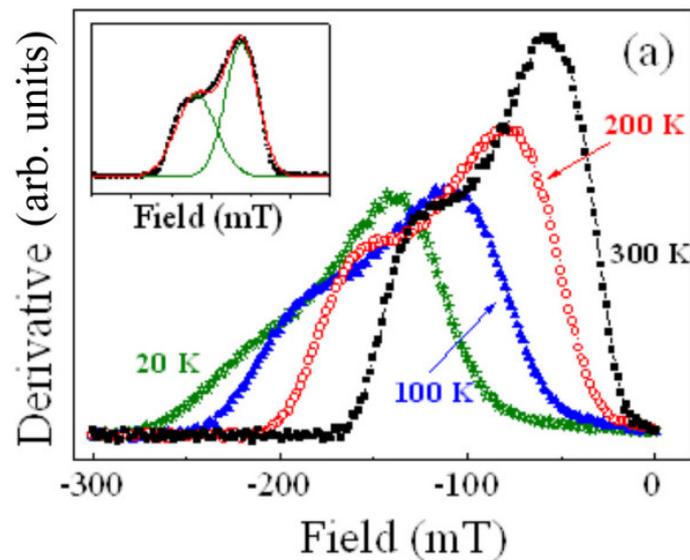


Figura 41 – Derivadas da histerese de multicamadas de Co/Pt em superfície com período de 100 nm a temperaturas variadas [16].

Dentre as derivadas realizadas, esse arranjo obteve o menor pico e uma das distribuições mais largas. O Arranjo 2, elipsóide único, obteve seu máximo em  $H_{sw,máx} = -1.38$  Oe e um máximo local em  $H_{sw,máx} = -2.89$ , sendo a curva com pico mais alto (Figura 43). Os Arranjos 3 e 4 apesar de suas geometrias serem muito parecidas obtiveram diferenças significativas. O Arranjo 3, Figura 44, apresentou um campo de comutação maior  $H_{sw,máx} = -0.75$  Oe enquanto o do Arranjo 4, Figura 45, foi de  $H_{sw,máx} = -0.50$ . Ambos apresentaram duplo pico, sendo o pico menor do Arranjo 3 mais afastado do pico máximo e com um valor  $H_{sw} = -1.25$  Oe  $< H_{sw,máx}$ . O segundo pico do Arranjo 4 dentre os arranjos foi o único com um valor superior a  $H_{sw,máx}$ , assumindo o valor:  $H_{sw} = -1.5077$  Oe. Por fim, o Arranjo 5, composto por uma cadeia de cuboctaedros apresentou uma distribuição com apenas um pico em  $H_{sw,máx} = -0.1257$  Oe (Figura 45).

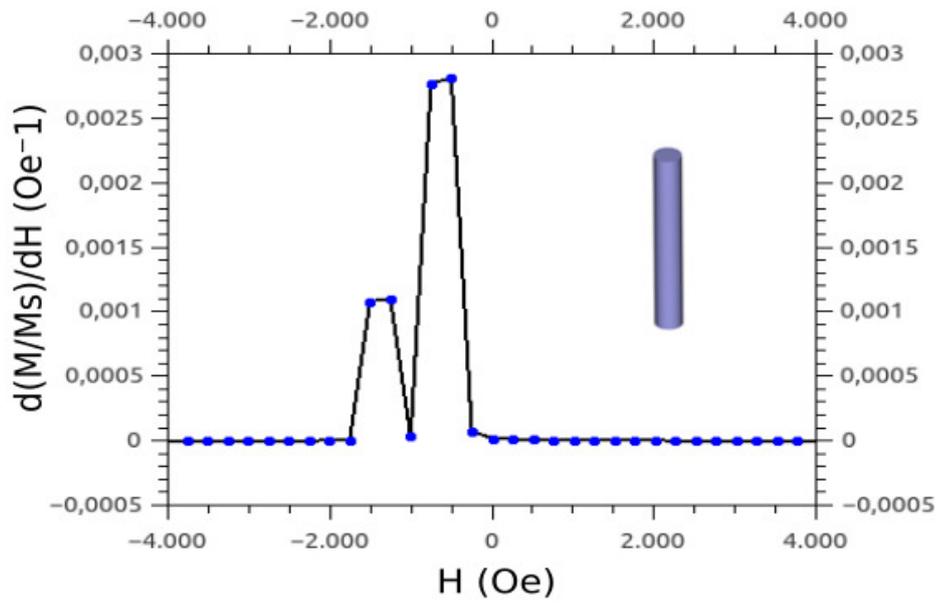


Figura 42 – Derivada da curva de histerese para o Arranjo de cilindros em  $\theta = 0^\circ$ .

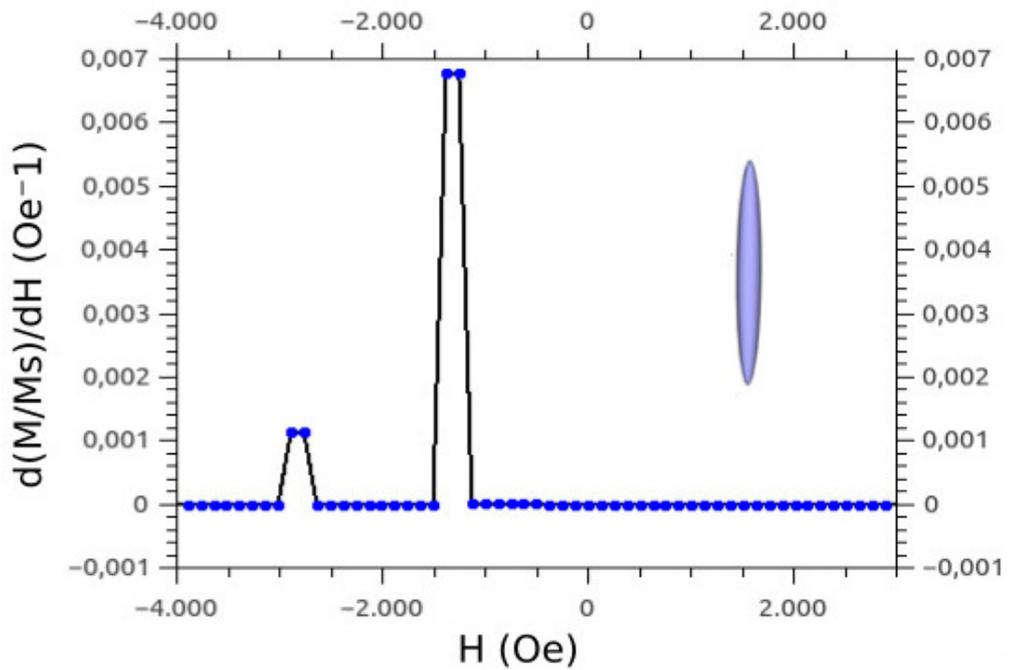


Figura 43 – Derivada da curva de histerese para o Arranjo de elipsóides longos em  $\theta = 0^\circ$ .

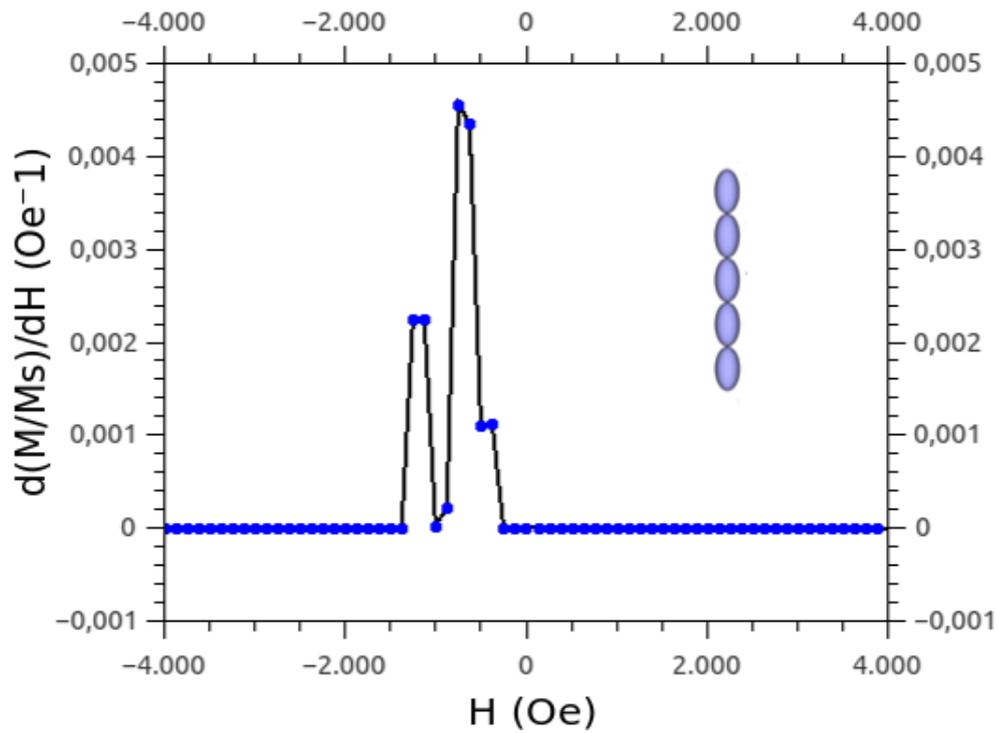


Figura 44 – Derivada da curva de histerese parao Arranjo de cadeias de elipsóides alinhados em  $\theta = 0^\circ$ .

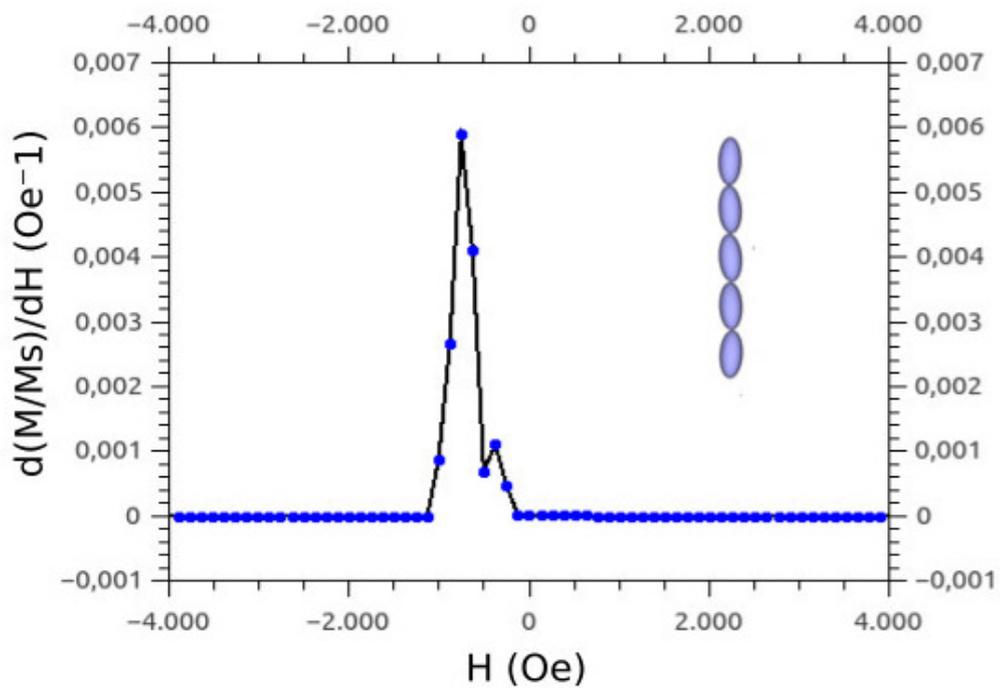


Figura 45 – Derivada da curva de histerese parao Arranjo de cadeias de elipsóides desalinhados em  $\theta = 0^\circ$ .

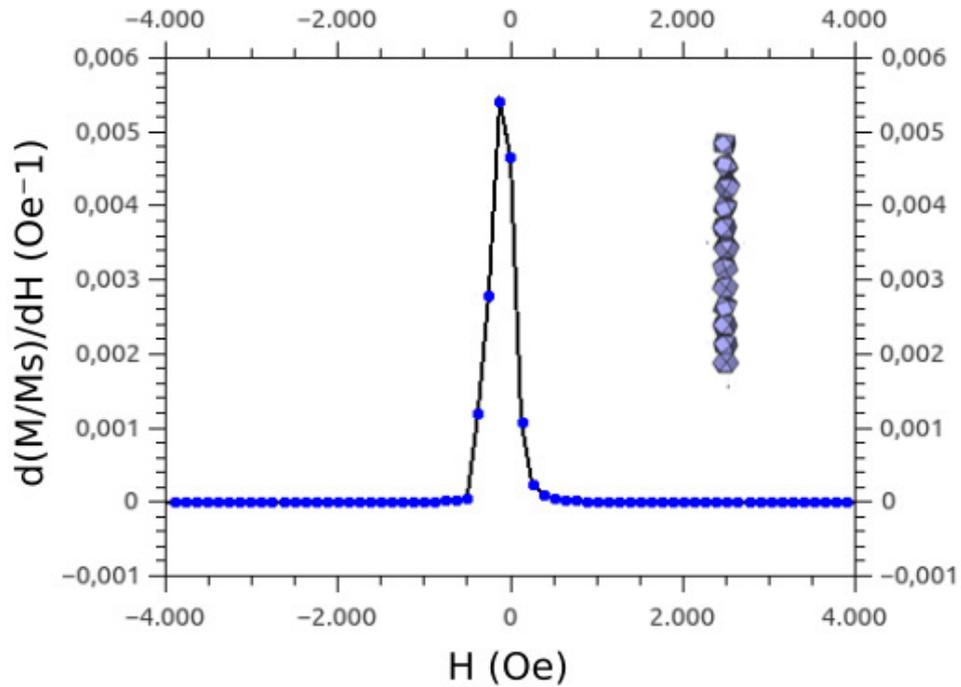


Figura 46 – Derivada da curva de histerese para o Arranjo de cuboctaedros em  $\theta = 0^\circ$ .

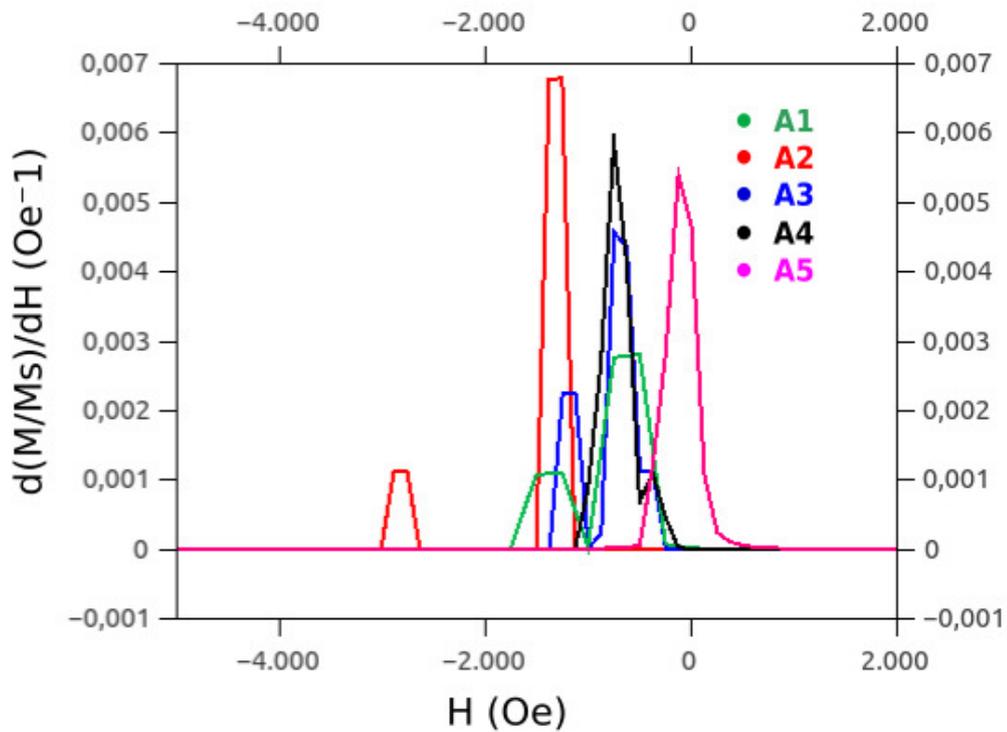


Figura 47 – Derivadas das curvas de histerese para todos os Arranjos em  $\theta = 0^\circ$ . Em que A1 representa o Arranjo 1, na curva verde; A2, o Arranjo 2 na curva vermelha; A3, o Arranjo 3 na curva azul; A4, o Arranjo 4 na curva preta; A5, o Arranjo 5 na curva rosa

## 5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O trabalho realizado teve como objetivo estudar a influência da geometria dos cristais dos nanofios de Ni nas propriedades magnéticas de nanofios. Para tal, foram comparados ciclos de histerese, coercividade, magnetização remanente e campos de comutação para arranjos com nanofios em formato de cilindros, elipsóides longos, cadeia de elipsóides alinhados e desalinhados e cadeia de cuboctaedros.

A partir das curvas de histerese a influência da geometria ficou bem evidenciada, sendo as curvas dos arranjos de cadeias de elipsóide bem mais estreitas que a dos arranjos de cilindro e elipsóide. Uma alteração mais brusca nos laços ocorreu no arranjo de cadeia de cuboctaedros. Não apresentando o formato retangular para  $\theta = 0$ , presente nos outros arranjos e no modelo de Stoner-Wohlfarth.

Na análise da coercividade, dentre os arranjos estudados, o arranjo de elipsóides longos foi o que apresentou uma curva que mais se assemelhou a curva do modo de reversão coerente. Os arranjos de cilindros e os dois arranjos com cadeias de elipsóides apesar de apresentarem decaimento a partir do ângulo de  $60^\circ$  (presente nas curvas do modelo de Stoner-Wohlfarth) apresentaram na região de ângulos pequenos uma relação de  $H_c$  com  $\theta$  que não era esperada pelos modelos. Para o arranjo de cuboctaedros não foi possível associar a variação angular da coercividade com nenhuma curva de reversão conhecida. Os valores de  $H_c$  em  $\theta = 0$  foram de 674.61 Oe, 1329.6 Oe, 707.77 Oe, 714.22 Oe, 90.506 Oe para os Arranjos 1, 2, 3, 4 e 5 respectivamente. Apesar das curvas de coercividade não se assemelharem bem aos modelos, se assemelharam bem as curvas geradas por experimentos com nanofios que tinha geometria parecida com as geometrias propostas aqui.

As curvas de magnetização remanente apresentaram poucas variações para os 4 primeiros arranjos, diferindo bastante no arranjo de cuboctaedros. Diferente os demais, no Arranjo 5 a relação da remanência com  $\theta$  não seguiu o modelo de Stoner-Wohlfarth. Situação já observada em experimentos realizados em nosso laboratório.

Por fim foram comparados os campos de comutação, onde se evidenciou curvas de dois picos para todos os arranjos exceto o de cuboctaedros. Indicando que a reversão se dá por duas etapas nos Arranjos 1, 2, 3 e 4.

Como perspectivas futuras sugerimos uma análise dos mapas de momento, a fim de observar a reversão de magnetização presente nos nanofios aqui simulados. Bem como a análise de nanofios compostos por uma cadeia de cuboctaedros para outros comprimentos e diâmetros.

## REFERÊNCIAS

- 1 NAPOLSKII, K. et al. Ordered arrays of ni magnetic nanowires: Synthesis and investigation. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Elsevier, v. 37, n. 1-2, p. 178–183, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 15.
- 2 ZIGHEM, F.; MERCONE, S. Magnetization reversal behavior in complex shaped co nanowires: A nanomagnet morphology optimization. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 116, n. 19, p. 193904, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 7, 15 e 16.
- 3 HOLANDA, J. et al. Effective surface anisotropy in polycrystalline ferromagnetic nanowires. *Journal of Alloys and Compounds*, Elsevier, v. 617, p. 639–641, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 7, 16 e 35.
- 4 FRANÇA, C. et al. Transmission electron microscopy as a realistic data source for the micromagnetic simulation of polycrystalline nickel nanowires. *Computational Materials Science*, Elsevier, v. 128, p. 42–44, 2017. Citado 13 vezes nas páginas 7, 8, 10, 11, 15, 16, 35, 36, 39, 59, 60, 61 e 62.
- 5 KNOBEL, M. et al. Superparamagnetism and other magnetic features in granular materials: a review on ideal and real systems. *Journal of nanoscience and nanotechnology*, American Scientific Publishers, v. 8, n. 6, p. 2836–2857, 2008. Citado 3 vezes nas páginas 7, 26 e 50.
- 6 CULLITY, B. D.; GRAHAM, C. D. *Introduction to magnetic materials*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011. Citado 4 vezes nas páginas 7, 18, 19 e 27.
- 7 HERTEL, R. Computational micromagnetism of magnetization processes in nickel nanowires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 249, n. 1-2, p. 251–256, 2002. Citado 9 vezes nas páginas 7, 9, 15, 16, 25, 28, 43, 44 e 51.
- 8 LAVIN, R. et al. Angular dependence of magnetic properties in ni nanowire arrays. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 106, n. 10, p. 103903, 2009. Citado 9 vezes nas páginas 7, 9, 27, 28, 30, 45, 46, 51 e 59.
- 9 LEBECKI, K. M. Magnetization reversal modeling for long ferromagnetic nanotubes. *Materials Science-Poland*, v. 26, n. 4, p. 983–988, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 31.
- 10 BOARDMAN, R. P. *Computer simulation studies of magnetic nanostructures*. Tese (Doutorado) — University of Southampton, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 34.
- 11 FUENTES, G. et al. Micromagnetic simulation and the angular dependence of coercivity and remanence for array of polycrystalline nickel nanowires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 423, p. 262–266, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 8, 35 e 36.
- 12 HERTEL, R. Micromagnetic simulations of magnetostatically coupled nickel nanowires. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 90, n. 11, p. 5752–5758, 2001. Citado 3 vezes nas páginas 9, 36 e 44.

- 13 HOLANDA, J. S. *O Modo Coerente Na Reversão da Magnetização de Arranjos de Nanofios Metálicos*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Pernambuco, 2014. Citado 10 vezes nas páginas 9, 10, 30, 50, 52, 53, 54, 55, 56 e 57.
- 14 WERNSDORFER, W. et al. Nucleation of magnetization reversal in individual nano-sized nickel wires. *Physical review letters*, APS, v. 77, n. 9, p. 1873, 1996. Citado 4 vezes nas páginas 11, 25, 62 e 63.
- 15 LU, X. et al. Chain of ellipsoids approach to the magnetic nanowire. *Journal of applied physics*, AIP, v. 97, n. 8, p. 084304, 2005. Citado 4 vezes nas páginas 11, 62, 63 e 64.
- 16 HAUET, T. et al. Reversal mechanism, switching field distribution, and dipolar frustrations in co/pt bit pattern media based on auto-assembled anodic alumina hexagonal nanobump arrays. *Physical Review B*, APS, v. 89, n. 17, p. 174421, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 11, 64 e 65.
- 17 PARK, M.-S. et al. Preparation and electrochemical properties of sno2 nanowires for application in lithium-ion batteries. *Angewandte Chemie International Edition*, Wiley Online Library, v. 46, n. 5, p. 750–753, 2007. Citado na página 14.
- 18 FERT, A. Nobel lecture: Origin, development, and future of spintronics. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 80, n. 4, p. 1517, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 62.
- 19 HRKAC, G.; DEAN, J.; ALLWOOD, D. Nanowire spintronics for storage class memories and logic. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society Publishing, v. 369, n. 1948, p. 3214–3228, 2011. Citado na página 14.
- 20 ZHANG, H. et al. Growth mechanism and magnetic properties of co nanowire arrays by ac electrodeposition. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 468, p. 188–192, 2018. Citado na página 14.
- 21 XING, J. et al. Antimicrobial peptide functionalized conductive nanowire array electrode as a promising candidate for bacterial environment application. *Advanced Functional Materials*, Wiley Online Library, p. 1806353, 2019. Citado na página 14.
- 22 LI, Y. et al. Biodegradable thermal imaging-tracked ultralong nanowire-reinforced conductive nanocomposites elastomers with intrinsical efficient antibacterial and anticancer activity for enhanced biomedical application potential. *Biomaterials*, Elsevier, v. 201, p. 68–76, 2019. Citado na página 14.
- 23 MASUDA, M.; SHIOMI, S.; SHIRAKI, M. Magnetostatic perpendicular anisotropy in iron films with columnar structure. *Japanese journal of applied physics*, IOP Publishing, v. 26, n. 10R, p. 1680, 1987. Citado na página 14.
- 24 WHITNEY, T. et al. Fabrication and magnetic properties of arrays of metallic nanowires. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 261, n. 5126, p. 1316–1319, 1993. Citado na página 14.
- 25 SCHWANBECK, H.; SCHMIDT, U. Preparation and characterisation of magnetic nanostructures using filtration membranes. *Electrochimica Acta*, Elsevier, v. 45, n. 27, p. 4389–4398, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 50.

- 26 ESCRIG, J. et al. Geometry dependence of coercivity in ni nanowire arrays. *Nanotechnology*, IOP Publishing, v. 19, n. 7, p. 075713, 2008. Citado na página 14.
- 27 FAN, H. J.; WERNER, P.; ZACHARIAS, M. Semiconductor nanowires: from self-organization to patterned growth. *small*, Wiley Online Library, v. 2, n. 6, p. 700–717, 2006. Citado na página 14.
- 28 DONG, L.; CHU, Y.; ZHANG, Y. Microemulsion-mediated solvothermal synthesis of zns nanowires. *Materials Letters*, Elsevier, v. 61, n. 23-24, p. 4651–4654, 2007. Citado na página 14.
- 29 SCHUBERT, L. et al. Silicon nanowhiskers grown on < 111 > si substrates by molecular-beam epitaxy. *Applied Physics Letters*, AIP, v. 84, n. 24, p. 4968–4970, 2004. Citado na página 14.
- 30 WU, G. et al. Controlled synthesis of zno nanowires or nanotubes via sol–gel template process. *Solid State Communications*, Elsevier, v. 134, n. 7, p. 485–489, 2005. Citado na página 14.
- 31 XU, D. et al. Preparation of cds single-crystal nanowires by electrochemically induced deposition. *Advanced Materials*, Wiley Online Library, v. 12, n. 7, p. 520–522, 2000. Citado na página 14.
- 32 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. Citado na página 14.
- 33 SAEDI, A.; GHORBANI, M. Electrodeposition of ni–fe–co alloy nanowire in modified aao template. *Materials Chemistry and Physics*, Elsevier, v. 91, n. 2-3, p. 417–423, 2005. Citado na página 14.
- 34 NIELSCH, K. et al. Hexagonally ordered 100 nm period nickel nanowire arrays. *Applied Physics Letters*, AIP, v. 79, n. 9, p. 1360–1362, 2001. Citado 6 vezes nas páginas 14, 30, 36, 46, 47 e 51.
- 35 KRÖLL, M. et al. Magnetic properties of ferromagnetic nanowires embedded in nanoporous alumina membranes. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 249, n. 1-2, p. 241–245, 2002. Citado na página 14.
- 36 ZHENG, M. et al. Magnetic hysteresis of ni nanowires. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 12, n. 30, p. L497, 2000. Citado na página 14.
- 37 RAPOSO, V. et al. Long-range magnetostatic interactions in arrays of nanowires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 222, n. 1-2, p. 227–232, 2000. Citado na página 14.
- 38 HAN, X. et al. Influence of crystal orientation on magnetic properties of hcp co nanowire arrays. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 42, n. 9, p. 095005, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 14, 31 e 50.
- 39 SHARMA, S. et al. Structural and magnetic properties of electrodeposited cobalt nanowire arrays. *Solid State Communications*, Elsevier, v. 149, n. 39-40, p. 1650–1653, 2009. Citado na página 14.

- 40 FERGUSON, C.; MACLAREN, D.; MCVITIE, S. Metastable magnetic domain walls in cylindrical nanowires. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 381, p. 457–462, 2015. Citado na página 14.
- 41 DMYTRIIEV, O. et al. Static and dynamic magnetic properties of densely packed magnetic nanowire arrays. *Physical Review B*, APS, v. 87, n. 17, p. 174429, 2013. Citado na página 14.
- 42 ZHANG, S. F. et al. Highly efficient domain walls injection in perpendicular magnetic anisotropy nanowire. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 6, p. 24804, 2016. Citado na página 14.
- 43 CHUI, C.; MA, F.; ZHOU, Y. Geometrical and physical conditions for skyrmion stability in a nanowire. *AIP Advances*, AIP Publishing, v. 5, n. 4, p. 047141, 2015. Citado na página 14.
- 44 IVANOV, Y. P.; VÁZQUEZ, M.; CHUBYKALO-FESENKO, O. Magnetic reversal modes in cylindrical nanowires. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 46, n. 48, p. 485001, 2013. Citado na página 14.
- 45 WARTELLE, A. et al. Bloch-point-mediated topological transformations of magnetic domain walls in cylindrical nanowires. *Physical Review B*, APS, v. 99, n. 2, p. 024433, 2019. Citado na página 14.
- 46 WEGROWE, J. et al. Magnetoresistance of ferromagnetic nanowires. *Physical review letters*, APS, v. 82, n. 18, p. 3681, 1999. Citado na página 14.
- 47 LI, H. et al. Magnetic properties and magnetization reversal in co nanowires with different morphology. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 469, p. 203–210, 2019. Citado na página 15.
- 48 MERCONE, S. et al. Morphology control of the magnetization reversal mechanism in co80ni20 nanomagnets. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 117, n. 20, p. 203905, 2015. Citado na página 15.
- 49 WU, S. et al. Bioel nano/microstructures on substrates: Synthesis and photocatalytic properties. *Materials Letters*, Elsevier, v. 65, n. 9, p. 1344–1347, 2011. Citado na página 16.
- 50 BERTOTTI, G. *Hysteresis in magnetism: for physicists, materials scientists, and engineers*. [S.l.]: Academic press, 1998. Citado na página 18.
- 51 MORRISH, A. H. The physical principles of magnetism. *The Physical Principles of Magnetism, by Allan H. Morrish, pp. 696. ISBN 0-7803-6029-X. Wiley-VCH, January 2001.*, p. 696, 2001. Citado na página 18.
- 52 MIKHAIL, O. et al. The measurement of persistence and hysteresis in aggregate unemployment. *University of Central Florida, Orlando, <http://econwpa.repec.org/eps/mhet/papers/0311/0311002.pdf>.(02.07. 2016)*, 2003. Citado na página 18.
- 53 KRONMÜLLER, H.; PARKIN, S. *Handbook of magnetism and advanced magnetic materials. Vol 2: micromagnetism*. [S.l.]: Wiley, 2007. Citado na página 19.

- 54 KITTEL, C.; GALT, J. Ferromagnetic domain theory. In: *Solid state physics*. [S.l.]: Elsevier, 1956. v. 3, p. 437–564. Citado na página 19.
- 55 HUBERT, A.; SCHÄFER, R. *Magnetic domains: the analysis of magnetic microstructures*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2008. Citado 4 vezes nas páginas 19, 22, 29 e 32.
- 56 SUN, L. et al. Tuning the properties of magnetic nanowires. *IBM Journal of Research and Development*, IBM, v. 49, n. 1, p. 79–102, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 50.
- 57 GUIMARÃES, A. P.; GUIMARAES, A. P. *Principles of nanomagnetism*. [S.l.]: Springer, 2009. v. 7. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 29.
- 58 MIDDELHOEK, S. Domain walls in thin ni–fe films. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 34, n. 4, p. 1054–1059, 1963. Citado na página 22.
- 59 COEY, J. M. *Magnetism and magnetic materials*. [S.l.]: Cambridge university press, 2010. Citado na página 22.
- 60 ROBERT, C. O.; HANDLEY, O. Modern magnetic materials: principles and applications. *Ed. John Wiley & Sons, Inc., New York*, 2000. Citado na página 23.
- 61 GETZLAFF, M. *Fundamentals of magnetism*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007. Citado na página 24.
- 62 VEGA, V. et al. Torque magnetometry analysis of magnetic anisotropy distribution in ni nanowire arrays. *physica status solidi (a)*, Wiley Online Library, v. 208, n. 3, p. 553–558, 2011. Citado 4 vezes nas páginas 24, 47, 50 e 51.
- 63 TANG, X.-T.; WANG, G.-C.; SHIMA, M. Magnetic layer thickness dependence of magnetization reversal in electrodeposited coni/cu multilayer nanowires. *Journal of magnetism and magnetic materials*, Elsevier, v. 309, n. 2, p. 188–196, 2007. Citado na página 25.
- 64 STONER, E. C.; WOHLFARTH, E. A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, The Royal Society London, v. 240, n. 826, p. 599–642, 1948. Citado 3 vezes nas páginas 25, 30 e 48.
- 65 AHARONI, A. et al. *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*. [S.l.]: Clarendon Press, 2000. v. 109. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 29.
- 66 LANDEROS, P. et al. Reversal modes in magnetic nanotubes. *Applied Physics Letters*, AIP, v. 90, n. 10, p. 102501, 2007. Citado na página 27.
- 67 AHARONI, A. Angular dependence of nucleation by curling in a prolate spheroid. *Journal of applied physics*, AIP, v. 82, n. 3, p. 1281–1287, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 30.
- 68 CAMPOS, C. L. d. A. V. *Propriedades magnéticas de arranjos de nanofios de níquel eletrodepositados em membranas porosas de óxido de alumínio*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Pernambuco, 2016. Citado na página 30.

- 69 HAN, G. et al. Angular dependence of the coercivity and remanence of ferromagnetic nanowire arrays. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 93, n. 11, p. 9202–9207, 2003. Citado na página 30.
- 70 FREI, E.; SHTRIKMAN, S.; TREVES, D. Critical size and nucleation field of ideal ferromagnetic particles. *Physical Review*, APS, v. 106, n. 3, p. 446, 1957. Citado na página 30.
- 71 SKOMSKI, R. et al. Magnetic localization in transition-metal nanowires. *Physical Review B*, APS, v. 62, n. 6, p. 3900, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 31, 35 e 36.
- 72 SKOMSKI, R.; CHIPARA, M.; SELLMYER, D. J. Spin-wave modes in magnetic nanowires. *Journal of applied physics*, AIP, v. 93, n. 10, p. 7604–7606, 2003. Citado na página 31.
- 73 HERNÁNDEZ, E. P. Características microestruturas e propriedades magnéticas de arranjos de nanofios magnéticos. Universidade Federal de Pernambuco, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 32.
- 74 NETZELMANN, U. Ferromagnetic resonance of particulate magnetic recording tapes. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 68, n. 4, p. 1800–1807, 1990. Citado na página 31.
- 75 ENCINAS-OROPESA, A. et al. Dipolar interactions in arrays of nickel nanowires studied by ferromagnetic resonance. *Physical Review B*, APS, v. 63, n. 10, p. 104415, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 47.
- 76 LAKSHMANAN, M. The fascinating world of the landau–lifshitz–gilbert equation: an overview. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society Publishing, v. 369, n. 1939, p. 1280–1300, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 33.
- 77 GILBERT, T. L. A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. *IEEE Transactions on Magnetics*, IEEE, v. 40, n. 6, p. 3443–3449, 2004. Citado na página 33.
- 78 KNITTEL, A. *Micromagnetic simulations of three dimensional core-shell nanostructures*. Tese (Doutorado) — University of Southampton, 2011. Citado na página 33.
- 79 DONAHUE, M. J.; PORTER, D. G. *OOMMF User's guide*. [S.l.]: US Department of Commerce, Technology Administration, National Institute of . . . , 1999. Citado na página 34.
- 80 VANSTEENKISTE, A.; WIELE, B. Van de. Mumax: A new high-performance micro-magnetic simulation tool. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 323, n. 21, p. 2585–2591, 2011. Citado na página 34.
- 81 FANGOHR, H. et al. Nmag user manual. *Release 0.2*, v. 1, 2012. Citado na página 34.
- 82 FANGOHR, H.; ALBERT, M.; FRANCHIN, M. Nmag micromagnetic simulation tool—software engineering lessons learned. In: IEEE. *2016 IEEE/ACM International Workshop on Software Engineering for Science (SE4Science)*. [S.l.], 2016. p. 1–7. Citado na página 34.

- 83 ZIGHEM, F. et al. Dipolar interactions in arrays of ferromagnetic nanowires: A micromagnetic study. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 109, n. 1, p. 013910, 2011. Citado na página 34.
- 84 YANG, H.; ZENG, M.; YU, R. Magnetic properties of the nixco<sub>1-x</sub>/cu multilayer nanowires. *Materials Research Bulletin*, Elsevier, v. 57, p. 249–253, 2014. Citado na página 34.
- 85 VIAU, G. et al. Highly crystalline cobalt nanowires with high coercivity prepared by soft chemistry. *physica status solidi (a)*, Wiley Online Library, v. 206, n. 4, p. 663–666, 2009. Citado na página 34.
- 86 ELBAILE, L. et al. Magnetic behavior in arrays of ni<sub>79</sub>fe<sub>21</sub> and ni<sub>79</sub>fe<sub>21</sub>/cu nanowires. *Journal of Alloys and Compounds*, Elsevier, v. 536, p. S359–S364, 2012. Citado na página 34.
- 87 HERNÁNDEZ, E. P.; REZENDE, S.; AZEVEDO, A. Effective field investigation in arrays of polycrystalline ferromagnetic nanowires. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 103, n. 7, p. 07D506, 2008. Citado na página 35.
- 88 HINZKE, D.; NOWAK, U. Magnetization switching in nanowires: Monte carlo study with fast fourier transformation for dipolar fields. *Journal of magnetism and magnetic materials*, Elsevier, v. 221, n. 3, p. 365–372, 2000. Citado na página 35.
- 89 SEBERINO, C.; BERTRAM, H. N. Numerical study of hysteresis and morphology in elongated tape particles. *Journal of applied physics*, AIP, v. 85, n. 8, p. 5543–5545, 1999. Citado na página 35.
- 90 FERRÉ, R. et al. Magnetization processes in nickel and cobalt electrodeposited nanowires. *Physical Review B*, APS, v. 56, n. 21, p. 14066, 1997. Citado na página 35.
- 91 PIGNARD, S. et al. Study of the magnetization reversal in individual nickel nanowires. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 87, n. 2, p. 824–829, 2000. Citado na página 36.
- 92 SCHÖBERL, J. Netgen–4. x. *RWTH Aachen University, Germany*, 2009. Citado na página 39.
- 93 FISCHBACHER, T. et al. A systematic approach to multiphysics extensions of finite-element-based micromagnetic simulations: Nmag. *IEEE Transactions on Magnetics*, IEEE, v. 43, n. 6, p. 2896–2898, 2007. Citado na página 39.
- 94 GUERRA, Y.; PEÑA-GARCIA, R.; PADRÓN-HERNÁNDEZ, E. Magnetic reversion in real nickel and cobalt nanowires and the angular dependence of coercivity. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 452, p. 17–22, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 59.
- 95 FANGOHR, H. et al. Nmag user manual (0.1 beta version). *Simulation*, v. 4, p. 1. Citado na página 41.
- 96 SCHULTZ, L. *Supermagnets, Hard Magnetic Materials*, edited by GJ Long and F. Grandjean. [S.l.]: Kluwer Academic, The Netherlands, 1991. Citado na página 47.

- 97 TANNOUS, C.; GIERALTOWSKI, J. The stoner–wohlfarth model of ferromagnetism. *European journal of physics*, IOP Publishing, v. 29, n. 3, p. 475, 2008. Citado na página 50.
- 98 SELLMYER, D. J.; ZHENG, M.; SKOMSKI, R. Magnetism of fe, co and ni nanowires in self-assembled arrays. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 13, n. 25, p. R433, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 50 e 51.
- 99 OSBORN, J. A. Demagnetizing factors of the general ellipsoid. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 67, p. 351–357, Jun 1945. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.67.351>>. Citado na página 48.
- 100 SHOMBERT, H. H. *Simulação micromagnética para o estudo dos efeitos de rugosidade em nanofios de níquel*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Pernambuco, 2015. Citado na página 63.