

**UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO GRANDE DO NORTE  
CAMPUS DE NATAL  
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO  
CURSO CIÊNCIA E TECNOLOGIA**

**RENATA STHEFÂNIA DE ARAÚJO SILVA**

**NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS NA TECNOLOGIA DE GRAVAÇÃO  
MAGNÉTICA**

**NATAL/RN**

**2016**

**RENATA STHEFÂNIA DE ARAÚJO SILVA**

**NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS NA TECNOLOGIA DE GRAVAÇÃO  
MAGNÉTICA**

Monografia apresentada ao Curso de  
Ciência e Tecnologia da Universidade  
do Estado do Rio Grande do Norte,  
como requisito obrigatório para a  
obtenção do Grau de Bacharel em  
Ciência e Tecnologia.

ORIENTADORA: Profa. Dra. Ana Lúcia  
Dantas  
CO-ORIENTADOR: Leonardo Linhares  
Oliveira

**NATAL/RN**

**2016**

**Catálogo da Publicação na Fonte.**  
**Universidade do Estado do Rio Grande do Norte.**

Silva, Renata Sthefânia De Araújo

Nanopartículas Magnéticas Na Tecnologia De Gravação Magnética. / Renata Sthefânia De Araújo Silva – Natal, RN, 2016.

*45 f.*

Orientador (a): Prof. Dra. Ana Lúcia Dantas

Co-orientação: Prof. Leonardo Linhares Oliveira

Monografia (Bacharelado) Universidade do Estado do Rio Grande do Norte. Curso de Ciência e Tecnologia.

1. Nanopartículas magnéticas. 2. Tecnologia De Gravação. 3. Simulação micromagnética. I. Dantas, Ana Lúcia. II. Universidade do Estado do Rio Grande do Norte. III. Título.

**RENATA STHEFÂNIA DE ARAÚJO SILVA**

**NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS NA TECNOLOGIA DE GRAVAÇÃO  
MAGNÉTICA**

Monografia apresentada ao Curso de  
Ciência e Tecnologia da Universidade  
do Estado do Rio Grande do Norte,  
como requisito obrigatório para a  
obtenção do Grau de Bacharel em  
Ciência e Tecnologia.

ORIENTADORA: Profa. Dra. Ana Lúcia  
Dantas

CO-ORIENTADOR: Leonardo Linhares  
Oliveira

Aprovado em: \_\_/\_\_/\_\_.

Banca Examinadora

---

Profa. Dra. Ana Lúcia Dantas  
Universidade do Estado do Rio Grande do Norte

---

Leonardo Linhares Oliveira  
Universidade Federal do Estado do Rio Grande do Norte

---

Profa. Dra. Andréa Jane da Silva  
Universidade do Estado do Rio Grande do Norte

A toda a minha família e ao meu namorado, por sempre confiarem em mim. Amo muito vocês.

## AGRADECIMENTOS

A Deus.

A minha orientadora e professora, Ana Lúcia Dantas, por sempre ter estado à disposição para ajudar, por ter confiado em mim ao me chamar para ser sua aluna de Iniciação Científica, oportunidade em que pude aprender muito; por suas palavras de motivação e pela confiança em minha capacidade, mesmo quando eu não a tinha.

A todos os meus professores, que contribuíram muito para minha formação.

A minha mãe, Maria Jailma de Araújo Silva e minha avó, Maria do Céu Rodrigues de Araújo, por sempre se preocuparem quando os desafios dessa jornada me entristeciam. Vocês são as mulheres mais importantes da minha vida.

A minha família, por sempre acreditar na minha capacidade e por me ajudar por muitas vezes quando precisei. Amo todos vocês.

Ao meu namorado, Tácio Moreira da Silva, que chegou na metade dessa jornada, mas que me ajudou muito com suas palavras de carinho, amor e confiança, mostrando-me muitas vezes o quanto eu era capaz. Muito bom ter você.

A Leonardo Linhares, por sempre ter se mostrado à disposição para me ajudar, mesmo com sua vida corrida.

Aos meus colegas, Janiele Andrade e Andrielison Cleiton, por sempre acreditarem em mim e pela convivência amigável diária. Tenho certeza que vocês vão chegar longe, acredite em vocês. Que Deus nos abençoe nessa nova jornada que vai se iniciar e que possamos manter contato sempre.

## RESUMO

O controle atual das técnicas de crescimento de materiais e a descoberta de novas propriedades de nanopartículas magnéticas tem pautado a revolução na tecnologia de gravação magnética. A busca da estabilização de nanopartículas tem dado origem a diversas alternativas para o aumento da densidade de gravação magnética, podendo as propriedades serem controladas e projetadas previamente. Uma das propostas para aumentar a densidade de gravação é o arranjo de nanopartículas magnéticas. Nesse contexto, é importante que o campo de fuga de uma nanopartícula não interfira no estado magnético da partícula vizinha. O presente trabalho tem como objetivo descrever a distribuição do campo dipolar em torno da vizinhança de nanopartículas magnéticas, para saber a qual distância uma pode ficar de outra sem que haja interferência de campos. Consideramos nanopartículas cilíndricas de ferro e permalloy com seções circulares e elípticas. Foi feito um estudo baseado na teoria de simulação micromagnética. Um algoritmo é implementado em Fortran, linguagem de programação estruturada, que trabalha na plataforma do Microsoft Visual Studio 2013 e utilizou-se o compilador Intel Fortran 2013 XE, respectivamente. Os resultados são apresentados por meio do software Originlab 9.0 em curvas numéricas e em mapas de vetores dos momentos magnéticos. Nossos resultados indicam que o campo dipolar da nanopartícula sobre si mesma é relativamente alto. Todavia, há um forte gradiente de campo magnético numa região muito próxima da partícula que mostram que a região de decaimento do campo é em função do tamanho e da fase magnética da nanopartícula. Em caso de vórtices magnéticos, o campo dipolar é intenso dentro da nanopartícula, mas ele decai muito rapidamente em sua volta.

**Palavras-chave:** Nanopartículas. Campo Dipolar Magnético. Gravação Magnética.

## ABSTRACT

The Current Control of materials growth techniques and the discovery of new properties of magnetic nanoparticles caused revolution in magnetic recording technology. The search stabilizing nanoparticles have given one source several alternatives for increasing the magnetic recording density, such properties can be controlled and designed in advance. One of suggestions to increasing the recording density is the arrangement of magnetic nanoparticles. In this context, is important que the escape field of one nanoparticle not interfere with the magnetic state of the neighbor particle. The present article have a objective to describe the field distribution dipolar around the neighborhood of magnetic nanoparticles, to know the limit of distance can one particle stay of another without interference fields. We consider iron and permalloycylindricals nanoparticles with circular and elliptical sections. It was made a study based on simulation micromagnética theory. An algorithm is implemented in Fortran programming language structured, which works in Microsoft Visual Studio 2013 platform and used the Intel Fortran Compiler XE 2013. The results are presented through Software OriginLab 9.0 in numerical curves and vector maps of the magnetic moments. Our results indicate that the dipolar field of nanoparticle on itself is relatively high. However, there is a strong magnetic field gradient in a region very near of particle that show of the decay's region of the field is a fuction of the size and magnetic phase of the nanoparticle. In case of magnetic vortices, the dipolar field is intense inside the nanoparticle, but it decays very quickly in its turn.

**Key-words:** Nanoparticles. Dipolar magnetic field. Recordingmagnetic.



## LISTA DE FIGURAS

2.1 – Dispositivo de gravação magnética. (a) Multicamada magnética que compõe o sensor de leitura. (b) ampliação esquemática do meio de gravação.....	16
2.2 - Figura esquemática de uma matriz de dots.....	17
2.3 - Figura esquemática da representação atômica, e do sistema magnético estudado neste trabalho.....	18
2.4 - Figura esquemática mostrando o perfil de cada termo do campo magnético local que atua em cada célula e devido a cada célula. ....	24
3.1 - Figura esquemática de uma partícula cúbica com aresta $d = 100\text{nm}$ dividida em células cúbicas com aresta $25\text{nm}$ . ....	25
3.2 - Fluxograma do método auto consistente apresentado em nossas simulações.	27
3.3 - Figura esquemática de uma nanopartícula cilíndrica com seção circular. ....	29
3.4 - Figura esquemática de uma nanopartícula cilíndrica com seção elíptica. ....	29
3.5 - Exemplo de Fase Magnética uniforme para uma nanopartícula elíptica de ferro com dimensões $a = 55\text{ nm}$ , $b = 255\text{ nm}$ e $h = 10\text{ nm}$ . ....	31
3.6 - Exemplo de Fase Magnética C para uma nanopartícula circular de permalloy com dimensões $D = 105\text{ nm}$ e $h = 10\text{ nm}$ .....	32
3.7 - Exemplo de Fase Magnética Vórtice no Plano para uma nanopartícula elíptica de ferro com dimensões $a = 105\text{ nm}$ , $b = 155\text{ nm}$ e $h = 10\text{ nm}$ .....	33

3.8 -Nanopartícula cilíndrica com seção circular do permalloy com 255 nm de diâmetro e 10 nm de altura. ....	34
3.9 - Curva do campo dipolar em função da distância em torno da nanopartícula...	35
3.10 -Nanopartícula cilíndrica com seção circular de ferro com 255 nm de diâmetro e 10 nm de altura.....	36
3.11 - Curva do campo dipolar em função da distância em torno da nanopartícula.	37
3.12 -Nanopartícula cilíndrica com seção elíptica do permalloy com $a = 155$ nm, $b = 55$ nm e $h = 10$ nm.....	38
3.13 - Curva do campo dipolar em função da distância em torno da nanopartícula.	39
3.14 -Nanopartícula cilíndrica com seção elíptica de ferro com $a = 155$ nm, $b = 55$ nm e $h = 10$ nm. ....	40
3.15 - Curva do campo dipolar em função da distância em torno da nanopartícula.	41

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b> .....	11
<b>2 NANOESTRUTURAS MAGNÉTICAS</b> .....	14
2.1 ENERGIAS MAGNÉTICAS E CAMPOS MAGNÉTICOS .....	17
2.2 ENERGIAS MAGNÉTICAS POR CÉLULAS .....	19
<b>2.2.1 Energia de Troca</b> .....	19
<b>2.2.2 Energia Zeeman</b> .....	20
<b>2.2.3 Energia de Anisotropia</b> .....	20
<b>2.2.4 Energia Dipolar</b> .....	20
2.3 CAMPO MAGNÉTICO LOCAL SOBRE CÉLULAS .....	21
<b>2.3.1 Campo de Troca</b> .....	21
<b>2.3.2 Campo Zeeman</b> .....	22
<b>2.3.3 Campo de Anisotropia</b> .....	22
<b>2.3.4 Campo Dipolar</b> .....	23
<b>3 NANOPARTÍCULAS CILÍNDRICAS COM SEÇÕES CIRCULARES E ELÍPTICAS</b> .....	26
3.1 CÁLCULO AUTO-CONSISTENTE .....	26
3.2 FASES MAGNÉTICAS DAS NANOPARTÍCULAS .....	31
<b>3.2.1 Fase Uniforme</b> .....	31
<b>3.2.2 Estado <math>c</math> no plano</b> .....	33
<b>3.2.3 Fase Vórtice no Plano</b> .....	34
3.3 RESULTADOS E DISCUSSÃO .....	35
<b>3.3.1 Nanopartículas Circulares</b> .....	35
<b>3.3.2 Nanopartículas Elípticas</b> .....	39
<b>4 CONCLUSÕES</b> .....	43
<b>REFERÊNCIAS</b> .....	44

## 1 INTRODUÇÃO

O nanomagnetismo é uma área de pesquisa da Física que estuda os sistemas magnéticos em escalas nanoscópica e macroscópica. “O nanomagnetismo engloba o estudo das propriedades e aplicações do magnetismo de nanopartículas isoladas, nanofios, filmes finos e multicamadas, e amostras magnéticas volumosas que incorporam partículas nanoscópicas” (GUIMARÃES, 2006, p.1). Trata da manipulação e estudo de pequenos objetos magnéticos em escalas que variam da escala atômica até algumas centenas de nanômetros, sendo o nanômetro ( $10^{-9}\text{m}$ ) seu tamanho característico.

O estudo dos sistemas magnéticos abrange diversas áreas e possuem várias aplicações importantes na vida do homem, dentre as quais se destacam a gravação magnética, memórias magnéticas e cabeçotes de leitura magnética, sempre indo em busca de aumentar a densidade da gravação em um espaço cada vez menor. As principais características dos meios magnéticos para gravação são: a não volatilidade, o rápido acesso e a grande capacidade de armazenamento.

Atualmente, mais de um bilhão de cabeças de leitura, que são usadas para ler e gravar os dados nos discos, são produzidas a cada ano. Além das aplicações usuais de gravação magnética em discos rígidos de computadores pessoais, *laptops* ou servidores, a redução em suas dimensões físicas (uma polegada) tem permitido a introdução de unidades de gravação em novos produtos de consumo eletrônicos, comocâmeras, MP3, filmadoras, etc.

Em meados do século XX, o físico Richard Feynman chamou a atenção da comunidade científica afirmando que era possível estocar uma grande quantidade de informação em um espaço muito pequeno (DANTAS, 2008). Diante dessa afirmação, tanto a comunidade científica quanto a indústria investiram na pesquisa sobre como identificar essa miniaturização. Nesse contexto, é importante estudar os efeitos do campo dipolar magnético no entorno de partículas nanométricas de modo a colocar a máxima quantidade possível delas em uma área cada vez menor.

Embora a gravação magnética seja uma tecnologia utilizada há mais de 40 anos, o avanço da indústria de informática está exigindo dos pesquisadores um contínuo avanço na direção de se obter dispositivos com grande densidade de gravação e tempos de acesso cada vez menores. Nesse sentido, o estudo das

nanopartículas magnéticas na tecnologia de gravação magnética é uma forma de buscar o aumento da densidade de gravação.

Face à busca do estudo da gravação magnética em tempos de acesso cada vez menores, definiu-se neste estudo o seguinte objetivo: descrever a distribuição do campo dipolar no entorno da vizinhança de nanopartículas magnéticas cilíndricas com seções circulares e elípticas.

As fases magnéticas de sistemas magnéticos nanoestruturados são função da energia dipolar. Segundo a literatura básica, a energia dipolar é de longo alcance, o que significa que todas as variáveis do sistema estão acopladas (GRIFFITHS, 2011). Nesse caso, torna-se impossível resolver o sistema analiticamente. Sendo assim, fizemos um estudo numérico das fases magnéticas. De acordo com Lanches (2007, p.2):

Método Numérico é um algoritmo composto por um número finito de operações envolvendo apenas números (operações aritméticas elementares, cálculo de funções, consulta a uma tabela de valores, consulta a um gráfico, arbitramento de um valor, etc.).

A metodologia utilizada para a descrição das fases magnéticas de nanopartículas é baseada na teoria do micromagnetismo. Dessa forma, a descrição das fases magnéticas desse sistema demanda por uma simulação numérica, de alta complexidade computacional e é resolvida por meio do método autoconsistente. Tal método consiste em quantificar o campo médio local devido à anisotropia, interação magnética de primeiros vizinhos, a um campo externo aplicado e, finalmente, devido à interação dipolar.

Foram simuladas e analisadas nanopartículas cilíndricas com seções elípticas e circulares levando em consideração os materiais de Ferro e Permalloy. Os metais, Ferro e o Permalloy (que é uma liga metálica de  $\text{Fe}_{80}\text{Ni}_{20}$ ) foram utilizados por serem materiais magnéticos. As principais diferenças entre eles, que nos motivaram a estudá-los são, a magnetização de saturação e a anisotropia. A magnetização de saturação ( $M_s$ ) do Ferro é  $1,7 \times 10^6$  A/m, enquanto a do Permalloy é  $0,8 \times 10^6$  A/m. Quanto a anisotropia cristalina (K), anisotropia do Ferro é  $4,7 \times 10^4$  J/m<sup>3</sup>, enquanto o Permalloy é isotrópico, ou seja,  $K = 0$ . Quanto maior a magnetização, maiores são os efeitos dipolares. O Permalloy é mais usado na indústria, pois o ferro é um material que oxida fácil; ele está mais voltado aos estudos acadêmicos, para ver os

efeitos da anisotropia. Do ponto de vista tecnológico, os materiais de interesse seriam ligas, que não oxidam.

Todavia, as fases magnéticas são resultado da competição de todas as energias magnéticas (energia de troca, energia de anisotropia, energia Zeeman e energia dipolar).

Nesse trabalho, mostramos como o campo dipolar se distribui ao redor de uma nanopartícula magnética e como varia de acordo com as fases magnéticas.

No capítulo 1, faremos uma contextualização sobre o papel atual de nanopartículas magnéticas em gravação magnética e aplicações biomédicas; como também apresentaremos a análise do sistema, levando em consideração o cálculo micromagnético: as energias magnéticas necessárias para a descrição de nanoestruturas magnéticas, bem como a descrição do campo efetivo e o cálculo autoconsistente.

No capítulo 2, mostraremos alguns resultados obtidos através de simulações feitas para nanopartículas com seções circulares e elípticas, com os materiais Ferro e Permalloy.

Na última seção, apresentamos as conclusões e perspectivas para trabalhos futuros.

## 2 NANOESTRUTURAS MAGNÉTICAS

Magnetismo é um dos mais antigos ramos da ciência, trouxe contribuições significativas para o desenvolvimento da humanidade desde a invenção da bússola até os tempos mais recentes com a estocagem de informação na forma de gravação magnética. Em sua versão mais moderna, acompanhando ao que vem acontecendo em outros ramos da ciência e da tecnologia, a miniaturização também está presente em magnetismo.

Os materiais magnéticos nanoestruturados são muito estudados hoje em dia devido às várias aplicações tecnológicas, as quais desempenham uma importância fundamental no mundo moderno, como na produção de materiais para sistemas de gravação magnética de alta densidade, no desenvolvimento de técnicas na área biomédica e nos cabeçotes de leitura de dados. “Tal tecnologia denominada por spintrônica teve início com a primeira observação do efeito magnetorresistivo gigante observado, em 1988, pelo físico Mário N. Baibich, quando trabalhava no laboratório do professor Albert Fert, prêmio Nobel de 2008. ” (BAIBICH, 1988 apud SILVA, 2011, p.4).

Um dos estudos das aplicações biomédicas é a vetorização de fármacos, que consiste em injetar no local que contenha a lesão um ferrofluido, via catéter, com partículas magnéticas que levam o medicamento acoplado a elas. Colocando um ímã na parte externa, as partículas magnéticas que passarem naquela região irão interagir com o campo magnético tornando-se magnéticas, atravessando o vaso sanguíneo, ficando no tecido doente, onde o medicamento é liberado. Nesse sistema, é importante que as partículas sejam superparamagnéticas, de modo que, na ausência de um campo magnético, elas não se aglomerem e não causem o infarto do vaso.

O Superparamagnetismo é observado em nanopartículas magnéticas e consiste em uma instabilidade de ordem magnética produzida pela energia térmica, que são estabilizadas pela energia de anisotropia a qual é proporcional ao número de átomos magnéticos da partícula (BEAN; LIVINGSTON, 1959).

Do ponto de vista de aplicações médicas, para Dantas (2008, p.3):

Nesses sistemas é importante que as partículas sejam superparamagnéticas de modo a evitar danos a células nobres do sangue, durante o transporte para o alvo. As partículas se magnetizam em presença

de campo externo, adquirem mobilidade magnetoforética, em presença de campo magnético e, portanto, podem ser utilizadas com sucesso para transportar princípios ativos que estejam ligados a elas, para separação celular e para se localizar em tumores permitindo o aquecimento local do tecido com a lesão.

Outra aplicação bastante importante é a gravação magnética. O principal desafio da indústria magnética é produzir sistemas magnéticos de alta densidade em um menor espaço possível, onde requer partículas pequenas, densamente arranjadas em camadas finas. Silva (2011, p.1) diz:

Um fator relevante neste aumento da capacidade de armazenar dados é o avanço das técnicas de construção de estruturas magnéticas cada vez menores, conduzindo a um relevante esforço de pesquisa em materiais magnéticos nanoestruturados, enfocando as pesquisas no seu comportamento, face a mudança de geometrias, campo de interface (estabilizante) entre outros fatores importantes.

Porém, não há como diminuir o tamanho das partículas indefinitivamente, tendo assim um grande esforço por parte dos pesquisadores pela busca do controle do limite superparamagnético. No cálculo para o limite do tamanho, temos a constante de anisotropia do material,  $K$ , e o volume da nanopartícula,  $V$ . Como explica Dantas (2008, p.3):

A barreira de energia que estabiliza partículas magnéticas é  $KV$ , onde  $K$  é a constante de anisotropia do material e  $V$  é o volume da nanopartícula. A estabilidade da ordem magnética requer  $KV > k_B T$  ( $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura). Uma forma de manter a barreira de energia, diminuindo o volume da partícula, é aumentar a anisotropia. A dificuldade no uso de materiais de alta anisotropia é a necessidade de altos campos magnéticos para gravação, conseqüentemente altas correntes nos equipamentos eletrônicos.

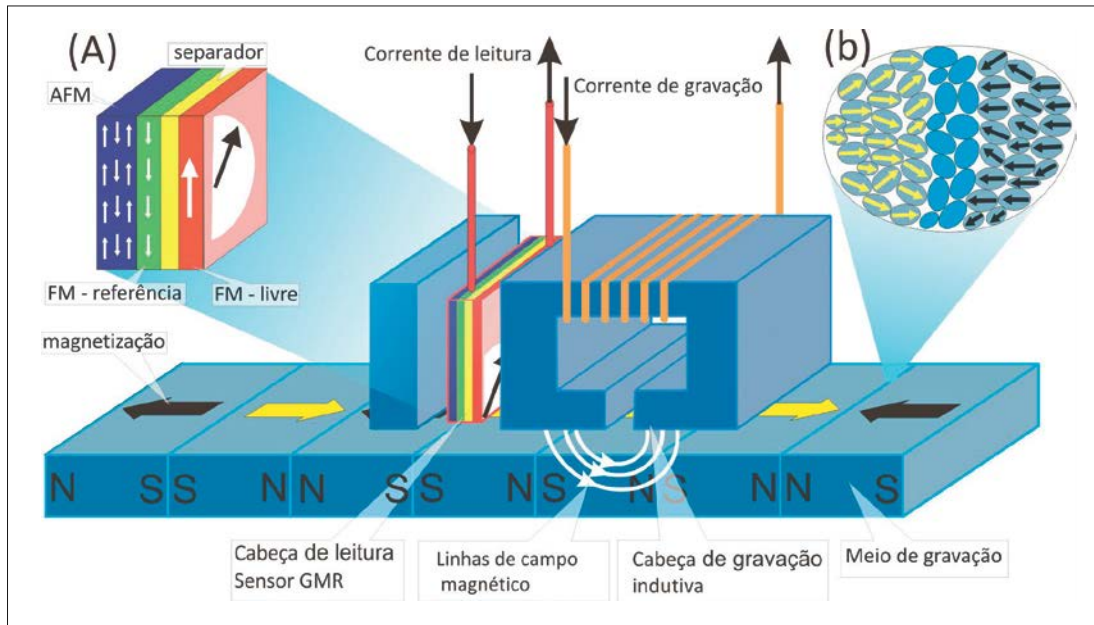
A Figura 2.1 mostra um dispositivo de gravação e leitura magnética. A gravação é feita por uma cabeça indutiva que gera um campo magnético sobre o meio de gravação em um dos dois sentidos de uma direção fixa.

A busca da estabilização de nanopartículas tem dado origem a diversas alternativas para o aumento da densidade de gravação magnética. Uma delas é a Gravação termicamente assistida, que viabiliza o uso de materiais com altas anisotropias. Nesse caso, um laser é apontado para o ponto exato onde o bit será gravado, aquecendo-o. Isso permite que a operação de gravação magnetize mais fortemente o material, o que se traduz na gravação de dados em bits menores,



elevando a densidade de armazenamento. Nesse estudo, o laser conseguirá gravar 100 vezes mais dados na mesma área usada hoje.

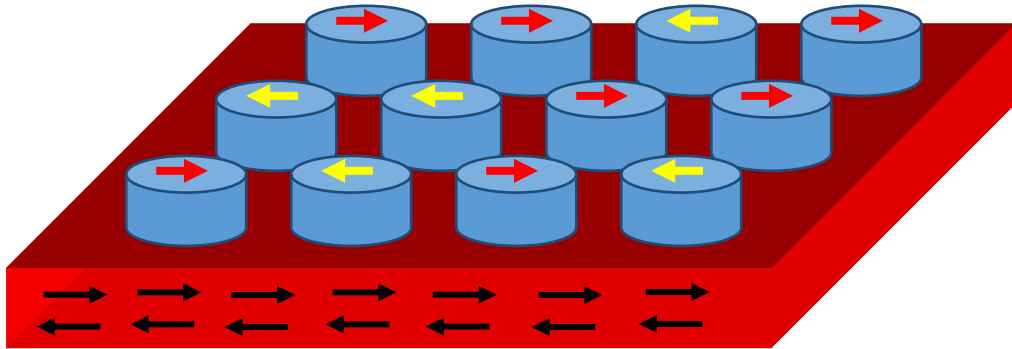
Figura 2.1 – Dispositivo de gravação magnética. (a) Multicamada magnética que compõe o sensor de leitura. (b) ampliação esquemática do meio de gravação.



Fonte: Dantas, 2008.

Outra alternativa que a indústria busca para o aumento da densidade é a matriz de *dots*. Isso porque a tecnologia atual é uma linguagem binária, com gravações do tipo 0 ou 1, que tem a ver com os momentos magnéticos apontando numa direção ou outra. Mas cada bit na verdade não é um material contínuo, são grãos, onde para cada bit há 1000 grãos (Figura 2.1(b)). E, pensando no aumento da densidade de gravação, o que os cientistas querem é uma gravação na forma de matrizes de *dots*– ver figura 2.2 -, uma região extremamente pequena, onde possa colocar em cada *dot* desse um único bit. “Consequentemente, quanto menores as nanopartículas, menor será a área associada a um bit e maior será a densidade de gravação.” (DANTAS, 2008, p.3)

Figura 2.2: Figura esquemática de uma matriz de dots.



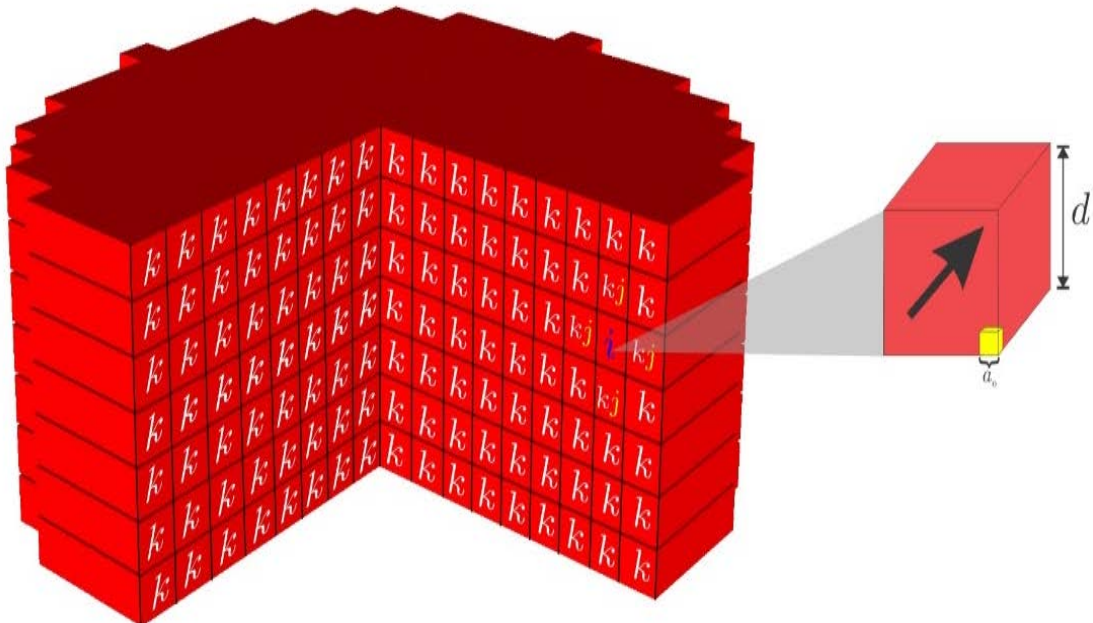
Fonte: Elaborada pelo autor

No Brasil, há vários grupos de pesquisa em magnetismo. O grupo do Rio Grande do Norte, constituído por pesquisadores da Universidade do Estado do Rio Grande do Norte (UERN) e da Universidade Federal do Rio Grande do Norte (UFRN), tem se concentrado no estudo de sistemas magnéticos nanométricos, incluindo: a) novos estados magnéticos de pontos (dimensão zero – 0D), de fios (1D), de filmes finos (2D) e de multicamadas magnéticas (3D) com impacto em aplicações de magneto-eletrônica e refrigeração magnética; e b) produção de sistemas magnéticos nanoestruturados e desenvolvimento de aplicações biomédicas.

## 2.1 ENERGIAS MAGNÉTICAS E CAMPOS MAGNÉTICOS

Tendo como base o objetivo do trabalho que é o estudo dos efeitos do campo dipolar em torno da vizinhança de nanopartículas magnéticas, fazemos a análise a partir do cálculo micromagnético. Para o cálculo de sistemas magnéticos com dimensões de centenas de nanômetros, as energias magnéticas devem ser reescritas de modo que tenha certo número de átomos para tornar o cálculo viável. Por isso usamos o conceito de célula de simulação.

Figura 2.3: Figura esquemática da representação atômica, e do sistema magnético estudado neste trabalho.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Um dado volume,  $d^3$ , de um material cristalino bcc apresenta um número de átomos  $N$  dado por:

$$N = 2 \left( \frac{d^3}{a_0^3} \right)$$

onde  $a_0$  é o parâmetro de rede do material magnético. A fração indica o número de células unitárias do tipo bcc e o 2 vem do fato de cada célula unitária bcc pode apresentar dois átomos. Tomemos, como exemplo, um cubo de lado  $d = 10\text{nm}$  de ferro, onde seu parâmetro de rede é  $a_0^{\text{Fe}} = 0,287\text{ nm}$ , logo o número total de átomos é:

$$N = 2 \left( \frac{10^3}{0,287^3} \right) = 2 \left( \frac{1000}{0,0236} \right) \cong 8,47 \times 10^4 \text{ (átomos)}$$

O cálculo magnético para todos esses átomos é inviável computacionalmente.

Escolhemos o tamanho da célula de simulação de modo a garantir que cada célula represente uma região onde os momentos magnéticos de todos os átomos sejam, de forma aproximada, uniforme e isso vai depender do comprimento de troca do material. Segundo Silva (2014, p.32):

Para fazermos os cálculos para esta configuração, onde a estrutura magnética é composta de dimensões de centenas de nanômetros, sugerimos a introdução do conceito de célula de simulação. A célula de simulação representa um volume do material magnético no qual não há mudanças consideráveis nos momentos magnéticos.

A seguir, apresentaremos as energias magnéticas utilizadas no cálculo numérico por células, assim como os campos magnéticos.

## 2.2 ENERGIAS MAGNÉTICAS POR CÉLULAS

Energias magnéticas por células são as energias magnéticas contidas em cada célula de simulação. Ela é descrita dessa forma porque a estrutura é dividida em células que representa uma porção do material, com magnetização uniforme. A cada célula existe uma energia associada, sendo que essa energia é constituída de várias contribuições, descritas a seguir.

### 2.2.1 Energia de Troca

A energia de troca é a interação dos dipolos magnéticos somente com as primeiras células vizinhas.

A energia de troca por unidade de volume entre duas células cúbicas de lado  $d$  fica:

$$E_{Troca} = \frac{A}{d^2} \sum_{i,j} [1 - \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j] \quad (1)$$

onde o parâmetro  $A$  é conhecido na literatura como o rigidez de troca (*Exchangestiffnes*). A soma em  $i$  representa a soma sobre todas as células do sistema e a soma  $j$  é a soma sobre todas as primeiras células vizinhas  $j$  de cada célula  $i$ . Para um material ferromagnético a energia de troca é minimizada quando os momentos magnéticos são paralelos.

### 2.2.2 Energia Zeeman

A energia Zeeman é aquela que representa a interação entre o momento magnético do material e o campo externo aplicado a este:

$$E_{Zeeman} = -\sum_i M_s \hat{m}_i \cdot \vec{H} \quad (2)$$

Onde  $\hat{m}_i$  é o momento magnético e  $\vec{H}$  é o campo externo aplicado ao material.

Essa energia apresenta um mínimo quando o momento magnético aponta na mesma direção e sentido do campo.

### 2.2.3 Energia de Anisotropia

A energia dos sólidos magnéticos depende da orientação entre sua magnetização e os eixos cristalinos. A Energia de Anisotropia define que há um eixo privilegiado para a fácil magnetização. Em termos dos ângulos entre os momentos magnéticos e a direção cristalográfica preferencial, a anisotropia magnetocristalina é dada por:

$$E_{Anis} = -K \sum_i (\hat{m}_i^x)^2 \quad (3)$$

Onde K é a constante de anisotropia magnetocristalina, tais constantes para os materiais utilizados nesse trabalho, Pye o Fe, podem ser vistos na tabela 1.

### 2.2.4 Energia Dipolar

A Energia Dipolar é a interação de todas as células. É geralmente chamada de energia magnetostática, tal energia pode ser dada por:

$$E_{Dip} = \frac{M_s^2 V^2}{2} \sum_{i,k} \left( \frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_k}{r_{ik}^3} - \frac{3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ik})(\hat{m}_k \cdot \hat{r}_{ik})}{r_{ik}^5} \right) \quad (4)$$

onde  $\vec{r}_{ik}$  é o vetor que representa a distância entre os momentos magnéticos das células  $i$  e  $k$ ;  $i$  representa a localização das células unitárias na rede do sistema e admite todas as posições, e  $k$  seus vizinhos dipolares, ou seja, todo o sistema. O

fator  $\frac{1}{2}$  na equação 4 corrige a somatória, para evitar contagem dupla das energias do sistema.

Tabela 1: magnéticos do	Parâmetros Ferro e do	
Permalloy.	Fe	Py
$M_S(A/m)$	$1,7 \times 10^6$	$0,8 \times 10^6$
$A(J/m)$	$2,5 \times 10^{-11}$	$1,3 \times 10^{-11}$
$H_{EXC}(T) = A/M_S d^2$	$14,7/d_{nm}^2$	$16,25/d_{nm}^2$
$K(J/m^3)$	$4,7 \times 10^4$	<i>zero</i>
$H_{anis} = 2K/M_S(T)$	0,055	<i>zero</i>
$\lambda = \pi \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_S^2}}$	$11,65nm$	$17,86nm$

Fonte: Elaborada pelo autor.

### 2.3 CAMPO MAGNÉTICO LOCAL SOBRE CÉLULAS

A partir da energia magnética, pode-se calcular o campo efetivo local sobre cada célula de simulação. O campo efetivo pode ser obtido tomando-se o gradiente negativo da energia magnética com relação ao momento magnético da célula local.

$$\vec{H}_{eff} = -\vec{\nabla}_m E \quad (5)$$

#### 2.3.1 Campo de Troca

O campo de troca que atua em uma célula  $i$  produzido por suas células vizinhas pode ser obtido a partir da expressão da energia de troca e será dado por:

$$\vec{H}_{Troca}^i = -\frac{1}{M_S} \frac{\partial E_{Troca}}{\partial \hat{m}_i} \quad (6)$$

$$\vec{H}_{Troca}^i = -\frac{1}{M_S} \frac{\partial}{\partial \hat{m}_i} \left[ \frac{A}{d^2} \sum_j [1 - \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j] \right] \quad (7)$$

$$\vec{H}_{Troca}^i = -\frac{A}{M_S d^2} \sum_j \hat{m}_j \quad (8)$$

Onde  $j$  corresponde as células de primeiros vizinhos às células  $i$ .

### 2.3.2 Campo Zeeman

O campo Zeeman corresponde ao campo externo aplicado ao material e apresenta-se por igual em todas as células do sistema. A partir da energia Zeeman podemos obter o campo Zeeman como se segue:

$$\vec{H}_{Zee}^i = -\frac{1}{M_S} \frac{\partial E_{Zee}}{\partial \hat{m}_i} \quad (9)$$

$$\vec{H}_{Troca}^i = -\frac{1}{M_S} \frac{\partial}{\partial \hat{m}_i} \left[ -\sum_i M_S \hat{m}_i \cdot \vec{H} \right] \quad (10)$$

$$\vec{H}_{i,zee}^p = \vec{H} \quad (11)$$

### 2.3.3 Campo de Anisotropia

O campo de anisotropia uniaxial apresenta valores máximos para magnetização da célula sobre o eixo chamado fácil. E conseqüentemente este alinhamento dá o mínimo da energia de anisotropia. O campo de anisotropia sobre cada célula de simulação será dado por:

$$\vec{H}_{Anis}^i = -\frac{1}{M_S} \frac{\partial E_{Anis}}{\partial \hat{m}_i} \quad (12)$$

$$\vec{H}_{Anis}^i = -\frac{1}{M_S} \frac{\partial}{\partial \hat{m}_i} \left[ -K \sum_i (\hat{m}_i^x)^2 \right] \quad (13)$$

$$\vec{H}_{Anis}^i = \frac{2K}{M_s} \hat{m}_i^x \quad (14)$$

Em nosso estudo, foi considerado o eixo  $x$  como o eixo fácil de magnetização.

### 2.3.4 Campo Dipolar

O campo dipolar é um campo de longo alcance. Cada célula  $i$  atua sobre todas as outras do sistema  $k$ , e sua direção e sentido não é tão trivial quanto as direções e sentidos dos campos vistos anteriormente. Neste caso, escreveremos todas as componentes do campo dipolar. Calculando a componente  $x$  do campo dipolar, temos:

$$H_{iDip}^x = - \frac{1}{M_s} \frac{\partial E_{Dip}}{\partial m_i^x} \quad (15)$$

$$H_{iDip}^x = - \frac{1}{M_s} \frac{\partial}{\partial m_i^x} \left[ \frac{M_s^2}{2} \sum_i \sum_k \left( \frac{\hat{m}_i \hat{m}_k}{r_{ik}^3} - \frac{3(\hat{m}_i \hat{m}_k)(\hat{m}_k \hat{m}_{ik})}{r_{ik}^5} \right) \right] \quad (16)$$

$$= - \frac{1}{M_s} \left[ \frac{M_s^2}{2} \sum_i \sum_k \left( \frac{\partial}{\partial m_i^x} \frac{\hat{m}_i \hat{m}_k}{r_{ik}^3} - \frac{\partial}{\partial m_i^x} \frac{3(\hat{m}_i \hat{m}_k)(\hat{m}_k \hat{m}_{ik})}{r_{ik}^5} \right) \right] \quad (17)$$

$$= - \frac{M_s}{2} \sum_k \left( \frac{\partial}{\partial m_i^x} \frac{(m_i^x m_k^x + m_i^y m_k^y + m_i^z m_k^z)}{r_{ik}^3} \right) \quad (18)$$

$$- \frac{\partial}{\partial m_i^x} \sum_k \left( \frac{3(m_i^x r_{ik}^x + m_i^y r_{ik}^y + m_i^z r_{ik}^z)(m_k^x r_{ik}^x + m_k^y r_{ik}^y + m_k^z r_{ik}^z)}{r_{ik}^5} \right)$$

$$= - \frac{M_s}{2} \sum_k \left( \frac{m_k^x}{r_{ik}^3} \right) + \sum_k \left( \frac{3r_{ik}^x (m_k^x r_{ik}^x + m_k^y r_{ik}^y + m_k^z r_{ik}^z)}{r_{ik}^5} \right) \quad (19)$$

onde  $r_{ik}$  é a distância entre a célula de simulação  $i$  e a célula de simulação  $k$ . Assim sendo, o campo dipolar na direção  $x$  se torna:

$$H_{iDip}^x = \frac{M_s}{2} \sum_k \left( \frac{3r_{ik}^x (m_k^x r_{ik}^x + m_k^y r_{ik}^y + m_k^z r_{ik}^z)}{r_{ik}^5} - \frac{m_k^x}{r_{ik}^3} \right) \quad (20)$$

Por analogia, escrevemos facilmente os termos para as direções  $y$  e  $z$ :

$$H_{iDip}^y = \frac{M_s}{2} \sum_k \left( \frac{3r_{ik}^y (m_k^x r_{ik}^x + m_k^y r_{ik}^y + m_k^z r_{ik}^z)}{r_{ik}^5} - \frac{m_k^y}{r_{ik}^3} \right) \quad (21)$$

$$H_{iDip}^z = \frac{M_s}{2} \sum_k \left( \frac{3r_{ik}^z (m_k^x r_{ik}^x + m_k^y r_{ik}^y + m_k^z r_{ik}^z)}{r_{ik}^5} - \frac{m_k^z}{r_{ik}^3} \right) \quad (22)$$

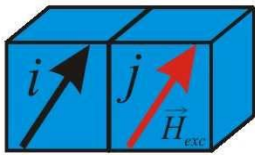


A figura 2.3 mostra o comportamento de cada campo de uma célula  $i$  sobre sua vizinhança.

Figura 2.4: Figura esquemática mostrando o perfil de cada termo do campo magnético local que atua em cada célula e devido a cada célula.

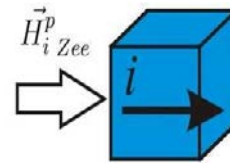
### Campos Médios

Campo de Troca



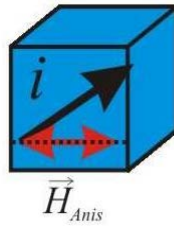
$$\vec{H}_{Troca}^i = -\frac{A}{M_S d^2} \sum_j \hat{m}_j$$

Campo de Zeeman



$$\vec{H}_{i,Zee}^p = \vec{H}$$

Campo de Anisotropia



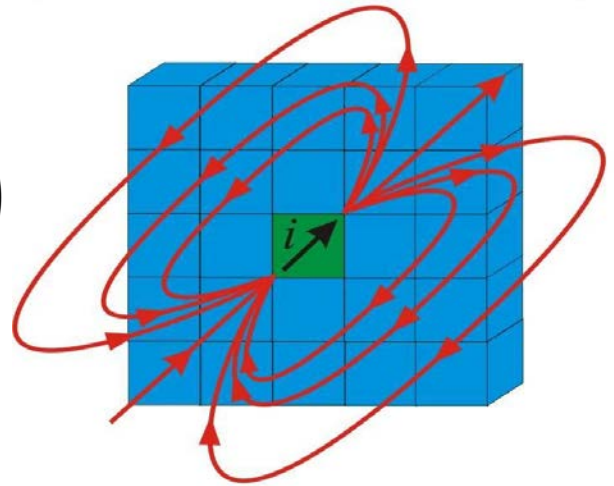
$$\vec{H}_{Anis}^i = -\frac{2K}{M_S} \hat{m}_i^x$$

Campo Dipolar

$$H_{iDip}^x = \frac{M_S}{2} \sum_k \left( \frac{3r_{ik}^x (m_k^x r_{ik}^x + m_k^y r_{ik}^y + m_k^z r_{ik}^z)}{r_{ik}^5} - \frac{m_k^x}{r_{ik}^3} \right)$$

$$H_{iDip}^y = \frac{M_S}{2} \sum_k \left( \frac{3r_{ik}^y (m_k^x r_{ik}^x + m_k^y r_{ik}^y + m_k^z r_{ik}^z)}{r_{ik}^5} - \frac{m_k^y}{r_{ik}^3} \right)$$

$$H_{iDip}^z = \frac{M_S}{2} \sum_k \left( \frac{3r_{ik}^z (m_k^x r_{ik}^x + m_k^y r_{ik}^y + m_k^z r_{ik}^z)}{r_{ik}^5} - \frac{m_k^z}{r_{ik}^3} \right)$$



Fonte: Rebouças, 2010.

### 3 NANOPARTÍCULAS CILÍNDRICAS COM SEÇÕES CIRCULARES E ELÍPTICAS

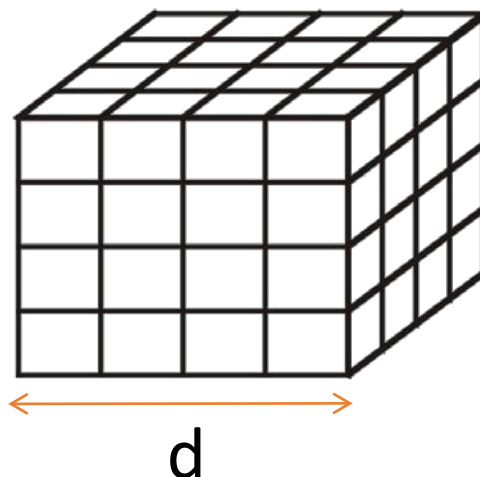
#### 3.1 CÁLCULO AUTO-CONSISTENTE

Como mostrado na seção anterior, modelar sistema magnético, mesmo que numericamente, usando o conceito de átomos é inviável computacionalmente.

Sendo assim, utilizamos o conceito de células de simulação, por meio do qual representamos um conjunto de átomos por uma célula de simulação. Nesse caso, podemos representar um conjunto de 100 átomos por uma única célula dessa, como consequência, a cada célula é associado um momento magnético efetivo. A introdução do conceito de célula de simulação produz uma redução de 100 vezes o número de variáveis do sistema a cada célula. Considerando que, em sistemas magnéticos nanoestruturados, a energia dipolar é parte importante da energia magnética do sistema, essa redução no número de variáveis a serem trabalhadas é um ganho fantástico que viabiliza numericamente a descrição física desses sistemas.

Mesmo assim, o número de variáveis numéricas correlacionadas ainda é relativamente grande. Por exemplo, considerando uma partícula cúbica com aresta  $d = 100\text{nm}$  dividida em células cúbicas com aresta de  $25\text{nm}$ (ver figura 3.1) -tem-se 1000 variáveis, que ao serem multiplicadas pelos eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$ , tem-se 3000 variáveis, todas interligadas entre si.

Figura 3.1: Figura esquemática de uma partícula cúbica com aresta  $d = 100\text{nm}$  dividida em células cúbicas com aresta  $25\text{nm}$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Portanto, é imprescindível o desenvolvimento de rotinas numéricas que permitam encontrar soluções para um sistema com tantas variáveis numéricas, onde todas são dependentes umas das outras.

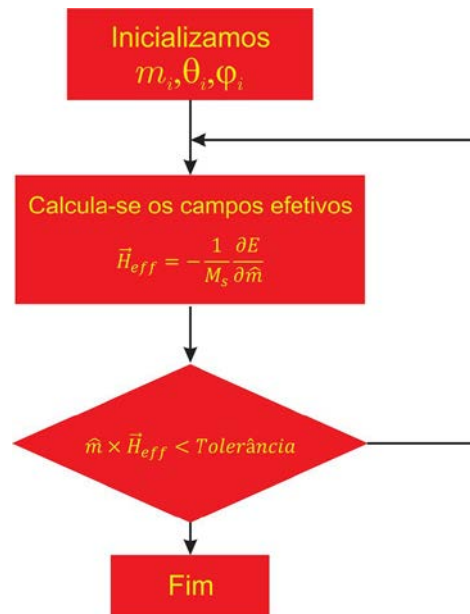
Nesse caso, entre os vários métodos numéricos existentes, escolhemos o método numérico auto consistente.

Tal método é implementado com a utilização de ferramentas computacionais. Para isso, construímos um algoritmo que consiste no seguinte:

1. Inicializamos todas as variáveis  $(m_1^{x0}, m_1^{y0}, m_1^{z0}, m_2^{x0}, m_2^{y0}, m_2^{z0}, \dots, m_n^{x0}, m_n^{y0}, m_n^{z0})$  do sistema em uma configuração magnética de saturação na direção de um campo magnético externo aplicado;
2. A partir das variáveis  $m^0$ 's, calculamos o campo médio local ( $\vec{H}_{eff}$ ) sobre cada uma das células;
3. Tendo o campo médio, calculamos o torque magnético sobre cada uma das células ( $\vec{\tau} = \vec{m}^0 \times \vec{H}_{eff}$ );
4. Checamos se o torque é suficientemente desprezível (menor que  $10^{-6}$ ), em cada uma das células;
5. Se a resposta do cheque acima é não. Colocamos todas as variáveis na direção do campo médio local e obtemos um novo conjunto de variáveis  $m$ 's ( $m_1^x, m_1^y, m_1^z, m_2^x, m_2^y, m_2^z, \dots, m_n^x, m_n^y, m_n^z$ ). Nesse caso, voltamos ao passo 1, guardamos as variáveis  $m$ 's nas variáveis  $m^0$ 's e refazemos o cálculo, iterativamente, até que a resposta do cheque no passo 5, seja positiva;
6. Quando o cheque do passo é positivo, o cálculo numérico encontrou a configuração de equilíbrio, que é o estado de mais baixa energia magnética.

O algoritmo acima descrito é representado através do fluxograma na figura 3.2.

Figura 3.2: Fluxograma do método autoconsistente apresentado em nossas simulações.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Esse algoritmo é implementado em Fortran, linguagem de programação estruturada, que trabalha na plataforma do Microsoft Visual Studio 2013 e o compilador Intel Fortran 2013 XE, respectivamente. Os resultados são apresentados por meio do software Originlab 9.0 em curvas numéricas e em mapas de vetores dos momentos magnéticos.

O cálculo numérico utilizado neste trabalho tem como objetivo apresentar as possíveis estruturas de equilíbrio para as nanopartículas abordadas aqui (cilíndricas com seções circulares e elípticas), com base nas energias mostradas nas subseções anteriores. Cada célula de simulação sofre a ação de um campo efetivo local, o qual é determinado pela soma vetorial de todos os campos que atuam sobre a célula. A configuração magnética de equilíbrio da estrutura acontecerá quando o momento magnético de cada célula estiver alinhado com o campo magnético efetivo local, ou seja, a configuração de torque for nula sobre o momento magnético da célula de simulação.

Os estados magnéticos que apresentaremos a seguir compõem diagramas de fases magnéticas de nanopartículas ferromagnéticas, os diagramas apresentam o perfil magnético do sistema em remanência  $H = 0$ . Será apresentado o perfil da

magnetização para nanopartículas cilíndricas com seções circulares e elípticas constituídas dos materiais ferro e permalloy ( $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$ ). O cálculo micromagnético foi descrito no capítulo 2. Diante de todas as energias por unidade de volume das células de simulação, podemos escrever a densidade de energia total do sistema por unidade de volume como:

$$E_T^V = \frac{A}{d^2} \sum_{i,j} [1 - \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j] - \sum_i M_s \hat{m}_i \cdot \vec{H} - \frac{K}{2} \sum_i (\hat{m}_i^x)^2 + \frac{M_s^2}{2} \sum_{i,k} \left( \frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_k}{r_{ik}^3} - \frac{3(\hat{m}_i \cdot \hat{r}_{ik})(\hat{m}_k \cdot \hat{r}_{ik})}{r_{ik}^5} \right) \quad (23)$$

onde o primeiro termo da equação corresponde a energia de troca entre as primeiras células vizinhas; o segundo termo corresponde a energia Zeeman devido ao campo externo aplicado; o terceiro corresponde a energia de anisotropia e o último termo corresponde a energia de interação dipolar, entre todos os momentos de todas as células.

Os parâmetros magnéticos intrínsecos dos materiais utilizados neste estudo foram mostrados na Tabela 1. Os parâmetros utilizados são a rigidez de troca, constante de anisotropia e magnetização de saturação. Eles regem o acoplamento de troca no interior do material, a direção preferencial de magnetização e quão forte esta será. Essas características, associadas com fatores geométricos da nanopartícula, determinam o comportamento do perfil magnético do sistema.

Para as nanopartículas com seções circulares, temos  $D$  igual ao diâmetro e  $h$  igual à altura (Figura 3.3); para as nanopartículas elípticas, tem-se o eixo maior,  $a$ , e o eixo menor,  $b$ , como também a altura,  $h$  – (Figura 3.4).

As simulações foram com diâmetro variando entre  $D = 55\text{nm}$  e  $305\text{nm}$  para as nanopartículas cilíndricas com seção circular. Para as nanopartículas elípticas de ferro, fixamos o valor de  $a$  entre  $105\text{nm}$  e  $255\text{nm}$  e, para cada valor de  $a$ , variamos  $b$  de forma que o valor deste fosse menor e maior que o daquele; e fixando  $b$  entre  $105\text{nm}$  e  $255\text{nm}$ , variamos  $a$  de forma que o valor deste fosse maior que o daquele. Para o permalloy, fixamos o valor de  $a$  entre  $105\text{nm}$  e  $255\text{nm}$  e, para cada valor de  $a$ , variamos  $b$  de forma que o valor deste fosse menor e maior que o daquele.

Figura 3.3 - Figura esquemática de uma nanopartícula cilíndrica com seção circular.

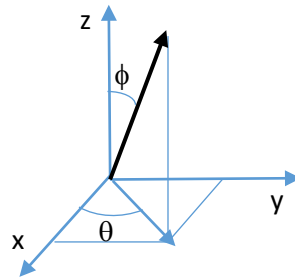
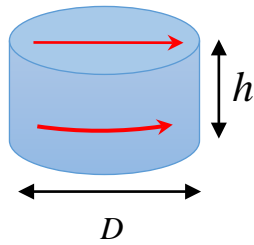
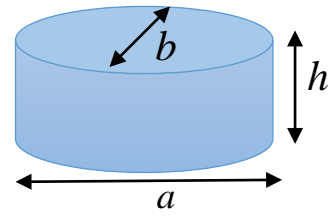


Figura 3.4 - Figura esquemática de uma nanopartícula cilíndrica com seção elíptica.



Fonte: Elaboradas pelo autor.

## 3.2 FASES MAGNÉTICAS DAS NANOPARTÍCULAS

Os estados magnéticos, ou fases magnéticas, de uma nanopartícula são diversificados e, em alguns casos, até de difícil identificação. Sendo assim, caracterizaremos aqui as fases mais comuns: fase uniforme, a fase tipo “c” no plano e o vórtice magnético.

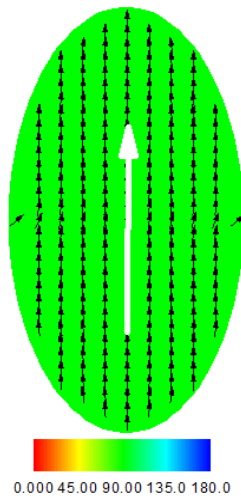
### 3.2.1 Fase Uniforme

Chamaremos de fase uniforme, o estado magnético que, em média, os momentos magnéticos estão alinhados entre si, conforme Figura 3.5. Considerando que as fases magnéticas são função da energia dipolar magnética e que essa energia é extremamente relacionada com a forma geométrica da nanopartícula magnética, podemos afirmar que a fase uniforme é mais favorável para nanopartículas alongadas em uma única direção.

Para nanopartículas cilíndricas com seção circular, a fase uniforme não aparece como um estado magnético natural do sistema. Para a fase uniforme aparecer em uma nanopartícula cilíndrica com seção circular, é necessário um forte campo magnético aplicado ao longo de um eixo no plano da amostra. No estado de remanência magnética, que é quando o campo magnético externo aplicado é retirado, a fase uniforme não se forma. Neste trabalho, analisamos as fases de nanopartículas cilíndricas com seção circular de ferro e permalloy com altura de 10 nm e diâmetro a partir de 55 nm e verificamos que a fase uniforme não se forma.



Figura 3.5: Exemplo de Fase Magnética uniforme para uma nanopartícula elíptica de ferro com dimensões  $a = 55\text{nm}$ ,  $b = 255\text{nm}$  e  $h = 10\text{nm}$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

O código de cores representa o ângulo polar (em graus) dos momentos magnéticos.

Todavia, para nanopartículas elípticas, nossos resultados mostram que essa fase é favorável tanto para o ferro quanto para o permalloy.

Como o ferro possui um eixo de anisotropia, eixo de fácil magnetização ao longo do eixo  $x$ , essa fase aparece facilmente se a dimensão em  $x$  é maior que a dimensão em  $y$ . Se o eixo maior da elipse é perpendicular ao eixo de anisotropia, nesse caso, precisa que a anisotropia de forma, ou energia dipolar, compense a energia de anisotropia para permitir um realinhamento uniforme da magnetização na direção ortogonal ao eixo de anisotropia. Em outras palavras, se a nanopartícula está alongada na direção  $y$ , essa fase só aparece quando a dimensão  $y$  for bem maior do que a dimensão  $x$ .

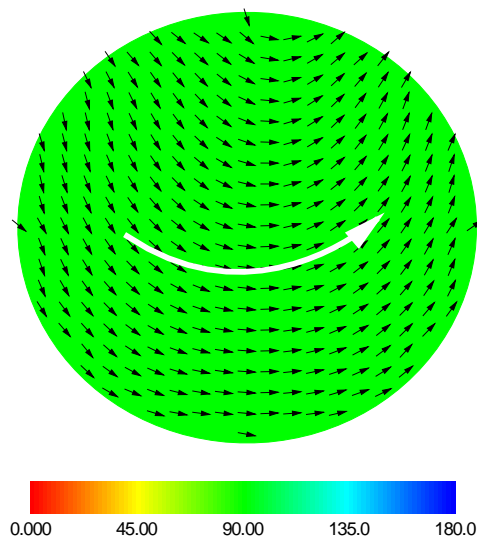
Para o permalloy, que não possui nenhuma direção privilegiada, não possui anisotropia, a fase uniforme aparece facilmente ao longo da dimensão maior da elipse, qualquer que seja a orientação.

### 3.2.2 Estado cno plano

A fase magnética tipo “C” no plano é caracterizada quando os momentos magnéticos se arranjam no formato de um C, claramente visto na Figura 3.6. Essa fase é estado de alta remanência, ou seja, grande parte da magnetização está ao longo do eixo onde o campo magnético foi aplicado, mas possui um valor menor do que os valores encontrados na fase uniforme e a magnetização se encontra praticamente no plano.

Embora apareça para parâmetros geométricos distintos, nossos resultados indicam que essa fase é favorável nas nanopartículas com seções circulares tanto para o Ferro, com diâmetros entre 75nm e 245nm, quanto para o permalloy, com diâmetros entre 75nm e 155nm, e altura fixa de 10 nm.

Figura 3.6: Exemplo de Fase Magnética C para uma nanopartícula circular de permalloy com dimensões  $D = 105\text{nm}$  e  $h = 10\text{nm}$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

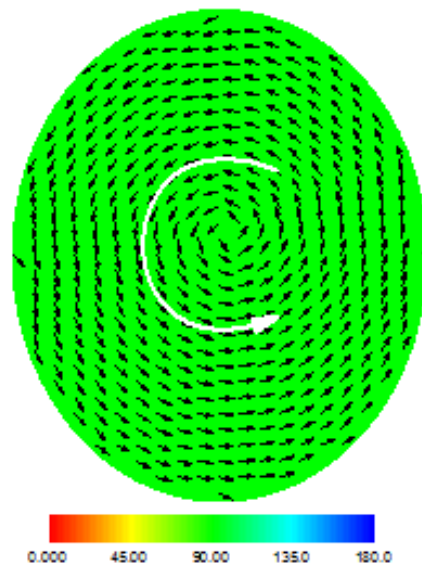
O código de cores representa o ângulo polar (em graus) dos momentos magnéticos.

Nas nanopartículas elípticas, nas nossas simulações, essa fase também aparece para os dois materiais com algumas dimensões.

### 3.2.3 Fase Vórtice no Plano

O estado vórtice se dá quando há fechamento de fluxo dos momentos magnéticos ao longo do corpo da nanopartícula (Figura 3.7). “Devido a presença do campo dipolar, a magnetização se curva de modo a não haver carga magnética de superfícies, resultado do compromisso entre as energias e as fontes de carga magnética de volume e de superfície, presente no nanoelemento como um todo” (SILVA, 2011, p.27)

Figura 3.7: Exemplo de Fase Magnética Vórtice no Plano para uma nanopartícula elíptica de ferro com dimensões  $a = 105\text{nm}$ ,  $b = 155\text{nm}$  e  $h = 10\text{nm}$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

O código de cores representa o ângulo polar (em graus) dos momentos magnéticos.

Nossos resultados mostram que essa fase aparece nas nanopartículas circulares apenas dopermalloy com dimensões entre  $D = 175\text{ nm}$  e  $275\text{ nm}$ .

Essa fase também é favorável nas nanopartículas elípticas, mas apenas para o ferro.

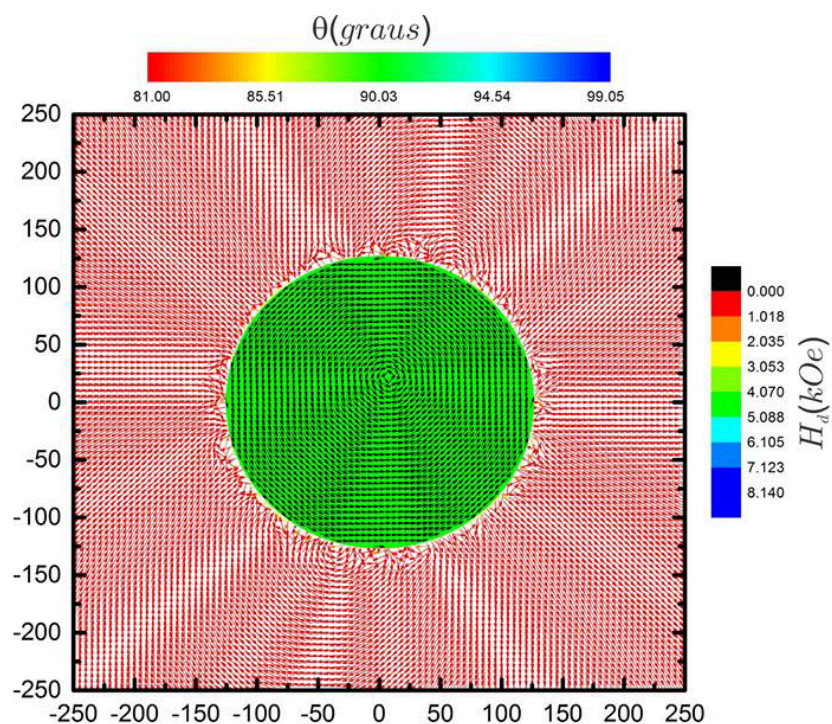
### 3.3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

No sentido de mostrar os efeitos geométricos e parâmetros magnéticos dos materiais envolvidos, discutiremos estados magnéticos remanentes que se formam em nanopartículas com 10 nm de altura nas seções circulares, com 255 nm de diâmetro, e elípticas, com eixo maior de 155 nm e menor de 55 nm, de ferro e permalloy.

#### 3.3.1 Nanopartículas Circulares

Na figura 3.8, tem-se, no centro, a representação do perfil magnético da nanopartícula, o qual se apresenta na fase vórtice, bem como o campo dipolar que ela gera em sua volta para uma nanopartícula cilíndrica com seção circular de permalloy com um diâmetro de 255 nm e uma altura de 10 nm. As cores na barra superior indicam o ângulo polar que indicam se o momento magnético está no plano ou não, e a barra de cores lateral indica a intensidade do campo dipolar.

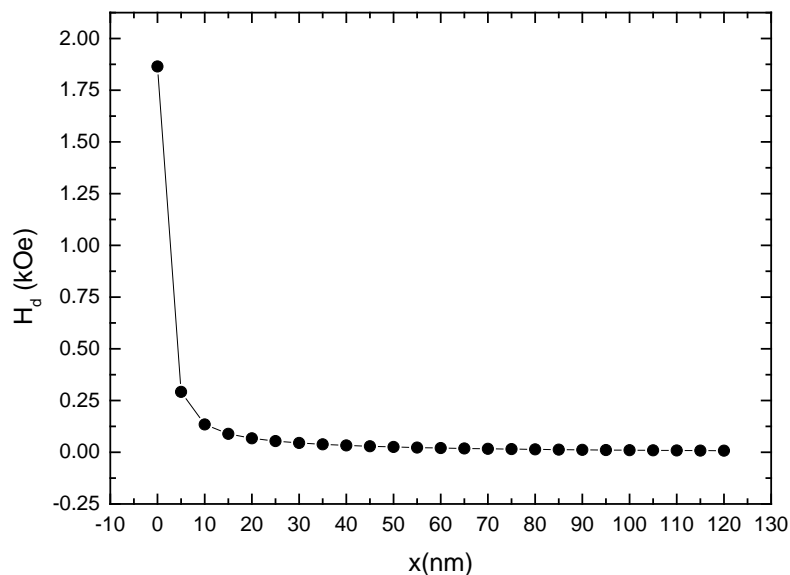
Figura 3.8: Nanopartícula cilíndrica com seção circular de permalloy com 255 nm de diâmetro e 10 nm de altura.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Podemos ver na Figura 3.9 que o campo dipolar no final da nanopartícula é por volta de 1,8 kOe e ele decai muito rapidamente há uma distância de 5 nm logo após a mesma, tendo um campo dipolar de quase 0.3 kOe. O campo dipolar vai se aproximando de zero 30 nm após o fim da nanopartícula. Com isso, a presença de uma outranopartícula nessa distância não iria causar interferência de campos.

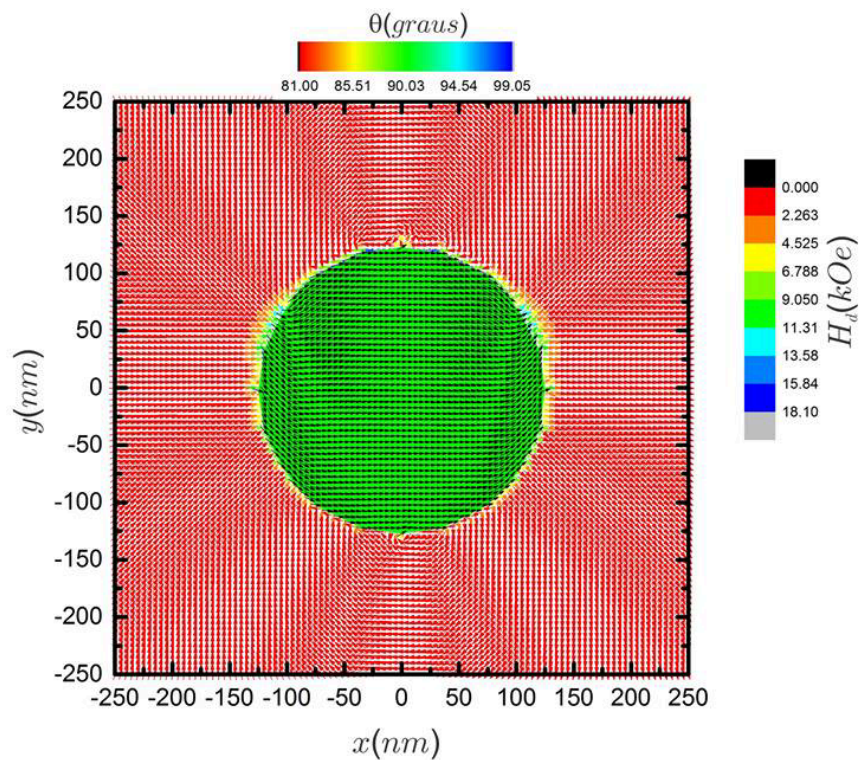
Figura 3.9: Curva do campo dipolar em função da distância em torno da nanopartícula.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A figura 3.10 mostra a representação do perfil magnético de uma nanopartícula cilíndrica com seção circular do ferro com um diâmetro de 255 nm e uma altura de 10 nm, o qual se apresenta na fase quase uniforme, e o campo dipolar que ela gera em sua volta. As cores na barra superior indicam o ângulo polar que indicam se o momento magnético está no plano ou não, e a barra de cores lateral indica a intensidade do campo dipolar.

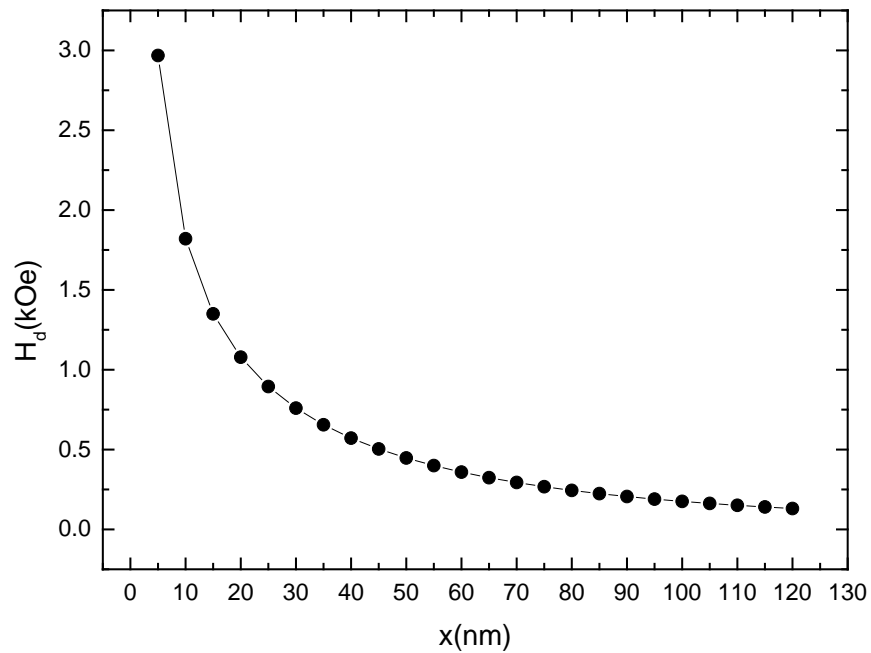
Figura 3.10: Nanopartícula cilíndrica com seção circular de ferro com 255nm de diâmetro e 10nm de altura.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Podemos ver na Figura 3.11 que o campo dipolar no final da nanopartícula é por volta de 3kOe e ele decai mais lentamente. A uma distância de 5nm logo após a mesma, o campo dipolar ainda é por volta de 1.8 kOe, ele vale 0.3 kOe a 55 nm depois. Este vai se aproximando de zero apenas 90nm após a nanopartícula. A presença de uma outranopartícula em uma distância menor que esta poderá causar interferência de campos, não sendo favorável.

Figura 3.11: Curva do campo dipolar em função da distância em torno da nanopartícula.



Fonte: Elaborada pelo autor.

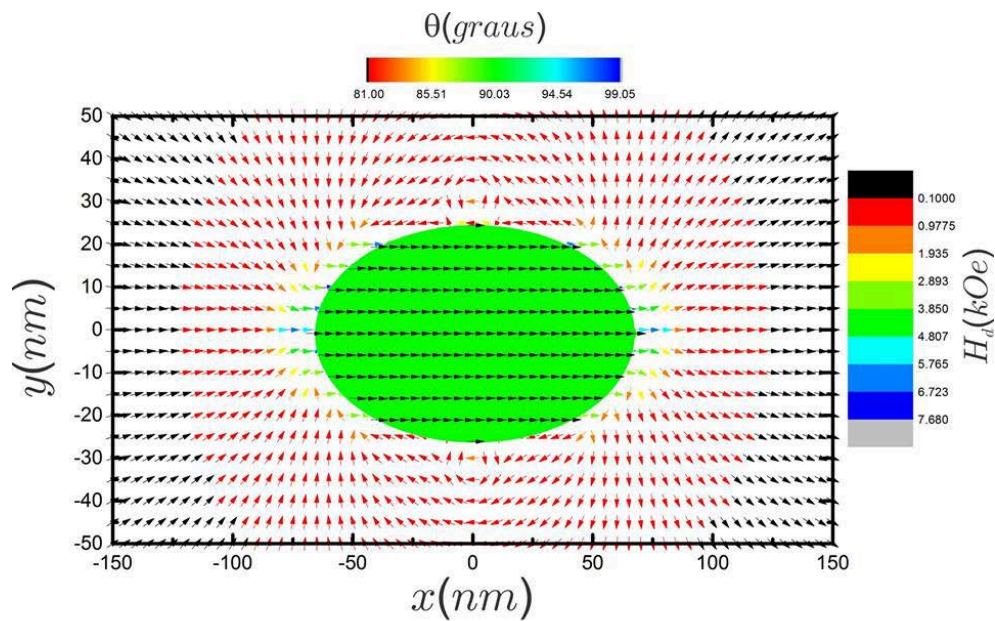
Sabe-se que o campo dipolar do ferro é na ordem de 18 kOe e no permalloy, 8 kOe. O campo dipolar é diretamente proporcional a magnetização de saturação do material  $M_s$ , logo o material que possuir maior valor da mesma tem a fase vórtice favorecida. Porém, nossos resultados mostram que essa fase aparece nas nanopartículas cilíndricas com seção circular do permalloy ( $M_s = 0,8 \times 10^6$  [A/m]) e não no ferro ( $M_s = 1,7 \times 10^6$  [A/m]) mesmo os efeitos dipolares deste sendo maior que o daquele. Este é um resultado inesperado.



### 3.3.2 Nanopartículas Elípticas

Na Figura 3.12 tem-se, no centro, a representação do perfil magnético da nanopartícula que se apresenta na fase uniforme e o campo dipolar que ela gera em sua volta para uma nanopartícula cilíndrica com seção elíptica de permalloy com dimensões de  $a=155$  nm,  $b = 55$  nm e  $h = 10$  nm. As cores na barra superior indicam o ângulo polar que indicam se o momento magnético está no plano ou não, e a barra de cores lateral indica a intensidade do campo dipolar.

Figura 3.12: Nanopartícula cilíndrica com seção elíptica de permalloy com  $a = 155$  nm,  $b = 55$  nm e  $h = 10$  nm.

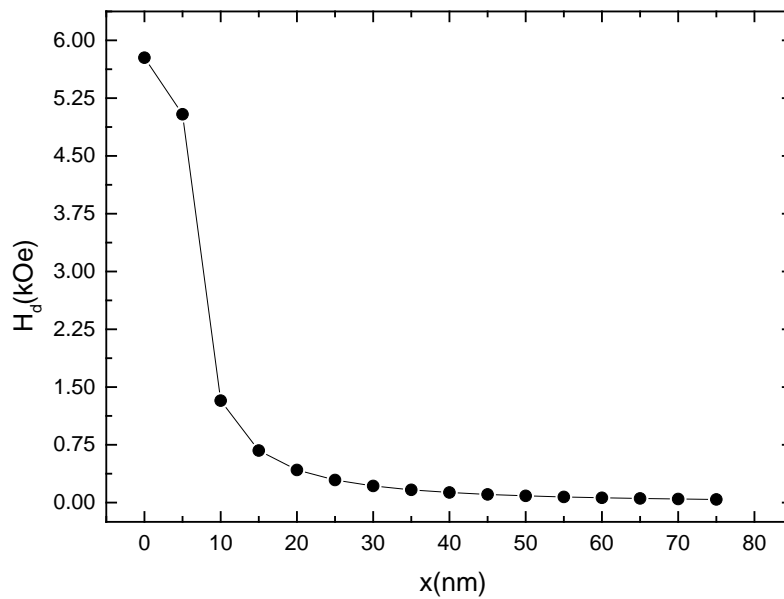


Fonte: Elaborada pelo autor.

Podemos ver na Figura 3.13 que o campo dipolar no final da nanopartícula é por volta de 5.8 kOe e ele decai muito rápido. A uma distância de 5nm logo após a mesma, o campo dipolar ainda é por volta de 5 kOe, mas após 10 nm ele decai para 1.4 kOe. Ele vai se aproximando de zero 45 nm após a nanopartícula. Portanto, após 45 nm de distância desta nanopartícula seria possível colocar outra garantindo que não haverá interferência de campos.



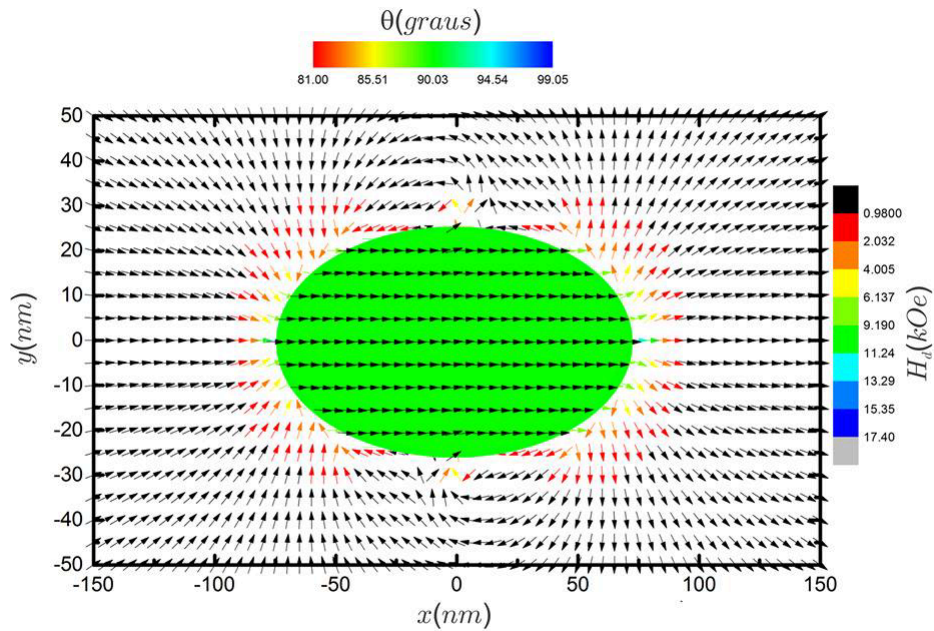
Figura 3.13: Curva do campo dipolar em função da distância em torno da nanopartícula.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Figura 3.14 tem-se a representação do perfil magnético que também se apresenta na fase uniforme, para uma nanopartícula cilíndrica de ferro com seção elíptica com dimensões de  $a=155$  nm,  $b = 55$  nm e  $h = 10$  nm, e o campo dipolar que ela gera em sua volta. As cores na barra superior indicam o ângulo polar que indicam se o momento magnético está no plano ou não, e a barra de cores lateral indica a intensidade do campo dipolar.

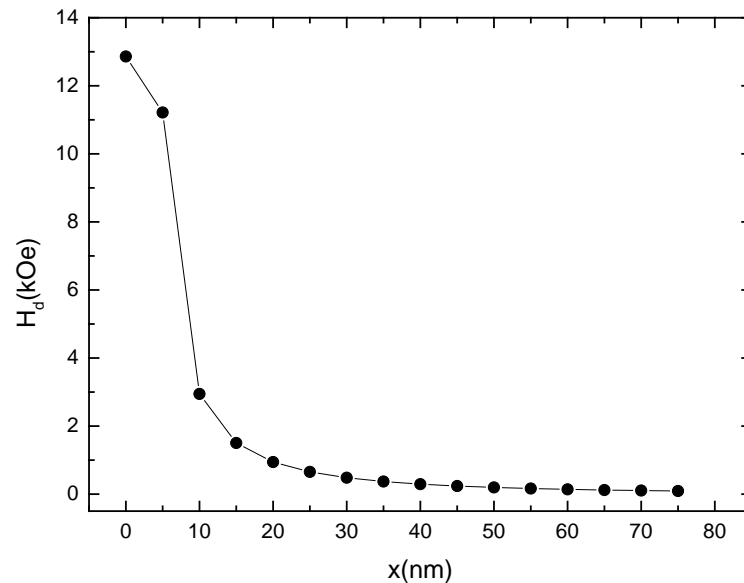
Figura 3.14: Nanopartícula cilíndrica com seção elíptica de ferro com  $a = 155$  nm,  $b = 55$  nm e  $h = 10$  nm.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Podemos ver na Figura 3.15 que o campo dipolar no final da nanopartícula é por volta de 13 kOe. A uma distância de 5nm, o campo dipolar ainda é 11 kOe, mas após 10 nm ele já cai para 2.9 kOe. Ele vai se aproximando de zero 45 nm após a nanopartícula. Portanto, após 45 nm de distância desta nanopartícula seria possível colocar outra garantindo que não haverá interferência de campos.

Figura 3.15: Curva do campo dipolar em função da distância em torno da nanopartícula.



Fonte: Elaborada pelo autor.

O campo dipolar é mais intenso em nanopartículas de Fe decorrente da magnetização de saturação do Fe ser maior que o do Py:  $M_s(\text{Fe}) = 1.7 \times 10^6 \text{ A/m}$  e  $M_s(\text{Py}) = 0.8 \times 10^6 \text{ A/m}$ ; ele também é função da fase magnética e da geometria da nanopartícula.

Observou-se que é mais favorável usar nanopartículas onde se forma vórtice, pois não há fuga de fluxo e o campo dipolar decai mais rapidamente logo após a nanopartícula, possibilitando colocar outra há uma distância bem menor sem que haja interferência de campos magnéticos.

Nossos resultados indicam que há formação de vórtice para as duas formas geométricas analisadas. De acordo com a literatura, dois vórtices podem ser formados em uma nanopartícula elíptica, desde que esta esteja associada a um substrato antiferromagnético. (MOURA; OLIVEIRA; CARRIÇO, 2012)

## 4 CONCLUSÕES

Apresentamos neste trabalho um estudo teórico da configuração de equilíbrio de nanopartículas cilíndricas com seção circular e elíptica de ferro e permalloy no estado de remanência magnética. Nosso estudo foi baseado na teoria de simulação micromagnética. Nossos resultados mostraram as fases que se formam nessas nanopartículas e como se distribui o campo dipolar na vizinhança das mesmas, para saber a qual distância uma pode ficar da outra sem que haja interferência de campos magnéticos.

A análise foi feita para nanopartículas isoladas. Mostramos que as fases magnéticas são funções dos parâmetros magnéticos, bem como de parâmetros geométricos.

Podemos ver que, nananopartícula que aparece a fase vórtice, o campo dipolar é intenso dentro da nanopartícula, mas cai rapidamente em torno dela. Nas outras fases, o campo também é intenso no interior da nanopartícula, porém ele decai mais lentamente, precisando de uma distância maior para poder colocar outra sem que haja interferência de campos. Embora possamos colocar uma densidade maior de nanopartículas que exibem vórtices, essas nanopartículas não são viáveis para gravação magnética, pois se quer estados uniformes.

Esses sistemas são de grande interesse tecnológico. O estudo da distribuição do campo dipolar em torno de uma nanopartícula em um estado magnético uniforme, atualmente utilizado para a mídia de gravação magnética, é importante para definir qual a menor distância possível para se colocar um outranopartícula sem que haja interferência do campo dipolar de uma na outra. Esse conhecimento pode aumentar a densidade de gravação magnética. Outro sistema são nanopartículas cilíndricas que apresentam vórtices magnéticos que tem sido utilizado como proposta de utilização em sistemas para geração de micro-ondas. (DUSSAUX et al., 2010)

Tem-se o objetivo de realizar os seguintes estudos posteriores: construir uma matriz de nanopartículas magnéticas para analisar a interação entre eles, saber qual distância uma nanopartícula pode ficar de outras sem que o campo de uma interfira no campo magnética da outra; e investigar os efeitos do campo dipolar em diferentes formas geométricas.

## REFERÊNCIAS

BEAN, C. P.; LIVINGSTON, J. D. Superparamagnetism. **Journal Of Applied Physics**. [sl], p. 1-11. abr. 1959.

DANTAS, A. L. Desafios do Nanomagnetismo. **Revista FAPERN**, v. 7, p. 144-149, 2008.

DUSSAUX, A. et al. Large microwave generation from current-driven magnetic vortex oscillators in magnetic tunnel junctions. **Communications**. SI, p. 1-6. abr. 2010.  
Disponível em:  
<<http://www.nature.com/ncomms/journal/v1/n1/full/ncomms1006.html#affil-auth>>.

Acesso em: 11 maio 2016.

GUIMARÃES, A.P. **Introdução ao Nanomagnetismo**. Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas. 2006.

GRIFFITHS, David J. **Eletrodinâmica**. 3. ed. São Paulo: Pearson, 2011. 424 p. Heloisa Coimbra de Souza.

LANCHES, Jonildo José; FURLAN, Diógenes Cogo. **Métodos Numéricos**. Departamento de Informática. UFP. Curitiba, 2007.

MARCONI, Marina de Andrade; LAKATOS, Eva Maria. **Fundamentos de Metodologia Científica**. 5. ed. São Paulo: Atlas, 2003.

MOURA, Thiago R. S. ; OLIVEIRA, Felipe F. ; CARRIÇO, A. S. et al. Tailoring the vortex core in confined magnetic nanostructures. **JournalofAppliedPhysics**, v. 111, p. 07D116, 2012.

REBOUÇAS, Gustavo de Oliveira Gurgel. **Nucleação de Vórtices e Paredes de Domínio em Nanoestruturas Magnéticas**. Tese de Doutorado. Departamento de Física Teórica e Experimental. UFRN. Natal/RN, 2010.

SILVA, AdanSady de Medeiros. **Nanoelementos Ferromagnéticos Acoplados a Substratos Antiferromagnético**. Tese de Doutorado. Departamento de Física. UERN. Mossoró/RN, 2011.

SILVA, Maria das Graças Dias da. **Efeitos da Interação Dipolar na Nucleação de Vórtices em Nano-Cilindros Ferromagnéticos.** Tese de Doutorado. Departamento de Física Teórica e Experimental. UFRN. Natal/ RN, 2014.