UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO GRANDE DO NORTE CAMPUS AVANÇADO DE NATAL DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA

RAVENA YASKARA SAMPAIO DE OLIVEIRA TAVARES

ANÁLISE DOS CAMPOS MAGNÉTICOS GERADOS POR NANOELEMENTOS COM GEOMETRIA CILÍNDRICA

NATAL/RN 2021

RAVENA YASKARA SAMPAIO DE OLIVEIRA TAVARES

ANÁLISE DOS CAMPOS MAGNÉTICOS GERADOS POR NANOELEMENTOS COM GEOMETRIA CILÍNDRICA

Monografia apresentada à Universidade do Estado do Rio Grande do Norte - UERN – como requisito obrigatório para obtenção do título de Bacharel em Ciência e Tecnologia.

Orientador: Prof. Dr. Leonardo Linhares Oliveira.

© Todos os direitos estão reservados a Universidade do Estado do Rio Grande do Norte. O conteúdo desta obra é de inteira responsabilidade do(a) autor(a), sendo o mesmo, passível de sanções administrativas ou penais, caso sejam infringidas as leis que regulamentam a Propriedade Intelectual, respectivamente, Patentes: Lei n° 9.279/1996 e Direitos Autorais: Lei n° 9.610/1998. A mesma poderá servir de base literária para novas pesquisas, desde que a obra e seu(a) respectivo(a) autor(a) sejam devidamente citados e mencionados os seus créditos bibliográficos.

Catalogação da Publicação na Fonte.

Universidade do Estado do Rio Grande do Norte.

T231a	Tavares, Ravena Yaskara Sampaio de Oliveira Tavares		
	ANÁLISE DOS CAMPOS MAGNÉTICOS GERADOS POR NANOELEMENTOS COM GEOMETRIA CILÍNDRICA. / Ravena Yaskara Sampaio de Oliveira Tavares Tavares Natal-RN, 2021. 34p.		
	Orientador(a): Prof. Dr. Leonardo Linhares Oliveira Oliveira.		
	Monografia (Graduação em Ciência e Tecnologia). Universidade do Estado do Rio Grande do Norte.		
	1. Ciência e Tecnologia. 2. Nanomagnetismo. 3. Campo magnético produzido por nanoestruturas. I. Oliveira, Leonardo Linhares Oliveira. II. Universidade do Estado do Rio Grande do Norte. III. Título.		

O serviço de Geração Automática de Ficha Catalográ ca para Trabalhos de Conclusão de Curso (TCC's) foi desenvolvido pela Diretoria de Informatização (DINF), sob orientação dos bibliotecários do SIB-UERN, para ser adaptado às necessidades da comunidade acadêmica UERN.

RAVENA YASKARA SAMPAIO DE OLIVEIRA TAVARES

ANÁLISE DOS CAMPOS MAGNÉTICOS GERADOS POR NANOELEMENTOS COM GEOMETRIA CILÍNDRICA

Monografia apresentada à Universidade do Estado do Rio Grande do Norte - UERN – como requisito obrigatório para obtenção do título de Bacharel em Ciência e Tecnologia.

Aprovada em: ___/___/___.

Banca examinadora

Ana Lúcia Dantas UERN

Leonardo Linhares Oliveira UERN

> Andréa Jane da Silva UERN

Dedico este trabalho a todos os professores que passaram pela minha vida acadêmica.

RESUMO

O estudo das propriedades magnéticas dos materiais aplicados em diversos dispositivos tecnológicos é de relevante interesse tanto para a indústria como para a ciência. O desenvolvimento de novas aplicações e o aprimoramento daquelas já existentes motivam os estudos de descrição do comportamento magnético de nanoelementos utilizados no desenvolvimento desses dispositivos. O maior conhecimento de características intrínsecas e a melhor previsibilidade e amoldamento dessas propriedades podem oportunizar o desenvolvimento de materiais muito mais precisos e direcionados a aplicações específicas, até mesmo ainda não exploradas. Uma característica de interesse em aplicações é o perfil do campo magnético produzido por tais nanopartículas, levando em consideração as dimensões geométricas da nanoestrutura e ainda os parâmetros magnéticos dos constituintes. Diante disso, no presente trabalho, foi feita a descrição teórica do perfil do campo magnético produzido por nanoestruturas magnéticas com diferentes geometrias constituídas de Fe₃O₄, SmCo₅ e Nd₂Fe₁₄B. A descrição contou com a utilização de um algoritmo numérico, que se baseou no método de campo efetivo local autoconsistente, o que permitiu a análise das propriedades de interesse, como o perfil do campo e da magnetização. Os perfis dos campos magnéticos e das curvas de magnetização foram sintetizados em gráficos e foi observada uma maior uniformidade da magnetização nas nanoestruturas que apresentaram determinadas características. Tais características estão relacionadas com as dimensões geométricas de cada estrutura, bem como com parâmetros inerentes de composição do material. Uma das relações mais claramente observadas foi a influência da magnetização de saturação do material nos resultados obtidos. Durante as análises se pôde perceber que materiais com altos valores de magnetização de saturação respondiam de maneira mais intensa às variações dimensionais no que se refere à uniformidade de magnetização da estrutura após a aplicação de um campo externo.

Palavras-chave: Nanomagnetismo. Campo magnético produzido por nanoestruturas. Fe₃O₄. SmCo₅. Nd₂Fe₁₄B.

ABSTRACT

The study of the magnetic properties of materials applied in various technological devices is of relevant interest for both industry and science. The development of new applications and the improvement of existing ones motivate studies to describe the magnetic behavior of nanoelements used in the development of these devices. Greater knowledge of intrinsic characteristics and better predictability and shaping of these properties can provide opportunities for the development of materials that are much more accurate and directed to specific applications, even unexplored ones. A characteristic of interest in applications is the profile of the magnetic field produced by such nanoparticles, taking into account the geometric dimensions of the nanostructure and also the magnetic parameters of the constituents. Therefore, in the present work, the theoretical description of the profile of the magnetic field produced by magnetic nanostructures with different geometries consisting Fe₃O₄, SmCo₅ and Nd₂Fe₁₄B was made. The description relied on the use of a numerical algorithm, which was based on the self-consistent local effective field method, which allowed the analysis of the properties of interest, such as the field profile and magnetization profile. The profiles of magnetic fields and magnetization curves were synthesized in graphs and a greater uniformity of magnetization was observed in the nanostructures that presented certain characteristics. Such characteristics are related to the geometric dimensions of each structure, as well as inherent parameters of material composition. One of the most clearly observed relationships was the influence of the material's saturation magnetization on the results obtained. During the analyses, it could be seen that materials with high saturation magnetization values responded more intensely to dimensional variations with regard to the magnetization uniformity of the structure after the application of an external field.

KEYWORDS: Nanomagnetism. Magnetic field produced by nanostructures. Fe₃O₄. SmCo₅. Nd₂Fe₁₄B.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1 - Histerese magnética de um material ferromagnético
Figura 3.1 - Representação esquemática de uma nanoestrutura cilíndrica submetida a ação de um campo magnético externo aplicado ao longo do eixo z
Tabela 3.1 - Magnetização de saturação Ms20
Tabela 3.2 - Parâmetros de simulação para o Fe ₃ O ₄ , o SmCo ₅ e o Nd ₂ Fe ₁₄ B20
Figura 3.2 - Campo gerado pela nanoestrutura cilíndrica de Fe ₃ O ₄ , $d = 30$ nm e h = 30 nm21
Figura 3.3 - Campo gerado pela nanoestrutura cilíndrica de SmCo ₅ , d = 30 nm e h = 30 nm
Figura 3.4 - Campo gerado pela nanoestrutura cilíndrica de $Nd_2Fe_{14}B$, d = 30 nm e h = 30 nm22
Figura 3.5 - Curva de magnetização gerada pela nanoestrutura cilíndrica de Fe ₃ O ₄ , $d = 30$ nm
Figura 3.6 - Curva de magnetização gerada pela nanoestrutura cilíndrica de SmCo ₅ , $d = 30$ nm
Figura 3.7 - Curva de magnetização gerada pela nanoestrutura cilíndrica de $Nd_2Fe_{14}B$, d = 30 nm e h = 30 nm
Figura 3.8 - Curvas de magnetização geradas por nanoestruturas cilíndricas de Fe ₃ O ₄ , SmCo ₅ e $Nd_2Fe_{14}B$, com d = 30 nm e h = 60 nm25
Figura 3.9 - Curvas de magnetização geradas por nanoestruturas cilíndricas de Fe ₃ O ₄ , SmCo ₅ e $Nd_2Fe_{14}B$, com d = 30 nm e h = 90 nm
Figura 3.10 - Curvas de magnetização geradas por nanoestruturas cilíndricas de Fe ₃ O ₄ , SmCo ₅ e Nd ₂ Fe ₁₄ B, com $d = 45$ nm e $h = 30$ nm
Figura 3.11 - Curvas de magnetização geradas por nanoestruturas cilíndricas de Fe ₃ O ₄ , SmCo ₅ e Nd ₂ Fe ₁₄ B, com $d = 60$ nm e h = 30 nm27

Figura 3.12 - Campos gerados pelas nanoestruturas cilíndricas de Fe ₃ O ₄ , SmCo ₅	$5 e Nd_2Fe_{14}B$,
com $d = 30 \text{ nm e } h = 60 \text{ nm}$	
Figura 3.13 - Campos gerados pelas nanoestruturas cilíndricas de Fe ₃ O ₄ , SmCo ₅	5 e Nd ₂ Fe ₁₄ B,
com $d = 30 \text{ nm e } h = 90 \text{ nm}$	29

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	8
2. FERROMAGNETISMO E TEORIA MICROMAGNÉTICA	12
2.1. CURVA DE MAGNETIZAÇÃO	12
2.2. A CÉLULA DE SIMULAÇÃO	14
2.3. ENERGIAS MAGNÉTICAS POR CÉLULA	14
2.3.1. Energia de troca	15
2.3.2. Energia zeeman	15
2.3.3. Energia de anisotropia uniaxial	16
2.3.4. Energia magnetostática	16
2.3.5. Energia magnética total do sistema	17
2.4. CAMPO MÉDIO LOCAL SOBRE CÉLULAS	17
2.5. CÁLCULO NUMÉRICO DA CONFIGURAÇÃO DE EQUILÍBRIO	18
3. ANÁLISE DOS CAMPOS MAGNÉTICOS E DAS CURVAS DE MAGNETI	(ZAÇÃO
	19
4. CONCLUSÕES	30
5. REFERÊNCIAS	31

1. INTRODUÇÃO

As aplicações de materiais com propriedades magnéticas não são recentes na história. Durante os séculos XV e XVI, foi construído um objeto a partir de uma agulha magnetizada que apontava para a direção norte, a bússola. Com um mecanismo baseado no alinhamento de seu campo com o campo magnético da terra, tal objeto foi amplamente utilizado nas navegações da expansão marítima observada, naquela época, no continente europeu (PESSOA, 2017).

Posteriormente, novas tecnologias aplicadas ao magnetismo oportunizaram o desenvolvimento dos ímãs permanentes, materiais amplamente utilizados em dispositivos como componentes de motores, alto-falantes, microfones, geradores e entre outros. Mais recentemente, o nanomagnetismo – ramo de estudo das propriedades de materiais magnéticos em escalas nanométricas - revolucionou as tecnologias de gravação em disco (PESSOA, 2017).

É importante ressaltar que as propriedades magnéticas das substâncias estão ligadas a uma propriedade intrínseca dos elétrons, seu spin, que é uma de suas propriedades quânticas. Ao spin está associado um momento magnético, o qual se comporta como uma minúscula agulha magnética, com uma tendência a se alinhar na direção do campo magnético a que está submetido. Nos átomos mais comuns, o spin total é zero, no entanto, para determinados elementos da tabela periódica, o spin total não é nulo, o que faz com que o átomo tenha um momento magnético permanente. Um bom exemplo destes últimos elementos são os do grupo de transição do ferro, como níquel, manganês, ferro e cobalto, e vários elementos de terras raras, como európio e o gadolínio (REZENDE, 2002).

O maior conhecimento de características intrínsecas - como as anteriormente citadas - e a melhor previsibilidade e amoldamento dessas propriedades podem oportunizar o desenvolvimento de materiais muito mais precisos e direcionados a aplicações específicas, até mesmo ainda não exploradas. Para se trabalhar a um nível tão interno da matéria, há que se fazer uso de um aparato tecnológico capaz de subsidiar esses trabalhos. E é justamente nesse cenário que a nanotecnologia, desde o século passado, vem se apresentando como um vasto ramo de estudo, ao trabalhar com elementos em escalas nanométricas (10⁻⁹ m) (AGRA; QUEIROZ JÚNIOR; QUEIROZ, 2018).

No que tange à ascensão da nanotecnologia nos dias atuais, cabe ressaltar que o estudo de nanoelementos magnéticos tem trazido contribuições para diversos setores, com destaque para o de tecnologia da informação, a exemplo da aplicação desses elementos nos mais modernos

mecanismos de gravação em disco; e na área da saúde, como na utilização de nanoelementos em técnicas de vetorização magnética de fármacos e hipertermia magnética (OLIVEIRA, 2016).

Recentemente, um efeito físico derivado do estudo do nanomagnetismo, conhecido como magnetorresistência gigante, motivou o desenvolvimento de tecnologias aplicadas à área da informação. Nessa linha, por meio da aplicação do efeito da magnetorresistência gigante, foi possível a criação de um dispositivo de gravação digital mais eficiente para o armazenamento de dados, as memórias magnetorresistivas de acesso aleatório (MRAMs). Anteriormente a estas, memórias de acesso aleatório - tanto as estáticas (SRAMs) quanto as dinâmicas (DRAMs) - eram voláteis, isto é, ao se interromper o fornecimento de energia, a informação nelas armazenada era perdida. (PESSOA, 2017).

O armazenamento de dados digitais em memórias magnetorresistivas de acesso aleatório é mantido pelo momento magnético de nanoelementos em remanência, após a aplicação de um campo magnético ou a passagem de uma corrente polarizada de spin. Então, estas memórias não precisam de fornecimento de energia constante para manter a informação gravada, como era o caso das SRAMs e DRAMs, em outras palavras, as MRAMs não são voláteis. (PESSOA, 2017, p. 3).

No final do ano de 2018, uma equipe da Universidade Tohoku, no Japão, apresentou um estudo de desenvolvimento de uma STT-MRAM (memória de acesso aleatório magnetorresistiva por transferência de torque por meio da rotação do spin) de 128Mb. A STT-MRAM apresentou velocidade de gravação de 14 nanossegundos para uso em aplicações de memória embarcada, que vão desde dispositivos operando aplicações de inteligência artificial a pequenos aparelhos da IOT (*internet of things*). Esta é a velocidade de gravação mais rápida já obtida para esse segmento, abrindo caminho para a produção em massa de STT-MRAMs de grande capacidade. Além disso, o chip funciona com uma tensão de apenas 1,2 V, consumindo, assim, muito pouca energia (SATO, H. et al., 2018).

Dessa forma, o estudo das propriedades magnéticas dos materiais aplicados nos diversos dispositivos acima citados é de relevante interesse tanto para a indústria como para a ciência. O desenvolvimento de novas aplicações e o aprimoramento daquelas já existentes motivam os estudos de descrição do comportamento magnético de nanoelementos dentre os quais estão os ferromegnéticos Fe e SmCo₅, estudados no decorrer deste trabalho.

Alguns estudos apontam características e propriedades de nanopartículas magnéticas, tais como os observados em Sampaio, Brandl e Falleiros (2018), em Souza (2019) e em Landi (2012).

Entretanto, uma característica de interesse em aplicações é o perfil do campo magnético produzido por tais nanopartículas, levando em consideração as dimensões geométricas da nanoestrutura e ainda os parâmetros magnéticos dos constituintes.

Diante disso, no presente trabalho, iremos fazer a descrição teórica do perfil do campo magnético produzidos por nanoestruturas magnéticas com diferentes geometrias constituídas de Ferro e SmCo₅. A descrição será feita com a utilização de um algoritmo numérico, que se baseia no método de campo efetivo local autoconsistente, que permitirá a análise das propriedades de interesse.

Sendo assim, esta pesquisa será desenvolvida com base no método explicativo, melhor classificando-se no modelo experimental. De acordo com Gil (2002), as pesquisas explicativas preocupam-se basicamente em explicar os fatores determinantes ou contributivos para a ocorrência dos fenômenos. No delineamento experimental, ainda conforme Gil (2002), o objeto de estudo é determinado, e variáveis capazes de influenciá-lo são selecionadas, formas de controle são definidas, e os efeitos que essas variáveis produzem são observados.

Apesar de este trabalho não ser desenvolvido com experimentação laboratorial propriamente dita, o enquadramento em experimental ainda é pertinente, pois, Gil (2002) nos diz que não necessariamente a pesquisa experimental deve ser realizada em laboratório, desde que apresente cumulativamente as propriedades: manipulação de ao menos uma das caraterísticas do objeto de estudo, controle do pesquisador na situação experimental e distribuição aleatória dos elementos participantes dos grupos experimentais.

Nesse ínterim, neste trabalho, a estrutura cilíndrica será descrita em termos de células de simulação. Estas irão representar uma porção do material em que não há variações apreciáveis da magnetização. A escolha do tamanho da célula de simulação é feita com base nos comprimentos característicos, dentre os quais podemos citar o comprimento de troca, que consiste basicamente em estimar qual é o tamanho máximo de uma região, em determinado material magnético, onde se pode garantir que não haverá variação substancial entre os momentos magnéticos (OLIVEIRA, 2016).

Ainda no escopo da célula de simulação, energias magnéticas de interação e um campo externo serão considerados. Sendo assim, as nanoestruturas serão descritas por um algorítimo que visa descrever a configuração de equilíbrio dos nanoelementos estudados. O cálculo da configuração

de equilíbrio é feito de modo a garantir que o momento magnético associado de cada célula esteja na direção do campo efetivo local que age sobre ela, isto é, que o torque seja nulo. Essa configuração é obtida com uso do método do campo efetivo local autoconsistente. Nessa linha, para proceder às simulações computacionais mencionadas, será utilizada a linguagem de programação Fortran e, para a representação gráfica e construção das ilustrações associadas aos eventos observados durante as simulações, o software Origin.

Para analisar o comportamento de um nanoelemento submetido a um campo magnético externo, deve-se levar em conta as energias internas associadas ao material estudado e as suas interações com o ambiente. Na descrição de sistemas magnéticos nanoestruturados, a teoria que tem sido utilizada com grande êxito é a do micromagnetismo. Nesse sentido, antes de se chegar às análises, será feita, nos tópicos seguintes, uma breve explanação sobre o modelo teórico do micromagnetismo e sobre as interações magnéticas envolvidas na descrição do perfil magnético dos materiais, as quais são utilizadas para o detalhamento das propriedades magnéticas das nanopartículas.

2. FERROMAGNETISMO E TEORIA MICROMAGNÉTICA

A teoria micromagnética descreve sistemas na escala de tamanho nanométrica e estuda os fenômenos que ocorrem no limiar entre o mundo macroscópico e o universo atômico. Desenvolvida entre as décadas de 1930 e 1940, foi entendida como o preenchimento da lacuna existente entre a teoria eletromagnética de Maxwell e a teoria quântica. As interações magnéticas descritas por essa teoria são a base para a descrição da configuração de equilíbrio de um sistema magnético na escala nanométrica (OLIVEIRA, 2016).

A configuração de equilíbrio para um valor de campo H é resultante de uma competição entre interações energéticas que ocorrem no sistema, tais como: a energia de troca, relacionada ao comportamento ferromagnético de metais; a energia Zeeman, decorrente da interação dos momentos magnéticos com o campo magnético externo; a energia de anisotropia, que provém da ocorrência de direções preferenciais para a magnetização e, por fim, a energia magnetostática, produto das interações mútuas de todos os dipolos magnéticos (PESSOA, 2017).

Nas próximas seções, será apresentado o conceito de célula de simulação e serão discriminadas todas as energias de interação acima citadas, bem como os respectivos campos magnéticos gerados por cada uma dessas interações, com o fim de delimitar o campo efetivo local atuante sobre a célula de simulações do material.

2.1. CURVA DE MAGNETIZAÇÃO

Segundo Guimarães (1998, apud OLIVEIRA, 2016) uma das mais importantes formas de caracterização de sistemas magnéticos é a curva de magnetização como função do campo magnético externo M(H). A referida curva apesenta características que possibilitam a identificação da natureza magnética de um material e, além disso, permite a captura de informações sobre as fases do material magnético e das energias que influenciam na determinação dessas fases (OLIVEIRA, 2016).

A figura mostrada a seguir é um exemplo da curva de magnetização de um material ferromagnético sob ação de um campo magnético externo.





Fonte: Oliveira, 2016.

A Figura 1 traz uma curva típica de histerese da magnetização de um material ferromagnético. Conforme se pode observar, iniciando-se com uma configuração de $H = 0 \ e \ M = 0$ (estado não magnetizado), um campo magnético é aplicado de maneira a saturar a magnetização, ou seja, orientando os domínios magnéticos na direção do campo externo. Posteriormente ao atingimento da saturação, o campo externo tem a sua intensidade gradativamente diminuída até que este possua um valor nulo. Nessa configuração de campo externo nulo após a saturação, a magnetização líquida remanescente M_r é chamada de magnetização remente. A partir desse momento, o campo externo volta a ser aplicado, mas em sentido oposto ao da M_r . Um estado de magnetização M se mantém, mas agora oposta ao campo aplicado até que esse campo - Halcance uma intensidade – $H = -H_c$ (campo coercitivo), ponto em que a magnetização M se inverte e passa a se orientar no sentido do campo, que continua aumentando até uma próxima saturação no sentido do último campo aplicado. O caminho de retorno é equivalente, como pode ser observado no citado gráfico (OLIVEIRA, 2016).

Jiles (1991, apud OLIVEIRA, 2016) afirma que o comportamento histerético, observado na curva da Figura 1, é assim denominado pelo fato de o sistema conservar alguma propriedade mesmo na ausência do estímulo que as gerou.

É ainda interessante mencionar que:

Essa curva apresenta uma histerese onde a largura, definida pela intensidade do campo coercivo, informa sobre se o material ferromagnético é duro ou macio. Materiais duros apresentam curvas de magnetização, $\vec{M}(H)$, aproximadamente quadradas e com largura considerável, sendo então ideais para imãs permanentes, por exemplo, pois uma vez magnetizados assim permanecem nesse estado quando o campo é removido. Materiais magnéticos classificados como macios têm curvas de histerese magnética estreitas, significando que sua coercividade é muito baixa e sua característica magnética pode ser alterada com mais facilidade (MCCURRIE, 1994, e JILES, 1991, apud OLIVEIRA, 2016, p. 25).

2.2. A CÉLULA DE SIMULAÇÃO

Quando se estuda nanoestruturas com dimensões na ordem de nanômetros, observa-se uma inviabilidade no cálculo numérico computacional se a distribuição magnética do sistema for considerada a nível de átomo. Nesse sentido, a ideia de célula de simulação consiste em, no lugar de os cálculos dos momentos magnéticos serem feitos átomo a átomo, realizar simulações por célula, a qual comporta uma grande quantidade de átomos e, consequentemente, diminui o número de iterações nos cálculos computacionais (PESSOA, 2017).

O momento magnético líquido da célula de simulação é a soma dos momentos magnéticos dos átomos nela contidos. No entanto, o tamanho dessa célula possui um limite, o qual está ligado ao comprimento de troca do material em análise, de maneira que tal tamanho seja pequeno ao ponto de os momentos magnéticos dos átomos serem praticamente paralelos, ou seja, de se observar na célula de simulação um monodomínio magnético, o que ocorre quando o diâmetro da célula de simulação é menor que o comprimento de troca (PESSOA, 2017).

2.3. ENERGIAS MAGNÉTICAS POR CÉLULA

Todas as energias de interação existentes nos sistemas magnéticos serão consideradas a nível de célula de simulação. Nessa perspectiva, a seguir serão apresentadas formulações adaptadas aos parâmetros das células de simulação para cada um dos tipos de energia de interação.

2.3.1. Energia de troca

De acordo com Pessoa (2017), a energia de troca explica a tendência de momentos magnéticos vizinhos serem paralelos. Sendo assim, conforme Oliveira (2016), a energia de troca entre todas as células cúbicas de um sistema e suas primeiros vizinhas é dada por:

$$\frac{E_{troca}}{\delta^3} = \frac{A}{\delta^2} \sum_{i,k} [1 - \hat{m}_i \cdot \hat{m}_k] \quad (2.0)$$

onde o somatório em *i*,*k* – em que *i* denota a célula de simulação local e *k* as suas primeiras vizinhas - representa a soma da energia de troca por unidade de volume, \hat{m} é o versor que aponta na direção dos momentos magnéticos da célula unitária e δ é o comprimento do lado da célula de simulação de geometria cúbica.

2.3.2. Energia zeeman

A interação entre o campo magnético externo H e o momento magnético m é medida pela energia de interação de Zeeman (OLIVEIRA, 2016). Tal energia de interação representa a tendência de que o momento magnético da célula de simulação fique alinhado com o campo externo \vec{H} , situação em que a energia de Zeeman atinge o seu valor mínimo (PESSOA, 2017).

Segundo Oliveira (2016), a energia de Zeeman por unidade de volume da célula de simulação é descrita pela equação:

$$\frac{E_{Zeeman}}{\delta^3} = \vec{H} \cdot M_S \cdot \sum_i \hat{m}_i \quad (2.1)$$

em que M_S é a magnetização de saturação inerente ao material magnético utilizado e o somatório em \hat{m}_i representa uma parcela do momento magnético $\vec{m} = M_S \cdot \hat{m}_i$ associado a cada célula de simulação *i*.

2.3.3. Energia de anisotropia uniaxial

A energia de anisotropia está ligada à existência de uma orientação preferencial para o alinhamento dos momentos em uma nanoestrutura e, a depender da intensidade da energia de anisotropiada de cada estrutura, um sólido magnético pode ser caracterizado como duro ou macio. Nesse ínterim, para o caso em estudo, será considerada a ocorrência de uma única direção preferencial, o que justifica a denominação como uniaxial (OLIVEIRA, 2016).

Nessa linha, tomando a direção x como sendo a de fácil magnetização (magnetização preferencial) e sabendo que $m_x = \sin \theta$ é a componente na direção x do versor \hat{m} do momento magnético da célula de simulação, em que teta é o ângulo entre esta direção e o citado momento magnético, temos que a densidade de energia de anisotropia uniaxial em i células de simulação é dada por:

$$\frac{E_a}{\delta^3} = K \sum_i (m_i^x)^2 \quad (2.2)$$

em que K é a constante de anisotropia cristalina do material (OLIVEIRA, 2016).

2.3.4. Energia magnetostática

Conforme Pessoa (2017), essa energia de interação é produto das interações entre os dipolos magnéticos tomados um a um, isto é, ela descreve a influência que um campo magnético de um dipolo tem sobre todos os outros dipolos, para cada um dos dipolos das células de simulação apresentados em uma nanoestrutura.

Sendo assim, como cada célula de simulação *i* interage com todas as outras células *k*, a energia dipolar ou magnetostática por unidade de volume é tida por:

$$\frac{E_{dip}}{\delta^3} = \frac{M_s^2}{2} \sum_i \sum_k \left(\frac{\widehat{m}_i \cdot \widehat{m}_k}{n_{ik}^3} - \frac{3(\widehat{m}_i \cdot \widehat{m}_k)(\widehat{m}_k \cdot \widehat{n}_{ik})}{n_{ik}^5} \right) \quad (2.3)$$

em que \vec{n} é um vetor adimensional que busca representar a distância entre as células de simulação como função das suas arestas $\vec{n} = \vec{r}/\delta$ (OLIVEIRA, 2016).

2.3.5. Energia magnética total do sistema

A energia magnética total do sistema por unidade de volume representa a soma das interações internas – energia de troca, energia de anisotropia uniaxial e energia magnetostática – e da energia externa – energia de Zeeman. Destarte, E_T^V é dada por:

$$E_T^V = \frac{A}{\delta^2} \sum_{i} \sum_{k} [1 - \hat{m}_i \cdot \hat{m}_k] - \vec{H} \cdot M_S \sum_{i} \hat{m}_i - K \sum_{i} (m_i^x)^2 + \frac{M_S^2}{2} \sum_{i} \sum_{k} \left(\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_k}{n_{ik}^3} - \frac{3(\hat{m}_i \cdot \hat{m}_k)(\hat{m}_k \cdot \hat{n}_{ik})}{n_{ik}^5} \right)$$
(2.4)

onde se pode observar a presença das expressões mostradas em (2.0), (2.1), (2.2) e (2.3) (OLIVEIRA, 2016).

2.4. CAMPO MÉDIO LOCAL SOBRE CÉLULAS

Para o cálculo do campo efetivo médio \vec{H}_{eff}^{i} atuante sobre uma célula de simulação *i*, tem-se por base a energia total por unidade de volume descrita em (2.4) e deve ser utilizada a seguinte equação:

$$\vec{H}_{eff}^{i} = -\frac{1}{M_{S}} \frac{\partial E_{i}}{\partial \hat{m}_{i}} \quad (2.5).$$

Nessa equação, a derivada deve ser calculada para a energia total sobre o sistema (OLIVEIRA, 2016).

Assim sendo, aplicando-se as derivadas parciais em cada uma das energias associadas ao arranjo magnético geral, obtém-se:

$$\vec{H}_{eff}^{i} = \vec{H} + \frac{A}{M_{S}\delta^{2}} \sum_{k} \hat{m}_{k} + \frac{2K}{M_{S}} m_{i}^{x} \hat{x} + \frac{M_{S}}{2} \sum_{k} \left(\frac{3(\hat{m}_{k} \cdot \vec{r}_{ik})\vec{r}_{ik}}{r_{ik}^{5}} - \frac{\hat{m}_{k}}{r_{ik}^{3}} \right) \quad (2.6)$$

e o método de cálculo utilizado para dispor da configuração de equilíbrio magnético é o método de campo efetivo local autoconsistente, que será apresentado a seguir (OLIVEIRA, 2016).

2.5. CÁLCULO NUMÉRICO DA CONFIGURAÇÃO DE EQUILÍBRIO

Para se chegar à configuração de equilíbrio desejada no mapeamento do campo magnético dos nanoelementos estudados, será usado o método de cálculo autoconsistente para cada valor de campo magnético externo ao longo da curva de magnetização (PESSOA, 2017).

A configuração de equilíbrio pretendida para o sistema apenas será obtida quando momentos magnéticos de todas as células de simulação estiverem alinhados com o campo magnético efetivo de cada uma das células, fato que ocorre quando o torque realizado pelo campo magnético efetivo local sobre o dipolo magnético da célula for zerado (2.7), (PESSOA, 2017).

Assim, inicializa-se o sistema especificando todos os momentos magnéticos locais. Logo após, calcula-se o campo magnético efetivo sobre cada momento magnético local, considerando todos os campos apresentados na equação 2.6. De posse do campo efetivo sobre cada célula, verifica-se a orientação relativa entre o momento magnético de cada célula e o respectivo campo efetivo sobre ela. Se essa orientação estiver dentro de uma tolerância aceitável, então a configuração de equilíbrio é encontrada. Caso contrário, assume-se uma nova orientação para os momentos magnéticos locais, que é a orientação do campo efetivo obtida, e o sistema é reinicializado com essa nova configuração entre a orientação do momento magnético e do campo efetivo sobre cada célula e uma nova comparação entre a orientação do momento magnético e do campo efetivo é feita. Tal comparação é realizada de maneira recursiva até que a configuração de equilíbrio para cada célula de simulação seja encontrada (PESSOA, 2017).

3. ANÁLISE DOS CAMPOS MAGNÉTICOS E DAS CURVAS DE MAGNETIZAÇÃO

Neste capítulo apesentaremos a análise do perfil do campo magnético produzido por nanoestruturas com geometria cilíndrica. Tal estrutura é submetida inicialmente a um campo magnético externo aplicado ao longo do eixo do cilindro (eixo z), com intensidade suficiente para saturar a magnetização da amostra. A Figura 3.1 mostra uma representação esquemática do sistema. Em seguida a intensidade do campo magnético foi reduzida até se obter o estado de magnetização remanente, M(H = 0).



Figura 3.1 - Representação esquemática de uma nanoestrutura cilíndrica submetida a ação de um campo magnético externo aplicado ao longo do eixo z.

Fonte: elaborado pela autora, 2021.

V

De posse dos dados gerados pela execução do código e construídos os gráficos a esses dados referentes, pode-se efetuar diversas comparações de comportamento dos materiais estudados, à medida em que se variam os parâmetros dimensionais das nanoestruturas. Nesse sentido, é interessante que se tenha o entendimento de que as propriedades intrínsecas dos materiais estudados influenciam fortemente na descrição do campo e da curva de magnetização, conforme mencionado na Seção 2.1.

Inicialmente, uma importante característica desses materiais que deve ser considerada nas análises é a magnetização de saturação (M_s), definida no capítulo anterior. A Tabela 3.1 apresenta os parâmetros magnéticos utilizados na descrição das nanoestruturas de Magnetita (Fe₃O₄), SmCo₅ e Nd₂Fe₁₄B e a Tabela 3.2 mostra as dimensões geométricas escolhidas para analisar o perfil do campo magnético. Tais dimensões são da ordem dos sistemas estudados recentemente pela academia e correspondem a dimensões de sistemas já empregados em dispositivos tecnológicos.

Material	$M_s(k0e)$	A (10 ¹² J/m)	Ku (10 ⁶ J/m ³)		
Fe ₃ O ₄	0,485	13,2	0,0136		
SmCo ₅	0,852	22	17		
Nd ₂ Fe ₁₄ B	1,282	7,7	5		

Tabela 3.1 - Magnetização de saturação M_s

Fonte: Jimenez-villacorta, 2014.

Tabela 3.2 - Parâmetros de simulação para o Fe₃O₄, o SmCo₅ e o Nd₂Fe₁₄B

Geometria	Diâmetro (nm)	Altura (nm)
		30
	30	60
		90
	45	30
Cilíndrica		60
		90
		30
	60	60
		90

Fonte: elaborada pela autora, 2021.

As Figuras 3.2 a 3.4 apresentam uma visualização do campo magnético produzido pelas nanoestruturas com algumas das dimensões apresentadas na tabela 3.2. Nelas pode-se observar um mapa vetorial que representa o perfil do campo magnético produzido na região externa à nanoestrutura. No intuito de facilitar a visualização do campo magnético, tais figuras mostram uma visualização que corresponde a um recorte da nanoestrutura, nestes casos o plano yz.



Figura 3.2 - Campo gerado pela nanoestrutura cilíndrica de Fe₃O₄, d = 30 nm e h = 30 nm

Fonte: elaborada pela autora, 2021.



Figura 3.3 - Campo gerado pela nanoestrutura cilíndrica de SmCo₅, d = 30 nm e h = 30 nm

Fonte: elaborada pela autora.

Figura 3.4 - Campo gerado pela nanoestrutura cilíndrica de Nd₂Fe₁₄B, d = 30 nm e h = 30 nm

Fonte: elaborada pela autora, 2021.

As estruturas magnéticas apresentadas nas Figuras 2 a 4 apresentam magnetização uniforme na direção do eixo do cilindro. O perfil do campo magnético é apresentado em cada figura. É possível observar que o campo magnético é de caráter dipolar. Na face superior da nanoestrutura mostrada na figura 3.3, por exemplo, o campo magnético aponta no sentido positivo do eixo z e possui uma intensidade média de 3.5 kOe. A intensidade do campo diminui se observarmos pontos relativamente distantes da nanoestrutura. Por exemplo, se fixarmos a coordenada z em meia altura da nanoestrutura pode-se observar que a 6 nm de distância em relação à superfície lateral a intensidade do campo magnético é de cerca de 2,68 kOe. Aumentando ainda mais a distância em relação à superfície lateral pode-se observar que o campo diminui consideravelmente, por exemplo, para uma distância de 12 nm a intensidade do campo magnético é de 0.5 kOe. É importante notar que, nestes dois últimos pontos citados, o campo magnético aponta no sentido negativo do eixo z.

Analisando esses gráficos, podemos observar também que, apesar da variação na intensidade de cada um dos campos, conforme pode ser notado na barra de cores à direta nas figuras – com um máximo de 2,52 kOe para o Fe₃O₄ (Figura 3.2), de 4,26 kOe para o SmCo₅ (Figura 3.3) e de 5,28 kOe para o Nd₂Fe₁₄B (Figura 3.4) – o comportamento das linhas de campo sugere um

perfil de magnetização uniforme das estruturas, para a dimensão de diâmetro d = 30 nm e altura h = 30 nm, ou seja, para estruturas em que a razão entre o diâmetro e a altura é igual a 1, h/d = 1.

O que também pode ser notado é a relação entre a magnetização de saturação do material M_s e a intensidade do campo gerado pela nanoestrutura. Nesse sentido, percebe-se que, enquanto o Fe₃O₄ tem $M_s = 0,485 \ kOe$ e um campo variando entre 0,03 kOe e 2,52 kOe, o Nd₂Fe₁₄B tem $M_s = 1,282 \ kOe$ e um campo variando entre 0,08 kOe e 5,28 kOe, para as dimensões em apreço nos gráficos. Dessa forma, ao se fixar as dimensões, observa-se a formação de um campo mais intenso à medida que M_s aumenta.

Para corroborar as percepções anteriormente colocadas, analisemos as curvas de saturação desses mesmos materiais, com essas mesmas dimensões.

Figura 3.5 - Curva de magnetização gerada pela nano
estrutura cilíndrica de Fe₃O₄, d=30~nm
eh=30~nm

Fonte: elaborada pela autora, 2021.

Figura 3.6 - Curva de magnetização gerada pela nano
estrutura cilíndrica de SmCo₅, d = 30 nm e h = 30 nm

Fonte: elaborada pela autora, 2021.

Figura 3.7 - Curva de magnetização gerada pela nanoestrutura cilíndrica de Nd₂Fe₁₄B, d = 30 nm e h = 30 nm

Fonte: elaborada pela autora, 2021.

Como pode ser visto, sabendo que M_z é a intensidade da magnetização na direção z e que M é a magnetização total, quanto mais próxima a razão M_Z/M estiver de 1, maior é uniformidade do perfil de magnetização do material na situação em análise. Sendo assim, à exceção de um desvio de aproximadamente 20% na curva de magnetização do Nd₂Fe₁₄B, o qual poderia ser explicado pelo seu alto valor de M_s , estruturas em que h/d = 1 realmente sugerem um perfil de magnetização uniforme.

Analisemos agora estruturas em que h/d = 2, as quais podem ser observadas na Figura 3.8. Nesse grupo percebe-se que, embora ainda exista um desvio na curva de magnetização da nanoestrutura de maior M_s (Nd₂Fe₁₄B), esse desvio é da ordem de 10%, menor do que o verificado na mesma nanoestrutura quando h/d = 1. Ao compararmos também as curvas apresentadas na Figura 3.9, onde a h/d = 3, o desvio é ainda menor, chegando a aproximadamente 5%, para o Nd₂Fe₁₄B.

Fato relevante a ser comentado é que, dentre as nanoestruturas simuladas, aquelas que apresentaram um perfil de magnetização mais uniforme foram as de d = 30 nm e h = 90 nm, mesmo em materiais de M_s mais alta.

Figura 3.8 - Curvas de magnetização geradas por nanoestruturas cilíndricas de Fe₃O₄, SmCo₅ e Nd₂Fe₁₄B, com d = 30 nm e h = 60 nm

Fonte: elaborada pela autora, 2021.

Figura 3.9 - Curvas de magnetização geradas por nanoestruturas cilíndricas de Fe₃O₄, SmCo₅ e Nd₂Fe₁₄B, com d = 30 nm e h = 90 nm

Fonte: elaborada pela autora, 2021.

Figura 3.10 - Curvas de magnetização geradas por nanoestruturas cilíndricas de Fe₃O₄, SmCo₅ e Nd₂Fe₁₄B, com d = 45 nm e h = 30 nm

Fonte: elaborada pela autora.

Outro fenômeno importante notado nas análises das simulações foi a perda de uniformidade da magnetização de saturação em determinadas dimensões estruturais. Conforme pode ser visto nas Figuras 3.10 e 3.11, fixando-se a altura em h = 30 nm e simulando diâmetros de d = 45 nm e d = 60 nm, se obtém curvas com considerável perda de intensidade de magnetização na direção z. Apesar de ocorrer mais acentuadamente na nanoestrutura de Nd₂Fe₁₄B, que possui M_s mais alta, o citado fenômeno também pode ser verificado nas outras duas nanoestruturas simuladas, as quais apresentam um M_s mais baixo.

Figura 3.11 - Curvas de magnetização geradas por nanoestruturas cilíndricas de Fe₃O₄, SmCo₅ e Nd₂Fe₁₄B, com d = 60 nm e h = 30 nm

Fonte: elaborado pela autora, 2021.

Vamos discorrer um pouco agora sobre a distribuição do campo no entorno das nanoestruturas e como essa distribuição varia em algumas delas. Para se fazer esta análise, escolhemos as nanoestruturas de d = 30 nm e h = 60 nm e d = 30 nm e h = 90 nm, pois elas apresentaram curvas de magnetização mais uniformes que as demais. Ademais, para fins de padronização,

optou-se por fixar a escala de cores para o intervalo de campo de [0 kOe,5.5 kOe]. Avaliemos então os gráficos a seguir.

Figura 3.12 - Campos gerados pelas nanoestruturas cilíndricas de Fe₃O₄, SmCo₅ e Nd₂Fe₁₄B, com d = 30 nm e h = 60 nm

Fonte: elaborada pela autora, 2021.

Conforme se pode observar pela distribuição das cores, para nanoestruturas de dimensões descritas na Figura 3.12, a intensidade do campo é maior no entorno do cilindro composto por Nd₂Fe₁₄B e menor no entorno do cilindro composto por Fe₃O₄. Ao relacionarmos esse fato com os valores de M_s de cada material, observamos, na situação em análise, que a intensidade do campo é maior quanto maiores forem os valores de magnetização de saturação do material.

Ressalte-se ainda o fato de as maiores intensidades de campo estarem concentradas nas superfícies superiores e inferiores das nanoestruturas, ao passo que, nas superfícies laterais, essa intensidade é menor. Vejamos agora (Figura 3.13) o que a variação na altura pode provocar.

Figura 3.13 - Campos gerados pelas nanoestruturas cilíndricas de Fe₃O₄, SmCo₅ e Nd₂Fe₁₄B, com d = 30 nm e h = 90 nm

Fonte: elaborado pela autora, 2021.

Observando-se a Figura 3.13, fica clara a redução da intensidade do campo ao se alongar a nanoestrutura cilíndrica. Tanto nas superfícies superiores e inferiores quanto nas superfícies laterais, verifica-se, apenas pela distribuição de cores, um campo menos intenso quando a altura é h = 90 nm. Traduzindo isso em valores, avaliando-se o composto de Nd₂Fe₁₄B, podemos citar o exemplo da intensidade de 0.9 kOe do campo em meia altura na nanoestrutura de dimensões 30nm x 60nm, percorrendo 3nm no sentido negativo do eixo y, a partir da superfície lateral. Em contrapartida, temos, à mesma altura e no mesmo ponto do eixo y, um campo cuja intensidade é 0.47 kOe, na estrutura de 30nm x 90nm, para o mesmo material. Esse padrão também é percebido nas nanoestruturas dos demais compostos.

Em relação aos campos produzidos pelas nanoestruturas que apresentam composição e parâmetros dimensionais descritos nos gráficos das Figuras 3.10 e 3.11, o perfil do campo externo produzido não apresentou caráter dipolar como esses anteriormente analisados.

4. CONCLUSÕES

Em relação aos perfis magnéticos das estruturas submetidas às simulações computacionais, o que se pôde observar no decorrer das análises efetuadas é que estas estruturas apresentaram configurações mais estáveis em determinadas dimensões. Pode-se citar, como exemplo de disposição estrutural com magnetização mais uniformemente distribuída, as nanoestruturas de d = 30 nm e h = 90 nm. Outro fenômeno importante notado nas análises das simulações foi a perda de uniformidade da magnetização em determinadas dimensões estruturais, principalmente quando se promovia o achatamento da nanoestrutura cilíndrica.

Uma das relações mais claramente observadas foi a influência da magnetização de saturação do material nos resultados obtidos. Durante as análises se pôde perceber que materiais com altos valores de magnetização de saturação (M_s) respondiam de maneira mais intensa às variações dimensionais, no que se refere à uniformidade de magnetização da estrutura após a aplicação de um campo externo. Quanto mais alto era valor de M_s menos uniforme era o perfil de magnetização da nanoestrutura quando se variavam os parâmetros dimensionais.

Nesse contexto, futuras abordagens com o fito de dar continuidade a este trabalho podem envolver simulações em uma diversidade maior de dimensões e geometrias, o que não foi possível aqui pelas limitações de tempo e em equipamentos de informática. Nesse sentido, explorar o perfil do campo magnético produzido por estruturas com simetrias diferentes, tais como retangulares e esféricas, auxiliaria em uma maior compreensão do perfil das fases magnéticas que as nanoestruturas apresentam, como função de seus parâmetros geométricos.

5. REFERÊNCIAS

AGRA, A. L. F.; QUEIROZ JÚNIOR, I. S.; QUEIROZ, S. K. S. S. **Estudo da interação entre nanoelementos magnéticos planares.** Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Ciência e Tecnologia) – Universidade Federal Rural do Semiárido. Mossoró, p. 14. 2018.

JIMENEZ-VILLACORTA, L. H. L. F. Advanced permanent magnetic materials. In: Nanomagnetism. [S.l.: s.n.], 2014. cap. 7, p. 160 – 189. ISBN 978-1-910086-04-9.

LANDI, G.T. **Simulações estocásticas de nanopartículas magnéticas.** Tese (Doutorado em Ciências) – Instituto de Física, Universidade de São Paulo. São Paulo, p. 106. 2012.

OLIVEIRA, L. L. **Nanoestruturas magnéticas do tipo núcleo-casca:** um estudo do impacto do campo dipolar. Tese (Doutorado em Física) - Departamento de Física Teórica e Experimental, Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Natal, p. 153. 2016.

PESSOA, N. L. **Controles de paredes de domínio em nanoanéis de NiFe em estruturas núcleo-casca cilíndricas com acoplamento dipolar.** Dissertação (Mestrado em Física) -Departamento de Física Teórica e Experimental, Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Natal, p. 78. 2017.

REZENDE, S. M. Nanomagnetismo. **Comciência**, 2002. Disponível em: < https://www.comciencia.br/dossies-1-72/reportagens/nanotecnologia/nano14.htm>. Acesso em: 29 de ago. de 2021.

SAMPAIO, G. M.; BRANDL, A. L.; FALLEIROS, J. P. B. Nanopartículas Magnéticas: Simulações de Curvas de Magnetização e Função do Campo para o Regime Superparamagnético. **Physicae Organum**, Brasília, vol. 4, n. 1, 2018. Disponível em: https://periodicos.unb.br/index.php/physicae/article/view/12618>. Acesso em: 01 de jun. de 2021.

SATO, H. et al. **14ns write speed 128Mb density Embedded STT-MRAM with endurance>10¹⁰ and 10yrs retention@85°C using novel low damage MTJ integration process**. IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), 2018, pp. 27.2.1-27.2.4, doi: 10.1109/IEDM.2018.8614606.

SOUZA, C. M. Efeitos termomagnéticos em aglomerados de nanopartículas magnéticas. Tese (Doutorado em Física) - Departamento de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Natal, p. 142. 2019.