



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

VAGNER CAVALCANTE DA SILVA

**ANÁLISE DE NANOESTRUTURAS BI-MAGNÉTICAS DO TIPO NÚCLEO-CASCA
COM GEOMETRIA ESFÉRICA**

NATAL/RN

2023

VAGNER CAVALCANTE DA SILVA

**ANÁLISE DE NANOESTRUTURAS BI-MAGNÉTICAS DO TIPO NÚCLEO-CASCA
COM GEOMETRIA ESFÉRICA**

Monografia apresentada ao Curso de Ciência e Tecnologia, campus avançado de Natal, Universidade do Estado do Rio Grande do Norte, como requisito à obtenção do título de bacharel em ciências e tecnologia.

Orientador: Prof. Dr. Leonardo Linhares Oliveira

NATAL/RN

2023

© 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 nº 9.279/1996 e Direitos Autorais: Lei nº 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.

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

S586a Silva, Vagner Cavalcante da
ANÁLISE DE NANOESTRUTURAS BI-MAGNÉTICAS
DO TIPO NÚCLEO-CASCA COM GEOMETRIA
ESFÉRICA. / Vagner Cavalcante da Silva. - Natal-RN,
2023.
60p.

Orientador(a): Prof. Dr. Leonardo Linhares Oliveira.
Monografia (Graduação em Ciência e Tecnologia).
Universidade do Estado do Rio Grande do Norte.

1. Ímãs permanentes. 2. Nanopartículas bi-
magnéticas. 3. Produto energético máximo. I. Oliveira,
Leonardo Linhares. II. Universidade do Estado do Rio
Grande do Norte. III. Título.

O serviço de Geração Automática de Ficha Catalográfica 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.

VAGNER CAVALCANTE DA SILVA

**ANÁLISE DE NANOESTRUTURAS BI-MAGNÉTICAS DO TIPO NÚCLEO-CASCA
COM GEOMETRIA ESFÉRICA**

Monografia apresentada ao Curso de
Ciência e Tecnologia, campus avançado de
Natal, Universidade do Estado do Rio
Grande do Norte, como requisito à obtenção
do título de bacharel em ciências e
tecnologia.

Aprovada em: ____/____/____.

BANCA EXAMINADORA

Dr. Prof. Leonardo Linhares Oliveira (Orientador)
Universidade do Estado do Rio Grande do Norte – UERN

Prof. Dácio Michel da Cruz Souza
Universidade do Estado do Rio Grande do Norte – UERN

Dr. Prof. Bráulio Batista Soares
Universidade do Estado do Rio Grande do Norte – UERN

AGRADECIMENTOS

Quero iniciar primeiramente a Deus, por me permitir ultrapassar meus limites com saúde para mim e para minha família.

Agradeço a minha família, onde seus esforços propiciaram a mim tudo que necessitei nesta formação.

Agradeço ao meu orientador, Dr. Prof. Leonardo Linhares de Oliveira, por toda dedicação e paciência no ato de ensinar, de ensinar são só a mim e sim a todos seus alunos, sendo muito perceptível seu empenho e amor a profissão de professor, tendo esse empenho despertando em mim a vontade de aprender e compartilhar o conhecimento. Agradeço também pelas muitas reuniões e tempo dedicado a essa pesquisa, como também por me permitir utilizar sua tese de doutorado como base da minha pesquisa.

Agradeço a todo corpo docente da Universidade do estado do Rio Grande do Norte, pela dedicação e qualidade de ensino, todos altamente capacitados e qualificados para ensinar, ensinar não somente o conteúdo em si, e sim como se tornar uma pessoa melhor e abrir nossa mente para outras perspectivas.

Agradeço a toda universidade pelo ótimo ambiente, apoio ao estudante e qualidade em sua estrutura, que nos permite focar somente no estudo.

RESUMO

Em termos de ímãs permanentes, as nanopartículas bi-magnéticas do tipo núcleo casca com geometria esférica, nos permite melhorar o produto energético máximo, que é um fator impactante na qualidade de um ímã permanente, essas nanopartículas partem da combinação de propriedades de materiais ferromagnéticos duros e macios. Essa pesquisa busca analisar esse tipo de estrutura com geometria esférica por meio de artifícios da teoria micromagnética, compreendendo as energias magnéticas em termos de célula de simulação, e posteriormente partindo para o cálculo numérico computacional, onde foi realizado um estudo teórico do produto energético máximo de dois sistemas nanoestruturados, um constituído de Fe@NdFeB e outro Fe@SmCo₅, onde em ambos, as dimensões do núcleo variam em 3, 5, 12 e 21 nanômetros respectivamente e casca variando em (1,5), (2,5) e (3,5) nm respectivamente. Desse modo foi observado que nas nanoestruturas de Fe@NdFeB e Fe@SmCo₅ apresentaram um padrão, onde que a medida em que a dimensão no núcleo cresce o produto energético máximo também cresce. Com base nesse padrão é possível melhorias no produto energético máximo em nanoestruturas onde o percentual volumétrico do ferro seja maior, e sua casca tenha espessura mais fina. Levando isso em consideração, compreender o comportamento magnético dessas nanoestruturas se torna de relevância tanto no meio científico como na indústria.

Palavras-chave: Ímãs permanentes; Nanopartículas bi-magnéticas; Produto energético máximo.

ABSTRACT

In terms of permanent magnets, the bi-magnetic nanoparticles of the core-shell type with spherical geometry, allows us to improve the maximum energy product, which is an impacting factor on the quality of a permanent magnet, these nanoparticles start from the combination of properties of hard and soft ferromagnetic materials. This research seeks to analyze this type of structure with spherical geometry by means of tricks of the micromagnetic theory, understanding the magnetic energies in terms of simulation cell, and then going on to computational numerical calculation, where a theoretical study of the maximum energy product of two nanostructured systems was performed, one consisting of Fe@NdFeB and the other Fe@SmCo₅, where in both, the core dimensions vary in 3, 5, 12 and 21 nanometers respectively and shell varying in (1.5), (2.5) and (3.5) nm respectively. Thus it was observed that in the Fe@NdFeB and Fe@SmCo₅ nanostructures presented a pattern, where as the dimension in the core grows the maximum energy product also grows. Based on this pattern it is possible to improve the maximum energy product in nanostructures where the volumetric percentage of iron is larger, and its shell has thinner thickness. Taking this into consideration, understanding the magnetic behavior of these nanostructures becomes of relevance in both scientific and industrial environments.

Keywords: Permanent magnets; Bi-magnetics Nanoparticles; Maximum energy product.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1- Representação dos domínios em um material ferromagnético	18
Figura 2- Curva de histerese magnética de um material ferromagnético	19
Figura 3- Representação esquemática da célula de simulação	21
Figura 4- Representação esquemática de estruturas do tipo núcleo casca	25
Figura 5- Representação do algoritmo do cálculo da configuração de equilíbrio	27
Figura 6- Representação do ambiente de desenvolvimento	28
Figura 7- Representação esquemática da estrutura do Nd ₂ Fe ₁₄ B	30
Figura 8- Estrutura cristalina do SmCo ₅	32
Figura 9- Estrutura cristalina do Ferro (CCC)	32
Figura 10- Evolução do Produto energético máximo em ímãs permanentes no século XX	33
Figura 11- Curva de desmagnetização da histerese B-H	34
Figura 12- Representação esquemática de circuito magnético aberto	35
Figura 13- Representação de estruturas bi-magnéticas do tipo núcleo-casca	38
Figura 14- Representação de uma nanopartícula do tipo núcleo-casca	40
Figura 15- Representação da magnetização média	41
Figura 16- Representação da anisotropia média	42
Figura 17- Produto energético máximo em nanopartícula de Fe@NdFeB	49
Figura 18- Produto energético máximo em nanopartícula de Fe@NdFeB	51
Figura 19- Produto energético máximo em nanopartícula de Fe@SmCo ₅	53
Figura 20- Produto energético máximo em nanopartícula de Fe@SmCo ₅	55

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

T_c	Temperatura de Curie
H_c	Campo coercivo
K	Constante de anisotropia
A	Constante de troca
M_s	Magnetização de saturação
$(BH)_{max}$	Produto energético máximo
MGOe	Megagauss-oersted
NdFeB	Neodímio Ferro Boro
SmCo	Samário Cobalto
Fe	Ferro
gap	Região de espaço vazio
FM	Ferromagnéticas
FiM	Ferrimagnéticas
AFM	Antiferromagnética

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	11
2 OBJETIVO GERAL	15
2.1 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	15
3 METODOLOGIA	16
4 REFERENCIAL TEÓRICO	17
4.1 CURVA DE MAGNETIZAÇÃO.....	18
4.2 COMPRIMENTOS CARACTERÍSTICOS	20
4.3 A CÉLULA DE SIMULAÇÃO	21
4.4 ENERGIAS MAGNÉTICAS E CAMPOS LOCAIS.....	22
4.5 CÁLCULO NUMÉRICO DA CONFIGURAÇÃO DE EQUILÍBRIO	26
4.6 MATERIAIS UTILIZADOS	29
4.6.1 NEODÍMIO FERRO BORO	30
4.6.2 SAMÁRIO COBALTO.....	32
4.6.3 FERRO.....	33
4.7 PRODUTO ENERGÉTICO MÁXIMO.....	34
4.8 COMPORTAMENTO MAGNÉTICO EM SISTEMAS NÚCLEO-CASCA.....	39
5 BH_{max} EM SISTEMAS NÚCLEO@CASCA ESFÉRICOS	44
5.1 BH_{max} EM SISTEMAS NÚCLEO@CASCA ESFÉRICOS Fe@NdFeB	45
5.2 BH_{max} EM SISTEMAS NÚCLEO@CASCA ESFÉRICOS DE Fe@SmCo ₅	47
5.3 MODELO NUMÉRICO EM SISTEMAS NÚCLEO-CASCA.....	48
6 RESULTADOS E DISCUSSÃO	49
7 CONSIDERAÇÕES FINAIS	57
REFERÊNCIAS	59

1 INTRODUÇÃO

Devido aos avanços tecnológicos, o estudo de nanopartículas magnéticas progrediu consideravelmente, possibilitando construir nanopartículas com mais controle em suas propriedades magnéticas, se tornando um campo bem compreendido e difundido. Desse modo as nanopartículas magnéticas possuem grande potencial tecnológico, que podem ser aplicados em diversas áreas como por exemplo, biomedicina (ULBRICH, K. *et al*, 2016), ímãs permanentes (LIU, 2009), armazenamento de dados (ZHA; DUMAS; FANG; BONANNI; NOGUÉS; ÅKERMAN, 2010), nanocompósitos e catálise (WU, L. *et al*, 2016).

Dentre os diversos tipos de nanopartículas magnéticas sintetizadas, um tipo chama a atenção da comunidade científica, que são as nanopartículas bi-magnéticas do tipo núcleo-casca. Com o avanço tecnológico nessa área, é possível desenvolver essas partículas núcleo-casca, com maior controle (OLIVEIRA, 2016). Nesse tipo de estrutura, tanto o núcleo como a casca apresentam propriedades magnéticas distintas, fazendo com que as interações magnéticas entre os dois constituintes gerem um grau extra de liberdade para ajustar suas propriedades magnéticas (LÓPEZ-ORTEGA; ESTRADER; SALAZAR-ALVAREZ; ROCA; NOGUÉS, 2015).

Quanto à aplicação das nanopartículas magnéticas, elas são utilizadas para a construção de ímãs permanentes, que são produzidos em grande escala, e seu desenvolvimento ao longo da história é influenciado fortemente pelo custo de suas matérias-primas (COEY; J. M. D. 2020). A crescente demanda por ímãs permanentes desencadeou uma escassez de matérias primas que são elementos químicos denominados terras raras, resultando em um aumento significativo do seu preço (LÓPEZ-ORTEGA; ESTRADER; SALAZAR-ALVAREZ; ROCA; NOGUÉS, 2015).

Materiais terras raras são um conjunto de 17 elementos químicos, que apresentam abundância moderada na crosta terrestre, os materiais terras raras possuem aplicações em várias áreas da tecnologia devido às suas propriedades químicas, espectroscópicas e magnéticas. O alto valor de mercado das terras-raras é

decorrente do alto custo dos processos de separação e purificação, como também de obtenção na natureza (FERREIRA, 2013).

Em relação a geometria das nanopartículas bi-magnéticas, elas podem ser representadas como por exemplo nas formas esféricas e elipsoidais, onde a forma geométrica dessas nanopartículas influencia diretamente na magnetização, sendo essa influência denominada de “anisotropia de forma”. Com base na geometria da nanoestrutura, a magnetização pode ser modelada por meio de cálculos numéricos, que podem ser geralmente simplificados e mantendo uma precisão considerável, onde esses modelos são beneficiados para a descrição de nanopartículas de formato esférico (J. PING LIU et al., 2010).

Na construção de ímãs permanentes é de interesse a busca por materiais com alta anisotropia e livre de terras-raras, e as estruturas bi-magnéticas do tipo núcleo casca surgem como uma alternativa de viabilizar esses quesitos. Esse tipo de estrutura parte da combinação de propriedades magnéticas de materiais duros e macios. O fator que define a dureza de um material magnético é a anisotropia, onde um material considerado macio possui baixa anisotropia, já um material considerado duro possui alta anisotropia. Para ímãs permanentes é idealmente desejado que a parte dura tenha alta coercividade (H_c), e a parte macia alta magnetização de saturação (M_s), onde essa a combinação resultante se torna de interesse de estudo (LÓPEZ-ORTEGA; ESTRADER; SALAZAR-ALVAREZ; ROCA; NOGUÉS, 2015).

A descrição de sistemas magnéticos nanoestruturados se dá por meio da utilização das propriedades intrínsecas dos materiais. No contexto de ímãs permanentes os elementos chaves são a polarização magnética de saturação (M_s), a temperatura de transição ferromagnética (T_c) e a densidade de energia de anisotropia magnetocristalina (K_{Ani}). A importância da energia de anisotropia em ímãs permanentes se dá devido à relação que ela possui com a campo coercivo (H_c). Uma das formas de medir o desempenho de um ímã permanente é através do produto energético máximo $(BH)_{max}$ (LI; LI; PAN; ZHANG; CHOI, 2019).

No estudo de ímãs permanentes, o $(BH)_{max}$ é caracterizado pelo segundo quadrante da curva de histerese magnética, sendo ele um parâmetro chave, pois suas características determinam se um material é adequado para aplicação em ímãs permanentes de alto desempenho. O $(BH)_{max}$ que define a qualidade energética de um ímã, sendo ele mensurado em kJ/m^3 (quilojoule por metro cúbico). Em materiais ferromagnéticos o $(BH)_{max}$ possui um limite teórico em torno de $\mu_0 M_r^2/4$. Compreender o $(BH)_{max}$ tem sido fundamental para desenvolver ímãs permanentes com alta energia de magnetização e alta estabilidade (PAPAEFTHYMIU, 2022).

No mercado atual, os ímãs permanentes de terras raras são produzidos em quantidade de cerca de $1,4 \times 10^5$ toneladas por ano, sendo o ímã de $Nd_2Fe_{14}B$ o melhor do mercado atualmente possuindo $(BH)_{max}$ em torno de $515 \text{ kJ} \cdot \text{m}^{-3}$, e possuindo alta coercividade. Existe uma lacuna entre o $(BH)_{max}$ do $Nd_2Fe_{14}B$ e de outros materiais como o $BaFe_{12}O_{19}$ que possui um $(BH)_{max}$ em torno e de $45 \text{ kJ} \cdot \text{m}^{-3}$, onde a busca por um novo ímã livre de terras raras e de alto desempenho para preencher essa lacuna, não sem tem encontrado muito sucesso (COEY; J. M. D. 2020).

Atualmente o desenvolvimento de ímãs permanentes de terras raras se encontra em um estágio relativamente avançado, no entanto, com o advento da nanotecnologia, novos desafios podem surgir, o que significa que ainda há muito a ser feito. Os ímãs de Nd-Fe-B e Sm-Co possuem vantagem dentre outros materiais, já que são amplamente estudados e tem suas propriedades magnéticas bem compreendidas, desse modo os estudos desses materiais possibilitam melhorias em uma tecnologia bem compreendida e bem estabelecida, ao invés de começar algo totalmente novo. Como exemplo disso podem ser citados os semicondutores metal-óxido e os discos rígidos de gravação (COEY; J.M.D, 2020).

A presente pesquisa busca alternativas para resolução dos seguintes problemas, como superar a qualidade dos ímãs permanentes atuais, reduzindo suas dimensões e melhorando consideravelmente seu produto energético máximo. Como também viabilizar a utilização de pouco ou nenhum material terra-rara ou metais preciosos, que viabilizam diminuir os custos de produção. Face a esses problemas

uma alternativa encontrada são as nanopartículas bi-magnéticas, que surgem como possível mediador desses problemas.

O estudo de nanopartículas bi-magnéticas do tipo núcleo-casca, se torna promissor em um quesito importante atualmente, superar o limite de $(BH)_{max}$ dos ímãs permanentes de alta performance, onde o ímã de $NdFeB$ que é o melhor do mercado atualmente, possui $(BH)_{max}$ em torno 515 kJ.m^{-3} (COEY; J. M. D. 2020). Onde os ímãs livres de terras-raras existentes não têm capacidade de competir com esse produto energético elevado, porém cálculos teóricos propõem que um $(BH)_{max}$ acima de 400 kJ.m^{-3} pode tornar um material competitivo, onde é proposto que estruturas bi-magnéticas do tipo núcleo casca tem o potencial de atingir esse objetivo (LÓPEZ-ORTEGA; ESTRADER; SALAZAR-ALVAREZ; ROCA; NOGUÉS, 2015).

Na busca por nanoestruturas magnéticas livre de terras-raras o $L1_0\text{-FeNi}$ surge como uma opção promissora, sendo uma estrutura com uma larga saturação de magnetização de $M_s = 1.5T$, e possuindo um produto energético máximo teórico, em torno de $(BH)_{max} = 448 \text{ kJ.m}^{-3}$. Devido ao $L1_0\text{-FeNi}$ possuir fases altamente ordenadas, se torna um possível candidato a ser utilizado para construção de ímãs permanentes (FISCHBACHER *et al.*, 2018).

No contexto atual, as estruturas bi-magnéticas do tipo núcleo-casca, se mostram com potencial de possibilitar que ímãs permanentes nanoestruturados aumentem seu $(BH)_{max}$, como também utilizar pouca ou nenhuma terras-raras, através da combinação das vantagens das características magnéticas de seus constituintes. Como por exemplo nanopartículas FePt/Co , onde essa estrutura em comparação com uma estrutura pura de FePt , teve uma melhoria de 60% no seu $(BH)_{max}$. Com base nesse desempenho estruturas do tipo núcleo-casca, abrem um caminho para construção de ímãs permanentes de alta performance cada vez melhores (LIU *et al.*, 2022).

A geometria das estruturas bi-magnéticas do tipo núcleo-casca, impacta diretamente nas das propriedades magnéticas das nanoestruturas, sendo que estudos

determinaram que nanoestruturas esféricas são mais eficazes em melhorar as propriedades dessas estruturas. As nanoestruturas do tipo esféricas podem ser diferenciadas em dois tipos: uma com o núcleo com material magnético duro e casca com material magnético macio, e a outra com o núcleo com material magnético macio e casca com material magnético duro (LÓPEZ-ORTEGA; ESTRADER; SALAZAR-ALVAREZ; ROCA; NOGUÉS, 2015).

A presente pesquisa se justifica no crescente potencial tecnológico das estruturas bi-magnéticas do tipo núcleo-casca, que nos possibilita compreender o comportamento magnético dessas estruturas, visando melhorias em um fator que é impactante na aplicabilidade de certos materiais ferromagnéticos para construção de ímãs permanentes, que é o produto energético máximo $(BH)_{max}$, como também diminuir ou utilizar nenhum material terra-raras, o que impacta diretamente o custo elevado dos ímãs permanentes de alta performance.

2 OBJETIVO GERAL

Analisar o comportamento do produto energético máximo em estruturas bi-magnéticas do tipo núcleo casca com geometria esférica, por meio de simulações computacionais.

2.1 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Estudar o comportamento magnéticos dos materiais utilizados;
- Compreender as fases magnéticas nessas nanoestruturas;
- Contrastar o comportamento do $(BH)_{max}$ como função dos parâmetros geométricos e de parâmetros intrínsecos dos materiais;
- Comparar a dependência do $(BH)_{max}$ como o tipo de composição da nanoestrutura, duro/macio e macio/duro.

3 METODOLOGIA

Neste trabalho será realizado um estudo teórico e experimental, do campo dipolar de estruturas magnéticas. A pesquisa experimental pode ser definida como, firmar um objeto de estudo, selecionar as variáveis que podem acarretar mudanças nesse objeto, definir como as variáveis influenciam, e quais seus efeitos no objeto de estudo (GIL,2002, p. 47).

No meio científico a pesquisa experimental propicia o mais valioso procedimento aos cientistas, que é poder testar e comparar suas hipóteses que relacionam a causa e o efeito, possuindo total controle das variáveis utilizadas. Desta forma, com a possibilidade maior de controle, a pesquisa experimental oferece maior garantia analítica do objeto de estudo (GIL,2002, p. 47).

Ao adentrar no estudo de sistemas magnéticos em escala nanométrica, a grande quantidade de variáveis a serem levadas em consideração para descrever um sistema magnético torna inviável o cálculo computacional, sendo assim ao utilizar a teoria micromagnética, é possível definir uma pequena parte do material com dimensões menores que o comprimento de troca l_{troca} , onde esse comprimento de troca é definido como o tamanho máximo de uma região, de uma material ferromagnético, onde é propiciado pouca variação nos entre os momentos magnéticos, e o comprimento de troca é definido pela célula de simulação para representar um único momento dipolar. Desse modo possibilitando o cálculo computacional, devido à redução de variáveis utilizadas (OLIVEIRA,2016).

Ao definir o comprimento característico da célula de simulação, será simulado por meio de cálculos computacionais a energia magnética total do sistema, que é a combinação das energias: de troca, zeeman, anisotropia e magnetostática. Visando buscar a configuração de equilíbrio, onde cada momento magnético da célula está paralelo ao campo efetivo, resultando em um torque nulo.

O algoritmo utilizado para simulação é escrito na linguagem Fortran, fazendo uso do cálculo do campo efetivo local auto consistente. Essa simulação será feita em

um computador dedicado denominado de cluster, da Universidade Estadual do Rio Grande do Norte. Devido a questões operacionais o cluster utilizado está localizado na Universidade do Estado do Rio Grande do Norte.

Neste trabalho para descrever um sistema bi-magnético do tipo núcleo casca será usado a abreviação núcleo@casca, onde o primeiro termo representa o material magnético do núcleo e o segundo termo representa o material magnético presente na casca.

Posteriormente ao obter os dados da simulação será feito um comparativo para analisar o impacto dos materiais magnéticos e dimensões, no comportamento das nanoestruturas bi-magnéticas do tipo núcleo@casca.

4 REFERENCIAL TEÓRICO

Atualmente, as nanopartículas são utilizadas em vários ramos da alta tecnologia como por exemplo gravação magnética, ímãs permanentes de alta performance e na área biomédica. Com base nesse potencial tecnológico, busca-se, tanto pelo meio científico quanto pela indústria, cada vez mais compreender o comportamento magnético dessas estruturas em escala nanométrica compreendida no tamanho de (10^{-9}), com base em sua capacidade de prover avanços significativos em suas áreas de atuação (PAPAEFTHYMIU, 2022).

O nanomagnetismo é um ramo da física que se dedica ao estudo de propriedades magnéticas em escala nanométrica. Nessa escala, dois fatores são de importâncias nos materiais, uma é por que nessa escala suas propriedades fundamentais se alteram, o outro é que essas propriedades se tornam dependente do tamanho (BINNS, 2014). A teoria do nanomagnetismo desenvolvida entre as décadas de 1930 e 1940 pretendia preencher a lacuna entre a teoria eletromagnética de Maxwell e a teoria quântica baseada em níveis atômicos (KRONMÜLLER, 2019).

Neste tópico será abordado, de forma breve, a teoria micromagnética que caracteriza as propriedades magnéticas de materiais ferromagnéticos em escala

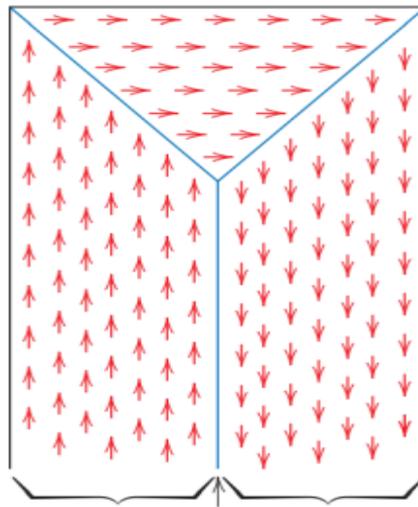
nanométrica, como curva de magnetização, comprimentos característicos, as energias magnéticas presentes nos sistemas magnéticos, campos locais. Além disso, será abordada a configuração das células de simulação, e o algoritmo que será utilizado nas simulações. Como também será descrito os materiais magnéticos a serem utilizados, e o comportamento magnético das estruturas do tipo núcleo@casca.

4.1 CURVA DE MAGNETIZAÇÃO

A curva de magnetização em relação com a intensidade do campo magnético externo $M(H)$ possui a função principal de definir propriedades de sistemas magnéticos, onde pode ser observado comportamentos diferentes com base no material, como por exemplo diamagnéticos, paramagnéticos, ferromagnéticos e antiferromagnéticos. Esses comportamentos possuem diferenças qualitativas e quantitativas de interesse, já que definem as propriedades tecnológicas dos materiais magnéticos (PAPAEFTHYMIU, 2022).

Ao adentrar no estudo do nanomagnetismo, um dos fatores a ser levado em consideração é o domínio magnético, onde em materiais ferromagnéticos, que são compostos por pequenas regiões, ocorre o alinhamento de todos os dipolos magnéticos. Essa pequena região é denominada de domínio, e cada um está magnetizado até sua magnetização de saturação. Outro fator importante são as paredes de domínios, que delimitam os domínios, e permitem que a orientação da magnetização varie, como mostrado na Figura 1 (CALLISTER; RETHWISCH, 2019).

Figura 1- Representação dos domínios em um material ferromagnético

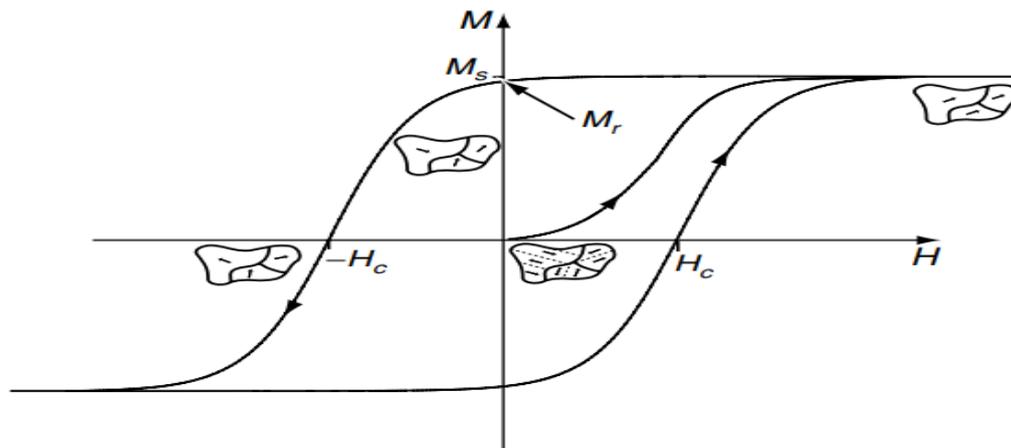


Fonte: CALLISTER; RETHWISCH (2019).

Em sistemas magnéticos, como por exemplo ferromagnéticos, ao ser aplicado um campo magnético as paredes de domínio tendem a se movimentarem, desse modo ocorre um aumento nos domínios magnéticos que estão paralelos ao campo magnético externo, assim diminuindo sua energia interna. Contudo, quando o campo externo é aumentando e diminuindo gradualmente a curva de magnetização em materiais ferromagnéticos, se torna um processo irreversível (LEITE; FIGUEIREDO, 2007).

Na Figura 2, onde mostra a curva de magnetização de um material ferromagnético. Partindo de um estado inicial não magnetizado, onde o campo magnético tende a saturar o estado magnetizado (M_s), os domínios magnéticos se orientam em direção do campo magnético. Posteriormente ao saturar, o campo magnético é diminuído gradativamente até atingir o valor nulo, onde é observado que a magnetização líquida (M_r) é diferente de zero, definida como magnetização remanente. Esse estado de magnetização líquida se mantém oposta ao campo $-H$, até alcançar a intensidade $-H = -H_c$, onde a magnetização líquida é invertida e orientada ao sentido do campo. A intensidade $-H_c$ é denominada campo coercivo. O campo irá aumentar até a magnetização atingir a saturação, repetindo o ciclo como mostra na Figura 2, onde esse comportamento é denominado curva de histerese (OLIVEIRA, 2016).

Figura 2- Curva de histerese magnética de um material ferromagnético



Fonte: (COEY; J. M. D. 2010).

O comportamento apresentado pela curva de histerese, é um fator impactante para definir se os materiais ferromagnéticos podem ser utilizados em ímãs permanentes. Materiais magnéticos duros possuem altos valores de coercividade, que indica uma curva de magnetização larga, onde esse tipo de material duro é amplamente utilizado na construção de ímãs permanentes. Já os materiais magnéticos macios, possuem curva de magnetização estreita, remetendo a um baixo campo coercivo (PAPAEFTHYMIU, 2022).

4.2 COMPRIMENTOS CARACTERÍSTICOS

Os efeitos dos comprimentos característicos podem ser observados em partículas magnéticas que possuem dimensões menores que as partículas magnéticas com domínio único crítico. Alguns comprimentos característicos são de interesse, como por exemplo comprimento de troca e a largura de parede do domínio (GUIMARÃES, 2017).

Em nanopartículas, o comportamento magnético é determinado pela interação da energia de troca, energia magnetostática e a anisotropia do material, onde a combinação dessas interações provém um comprimento de troca definido por (PAPAEFTHYMIU, 2022).

$$l_{ex} = \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}} \quad (4.1)$$

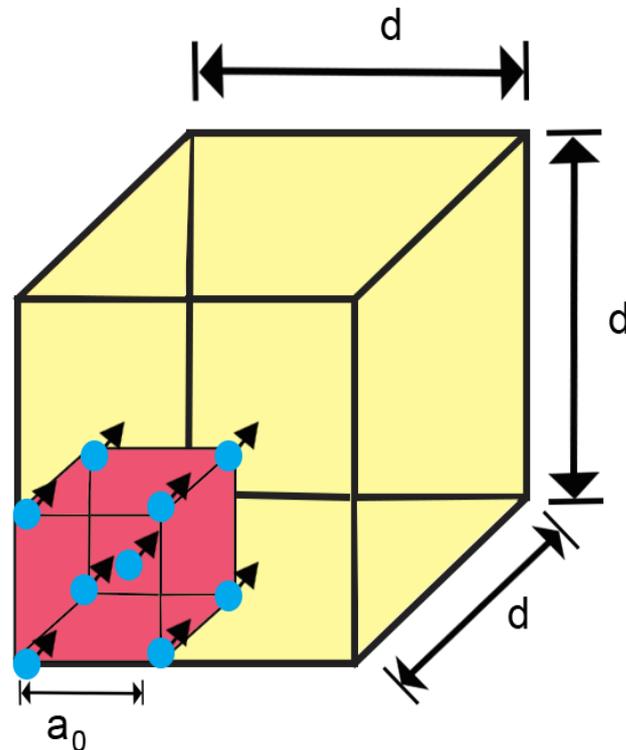
Onde A representa a densidade de energia de troca, μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo M_s é a magnetização de saturação em materiais ferromagnéticos onde a temperatura esteja abaixo da temperatura crítica (T_c). Esses materiais são compostos por pequenas regiões onde os momentos magnéticos estão alinhados paralelamente (CALLISTER; RETHWISCH, 2019).

Em um material ferromagnético, o domínio magnético apresenta alinhamento dos dipolos magnéticos, onde esse domínio atinge sua magnetização de saturação. O componente que delimita cada domínio é denominado parede de domínio. A representação esquemática dos domínios magnéticos é representada na Figura 1, onde cada domínio está alinhado, mas a direção dos domínios adjacentes difere (CALLISTER; RETHWISCH, 2019).

4.3 A CÉLULA DE SIMULAÇÃO

Devido ao fato da grande quantidade de variáveis a serem utilizadas para descrever sistemas nanoestruturados, foi utilizado a célula de simulação, onde ela representa uma pequena porção do material. A célula de simulação que é representada na Figura 3, é composta por inúmeras células cristalinas unitárias, onde são norteadas pelo comprimento de troca l_{troca} , onde a célula de simulação representa uma estrutura do tipo cristalina denominada, cúbica de corpo centrado (*bcc*).

Figura 3- Representação esquemática da célula de simulação



Fonte: adaptado de Oliveira (2016).

4.4 ENERGIAS MAGNÉTICAS E CAMPOS LOCAIS

Ao adentrar no estudo de estruturas magnéticas é de interesse encontrar o estado de mais baixa energia desse sistema, onde as energias magnéticas impactam na configuração de equilíbrio da estrutura. As energias magnéticas envolvidas são: energia de troca, energia zeeman, energia de anisotropia e energia magnetostática. Na descrição de nosso sistema as energias magnéticas serão descritas com base na célula de simulação (OLIVEIRA, 2016).

A energia de troca parte da relação entre a orientação dos momentos magnéticos de átomos vizinhos (PAPAEFTHYMIU, 2022). A energia de troca é descrita como:

$$\frac{E_{troca}}{\delta} = \frac{A}{\delta^2} \sum_{i,j} [1 - \hat{u}_i \cdot \hat{u}_j] \quad (4.2)$$

Onde a soma entre os índices i e j representam a interação entre a energia de troca entre os vizinhos, na célula de simulação. Os versores u definem a orientação dos spins, que estão alinhados paralelamente. A energia de troca é considerada mínima quando $\cos \theta = 1$. A define a constante de troca, δ é o tamanho da aresta da célula de simulação.

A energia zeeman parte da interação do momento magnético (m) como o campo magnético externo (H) (GUIMARÃES, 2017). Sendo descrita em termo do volume da célula de simulação e independe da sua dimensão lateral δ , como:

$$\frac{E_{zeeman}}{\delta^3} = \vec{H} \cdot M_s \sum_i \hat{m}_i \quad (4.3)$$

Onde o somatório leva em consideração a contribuição da energia de cada célula o momento magnético da célula de simulação e M_s representa a magnetização de saturação do material ferromagnético.

A energia de anisotropia parte da orientação relativa dos momentos magnéticos na direção dos eixos cristalográficos. Essa dependência do momento magnético correlacionado com direção cristalográfica, é denominada anisotropia magnética (CALLISTER; RETHWISCH, 2019). Em nosso sistema será considerada a energia de anisotropia uniaxial, que indica a existência de apenas uma direção de fácil magnetização. A densidade de energia de anisotropia uniaxial poder descrita como:

$$\frac{E_a}{\delta^3} = K \sum_i (m_i^x)^2 \quad (4.4)$$

Onde δ^3 , representa o volume da célula de simulação, K é constante de anisotropia cristalina, o somatório representa a soma da energia de todas a células na direção do eixo \vec{x} .

Em materiais ferromagnéticos, a energia magnetostática é um fator considerado importante, já que contribui diretamente para energia do material. A energia magnetostática parte da interação da própria energia gerada com o campo gerado por ela, essa interação magnetostática em comparação com a energia de troca, são relativamente fracas, mas são de importância em materiais ferromagnéticos, devido que os processos de magnetização e as estruturas de domínios dependem dessa energia (COEY; J. M. D. 2020). A energia magnetostática é descrita como:

$$\frac{E_{Dip}}{\delta^3} = \frac{M_S^2}{2} \sum_i \sum_k \left(\frac{\widehat{m}_i \cdot \widehat{m}_k}{n_{i,k}^3} - \frac{3(\widehat{m}_i \cdot \widehat{m}_k)(\widehat{m}_k \cdot \widehat{n}_{i,k})}{n_{i,k}^5} \right) \quad (4.5)$$

Onde \widehat{n}_{ik} e representa a distância entre os momentos magnéticos, \widehat{n} é um vetor que define a distância relacionada com a aresta da célula de simulação.

Ao definir as energias magnéticas, que são as, de troca, zeeman, anisotropia uniaxial e magnetostática, representadas pelas Equações (4.2), (4.3), (4.4) e (4.5) respectivamente, em termo da célula de simulação, é possível descrever a energia magnética total do sistema:

$$E_T^V = \frac{A}{\delta^2} \sum_i \sum_k [1 - \widehat{m}_i \cdot \widehat{m}_k] - \vec{H} \cdot M_S \sum_i \widehat{m}_i - K \sum_i (m_i^x)^2 + \frac{M_S^2}{2} \sum_i \sum_k \left(\frac{\widehat{m}_i \cdot \widehat{m}_k}{n_{i,k}^3} - \frac{3(\widehat{m}_i \cdot \widehat{m}_k)(\widehat{m}_k \cdot \widehat{n}_{i,k})}{n_{i,k}^5} \right) \quad (4.6)$$

Com base na energia magnética total do sistema, o campo médio efetivo em cada célula de simulação parte da derivação da densidade de energia magnética total, sendo descrita como:

$$\vec{H}_i^{eff} = -\frac{1}{M_s} \frac{\partial E_i}{\partial \widehat{m}_i} \quad (4.7)$$

Com base na Equação (4.2) podemos descrever o campo de troca, que parte da interação de troca dos momentos magnéticos de células vizinhas como:

$$\vec{H}_i^{troca} = \frac{A}{M_s \delta^2} \sum_j \widehat{m}_j \quad (4.8)$$

Onde j define as células vizinhas de i .

Campo de anisotropia uniaxial que é derivado do campo efetivo médio, pode ser calculado a partir da Equação (4.4) descrita como:

$$\vec{H}_i^{anis} = \frac{2K}{M_s} m_j^x \quad (4.9)$$

Com base na Equação (2.5) da energia magnetostática, podemos calcular o campo dipolar da célula de simulação, em cada eixo separadamente:

$$H_{i \ dip}^x = \frac{M_s}{2} \sum_k \frac{3n_{ik}^x (m_k^x n_{ik}^x + m_k^y n_{ik}^y + m_k^z n_{ik}^z)}{n_{ik}^5} - \frac{m_k^x}{n_{ik}^3} \quad (4.10)$$

$$H_{i \ dip}^y = \frac{M_s}{2} \sum_k \frac{3n_{ik}^y (m_k^x n_{ik}^x + m_k^y n_{ik}^y + m_k^z n_{ik}^z)}{n_{ik}^5} - \frac{m_k^y}{n_{ik}^3} \quad (4.11)$$

$$H_i^z \text{ dip} = \frac{M_s}{2} \sum_k \frac{3n_{ik}^z (m_k^x n_{ik}^x + m_k^y n_{ik}^y + m_k^z n_{ik}^z)}{n_{ik}^5} - \frac{m_k^z}{n_{ik}^3} \quad (4.12)$$

Com base na derivação das energias magnéticas a partir no campo efetivo, a interação dipolar que ocorre em todas as células de simulação, tendem a um estado de mínima energia, ou seja, quando todo os momentos magnéticos estão alinhados paralelamente ao campo efetivo (OLIVEIRA, 2016). O campo efetivo total por célula de simulação é dado por:

$$\vec{H}_i^{eff} = \vec{H} + \frac{A}{M_s \delta^2} \sum_j \hat{m}_j + \frac{2K}{M_s} \hat{m}_i^x + \frac{M_s}{2} \sum_k \left(\frac{3(\hat{m}_k \cdot \hat{r}_{ik}) \hat{r}_{ik}}{r_{ik}^5} - \frac{\hat{m}_k}{r_{ik}^3} \right) \quad (4.13)$$

4.5 CÁLCULO NUMÉRICO DA CONFIGURAÇÃO DE EQUILÍBRIO

O sistema de estudo parte da combinação de materiais ferromagnéticos duro e macio como mostrado na Figura 4, que representa um sistema nanoestruturado do tipo núcleo-casca com geometria esférica, constituído de um núcleo ferromagnético macio, envolto de uma casca ferromagnética dura. A célula de simulação parte da descrição das energias magnéticas, antes de átomos agora para célula, sendo o tamanho aresta da célula de simulação delimitada pelo l_{troca} (OLIVEIRA, 2016).

Figura 4- Representação esquemática de estruturas do tipo núcleo casca



Fonte: adaptado de LÓPEZ-ORTEGA; ESTRADER; SALAZAR-ALVAREZ; ROCA; NOGUÉS (2015).

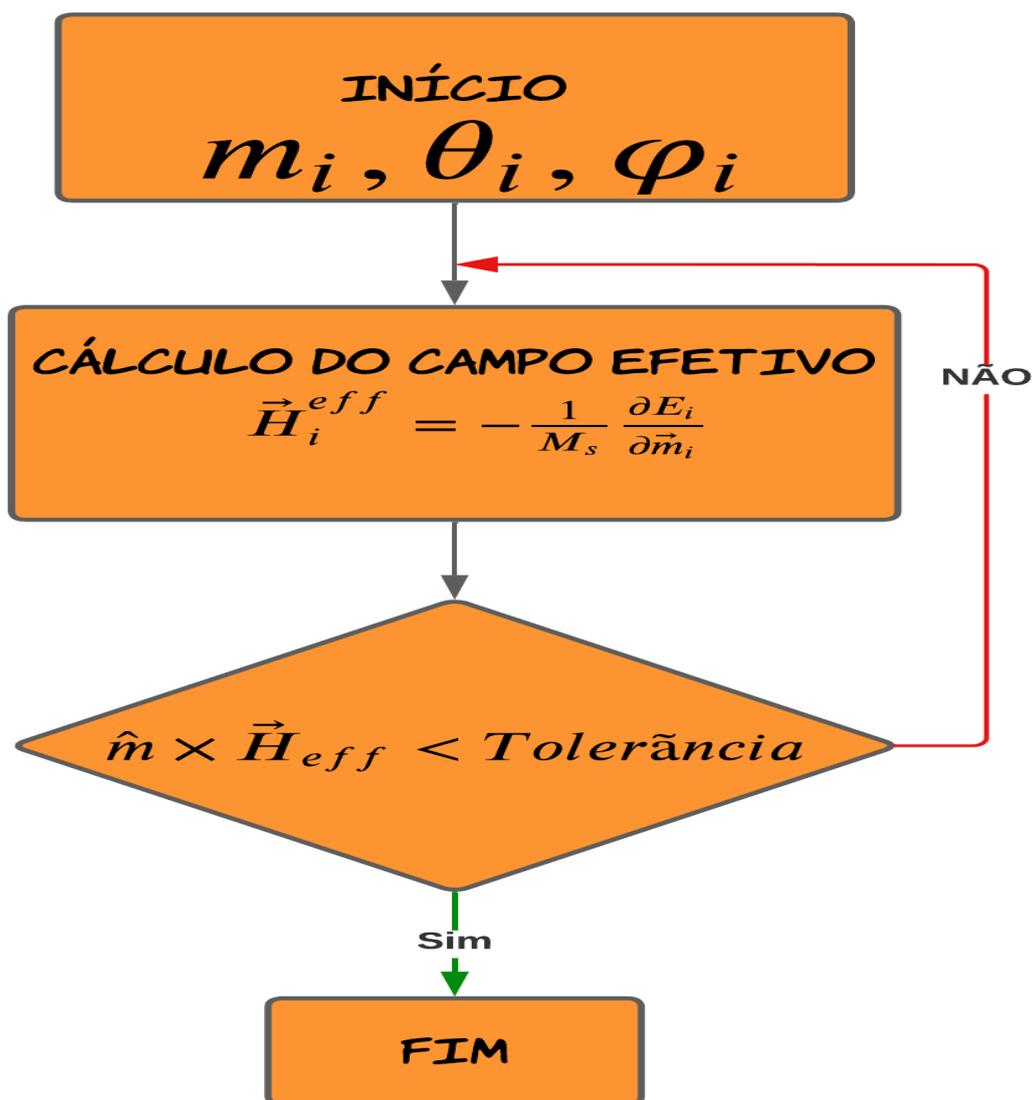
A partir da Equação (4.7) que descreve o campo efetivo médio local que atua sobre cada célula de simulação, será calculado a configuração de equilíbrio do momento magnético local. A configuração de equilíbrio magnético é caracterizada pela situação de torque nulo, desse modo será encontrado um estado de mínima energia, ou seja, o sistema estará em equilíbrio. O algoritmo que remete a configuração de equilíbrio baseia-se no cálculo autoconsistente, que é descrito pela seguinte sequência (OLIVEIRA, 2016):

1. O sistema é iniciado com uma configuração magnética, que é definida pelo vetor posição e pelos componentes x, y, z do momento magnético de cada célula de simulação.
2. O campo médio por célula de simulação, que é representado pela Equação (4.13), é calculado.
3. É obtida a orientação do campo efetivo local em cada célula de simulação.
4. É verificado se o momento magnético está paralelamente alinhado na direção do campo efetivo, por evolver cálculo numérico é necessário envolver uma margem de tolerância, que é caracterizada por uma situação onde $\vec{m}_i \chi \vec{H} \approx 10^{-10} j$.
5. Caso o passo 4 seja cumprido, foi encontrado a configuração de equilíbrio, onde o cálculo é encerrado partindo para o penúltimo passo.
6. Caso o passo 4 não seja cumprido, o programa retorna para o passo 2 com uma nova configuração.
7. O programa é repetido até que o passo 5 tenha resposta positiva para todas as células de simulação.
8. É escrito a configuração de equilíbrio do sistema nanoestruturado.
9. Fim.

O fluxograma da Figura 5 representa de forma sequencial os passos anteriores, onde todos esses passos são calculados com uma configuração diferente, de forma a representar com clareza o impacto das dimensões dos materiais na curva de magnetização. Na Figura 5, no início temos a configuração magnética da célula de simulação onde o termo m_i representa o momento magnético local e os termos θ_i, φ_i

remetem aos ângulos polar e azimutal. Posteriormente o campo efetivo é calculado a partir da Equação (4.7), a tolerância é calculada a partir do ângulo entre o campo efetivo e direção da magnetização da célula de simulação, buscando com que os dois estejam paralelos para obter o torque nulo, caso seja obtido o torque nulo o programa é encerrado.

Figura 5- Representação do algoritmo do cálculo da configuração de equilíbrio



Fonte: adaptado de Oliveira (2016).

O algoritmo é construído na linguagem de programação Fortran, utilizando o ambiente de desenvolvimento visual estudo que é representado na Figura 6, onde

temos uma parte do algoritmo utilizado no lado esquerdo, e no lado direito temos o arquivo de dados de entrada que contém a configuração magnética do sistema nanoestruturado analisado. Devido a grande quantidade de cálculos, as simulações computacionais serão realizadas no cluster da Universidade do Estado do Rio Grande do Norte que possuem poder de processamento maior.

Figura 6- Representação do ambiente de desenvolvimento

The screenshot shows the Microsoft Visual Studio environment. On the left, the source code for a Fortran program named 'coreshell' is visible. The code includes declarations for integer, character, and real variables, and a list of subroutines. On the right, the input data file 'ainputcs1.dat' is open, showing a list of numerical parameters and their values.

```

program coreshell
integer ncell1,ncell11,cubo,core,shell
character *2 fm1,fm2 !fm1 = inner fm2 = outer
character *3 anisp1,anisp2
character *7 coremat,shellmat
parameter (ncell=21,ncell11=21,nha=51)
real *8 tetah(-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11,-nce:
phi1(-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11,-ncell11:ncel:
tetahd(-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11,-nce:
phihd(-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11,-ncell11:nce:
delteta,tolteta,toll,ca,cb,da,db,ea,eb,spin,hef:
hj,sx1,sy1,sz1,hi,hf,temp,alfa,anis,
exch(-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11,-ncell11:ncel:
ai,aj,ak,delh,hp,ai1,aj1,ak1,ai2,aj2,ak2,
alfad(-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11,-ncell11:nce:
somax,somay,somaz,ar,hex,tetah,
anisx(-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11,-ncell11:nce:
anisz(-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11,-ncell11:nce:
sx(-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11:
sy(-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11:
sz(-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11:
sx0(-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11,-ncell11:ncell11:

```

```

hi= 10.0000000000
hf= -20.0000000000
nhex = 61
ncheck= 99999
r1 = 12
r2 = 17
r3 = 0
nz = 4
delteta= 0.0010000000
tolteta= 0.0000010000
eta = 0.9999999999
hj= 1.0000000000
phih = 90.0000000000
tetah = 0.0000000000
d(nano)= 0.5000000000
alfap= 3.0000000000
fm1= fe
fm2= sc
anip1= not

```

Fonte: Autor (2023).

4.6 MATERIAIS UTILIZADOS

Nesse estudo serão utilizados materiais ferromagnéticos, que são metais de transição e esses materiais apresentam momento magnético permanente mesmo sem a presença de um campo magnético externo. Devido a esse momento magnético permanente, materiais ferromagnéticos tendem a possuir elevada magnetização permanente, o que o torna atrativo para ímãs permanentes. (CALLISTER; RETHWISCH, 2019).

Os materiais de estudo da pesquisa são: Neodímio-Ferro-Boro (NdFeB), Samário cobalto (SmCo₅) e o Ferro (Fe), a Tabela 4.1 seguir demonstra alguns parâmetros de relevância desses materiais.

Tabela 4.1 – Parâmetros magnéticos dos materiais utilizados, Ferro, NdFeB e SmCo₅.

Material	Ferro (Fe)	NdFeB	SmCo ₅
$A(x10^{-12} J/m)$	2.8	7.7	22
$K(x10^6 J/m^3)$	0.048	5	17
$M_s(x10^6 A/m)$	1.71	1.28	0.84

Os parâmetros a serem levados em consideração na Tabela (4.1) são respectivamente, A que representa a constante de troca, K que remete a constante de anisotropia e M_s que é a constante de magnetização de saturação. A seguir será feita uma breve descrição dos materiais de estudo.

4.6.1 NEODÍMIO FERRO BORO

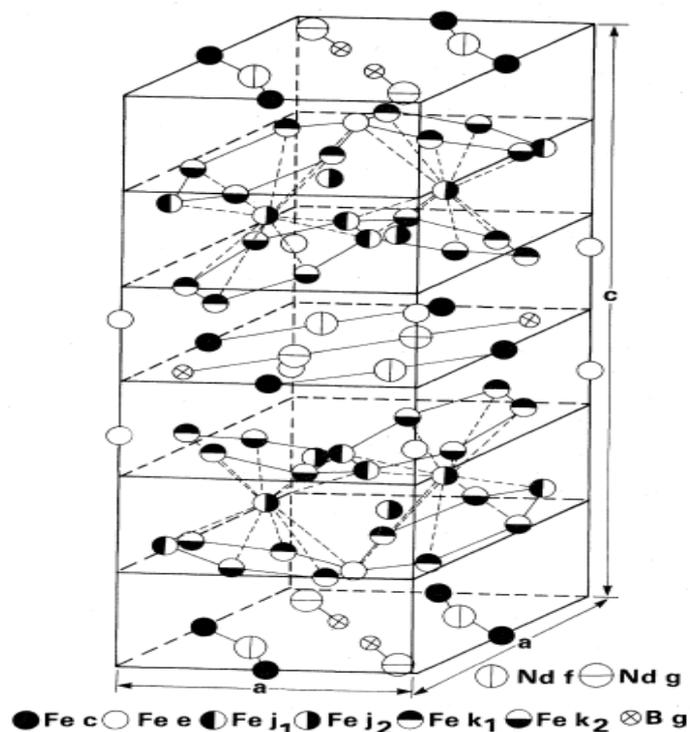
Ímãs permanentes com base em Nd₂Fe₁₄B foram descobertos quase simultaneamente em 1982 nos laboratórios de pesquisa da *General Motors* e no *Sumitomo* especial metal Corporation. Onde as duas empresas firmaram um acordo para que os ímãs de NdFeb pudesse ser vendido em todo o mundo, onde a *General Motors* tinha o direito de vender ímãs de NdFeb com tamanho de grão menor que um micrômetro, e a *Sumitomo* tinha direito de vender com tamanho de grão maior que um micrômetro (CROAT; ORMEROD, 2022).

O NdFeB é uma liga composta por materiais terra-raras, sendo um composto fundamental nos melhores ímãs permanentes atualmente, sendo capaz de oferecer uma alta magnetização (LIU *et al.*, 2009). Os ímãs de NdFeB são amplamente utilizados na alta tecnologia, como por exemplo, em discos rígidos de alta capacidade, ressonância magnética, geradores eólicos e motores elétricos (CROAT; ORMEROD, 2022).

A parte estrutural no $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ é bastante complexa como mostra a Figura 7, possuindo 68 átomos por célula unitária, onde dos 56 átomos de ferro residem no plano, entre as duas formam enrugamentos, que estão conectadas as redes hexagonais, os prismas coordenam todos os átomos de Nd e B com três átomos de Nd ligado ao B através das faces retangulares do prisma. Desse modo, essa fase metálica forte remete uns dos requisitos mais importantes para ímãs de alta performance, que é alta magnetização de saturação (M_s), sendo o NdFeB o melhor ímã permanente do mercado atualmente (CROAT; ORMEROD, 2022).

Com base na estrutura magnética forte de NdFeB, que pode ser vista na Figura 7, ele possui propriedades magnéticas melhoradas, como maior coercividade e produto energético máximo $(BH)_{max}$ elevado, além de propriedade magnéticas melhores do que ímãs de SmCo a liga de NdFeB, são os valores dos seus constituintes neodímio e ferro que são mais baratos, em contrapartida o SmCo possui temperatura de Curie (T_c) maior, desse modo ímãs de NdFeB em altas temperaturas perdem suas características magnéticas com maior facilidade (JILES, 2017).

Figura 7- Representação esquemática da estrutura do $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$



Fonte: (CROAT; ORMEROD, 2022).

4.6.2 SAMÁRIO COBALTO

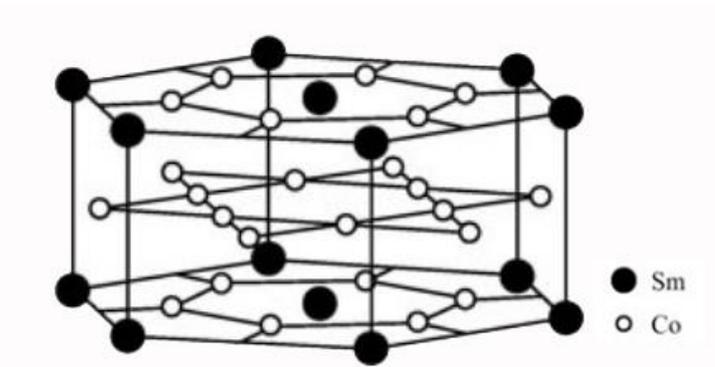
O SmCo_5 foi descoberto em 1968, por Velge e Buschow nos laboratórios de pesquisas de *Philips* na Holanda, onde eles relataram um ímã com $(BH)_{max}$ de $64,5 \text{ kJ/m}^3$ e com coercividade de $413,8 \text{ kA/m}^3$, sendo o primeiro ímã de SmCo_5 produzido, a partir dessa descoberta, e com estudo intenso da técnica de síntese em fase líquida em 1970 foi possível obter um $(BH)_{max}$ em torno de $191\text{-}199 \text{ kJ/m}^3$. A da técnica de síntese em fase líquida, se tornou um processo importante na produção de ímãs, sendo considerado padrão para construção de ímãs de SmCo e posteriormente NdFeB (CROAT; ORMEROD, 2022).

A liga intermediária SmCo_5 é composta por 36% de samário e o restante por cobalto, possui elevada constante de anisotropia uniaxial (K) como mostrado na Tabela (4.1). Um fator a ser levado em consideração é o $(BH)_{max}$ em ímãs à base de SmCo_5 , que atingiram valores entre 16 e 25 megagauss-oersted (MGOe) aproximadamente $128\text{-}200 \text{ (kJ/m}^3)$ (PAPAEFTHYMIU, 2022). Devido aos metais de transição como o Cobalto (Co), possuem altas temperaturas de Curie (T_c), SmCo_5 é atrativo para trabalhar em altas temperaturas (JILES, 2017).

Devido aos ímãs de SmCo possuem capacidade de trabalhar em altas temperaturas, e possuir estabilidade térmica, esses ímãs são aplicados por exemplo em motores de ultra ou alta velocidade, equipamentos de perfuração de petróleo e gás, naves espaciais e armas de alcance aéreo. Onde os ímãs não são destinados na construção de componentes estruturais, mas suas propriedades físicas e mecânicas, como flexibilidade e resistência à compressão, devem ser levados em consideração (CROAT; ORMEROD, 2022).

O SmCo_5 possui uma estrutura cristalina como mostrado na Figura 8, possuindo uma configuração camada por camada, orientada pelo eixo de fácil magnetização, nesta pesquisa considerado sendo o eixo x , que é representado na direção perpendicular à superfície (SAYAMA *et al.*, 2003).

Figura 8- Estrutura cristalina do SmCo₅



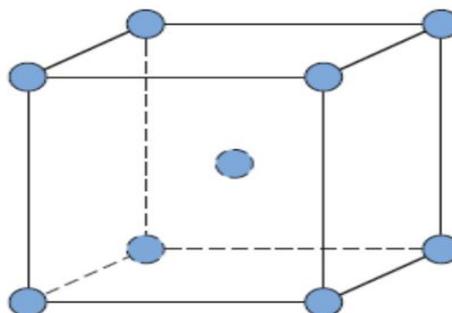
Fonte: (SAYAMA *et al.*, 2003).

4.6.3 FERRO

O ferro é um metal de transição, onde ele apresenta um momento magnético permanente, e essa característica é denominada de ferromagnetismo. O momento magnético permanente é proveniente dos momentos magnéticos atômicos, resultantes pela não anulação dos *spins* dos elétrons devido ao arranjo eletrônico do ferro (CALLISTER; RETHWISCH, 2019).

A estrutura cristalina do ferro é a cúbica de corpo centrado (CCC) como mostra na Figura 9, dentre algumas características do ferro, as de relevância são que o ferro é um material maleável e possui resistência mecânica (CALLISTER; RETHWISCH, 2019).

Figura 9- Estrutura cristalina do Ferro (CCC)

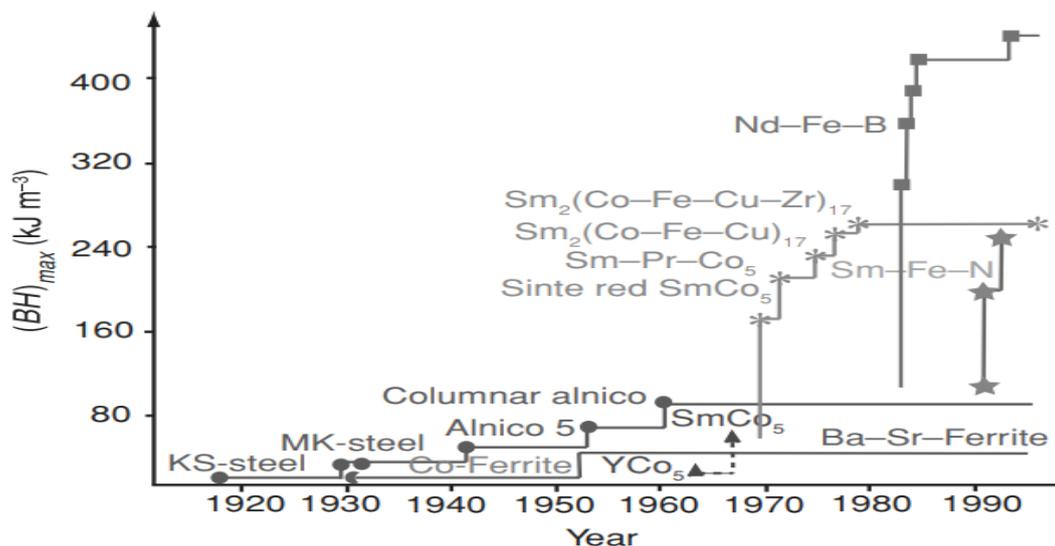


Fonte: (CALLISTER; RETHWISCH, 2019).

4.7 PRODUTO ENERGÉTICO MÁXIMO

No estudo de ímãs permanentes, um fator que é extremamente importante para determinar a qualidade e aplicabilidade de um ímã é o produto energético máximo $(BH)_{max}$, desde a descoberta dos ímãs permanentes, iniciou uma corrida para melhorar a qualidade e a estabilidade desses ímãs, e ao longo do século XX o $(BH)_{max}$ evoluiu consideravelmente como mostra a Figura 10 (PAPAEFTHYMIUO, 2022).

Figura 10- Evolução do Produto energético máximo em ímãs permanentes no século XX

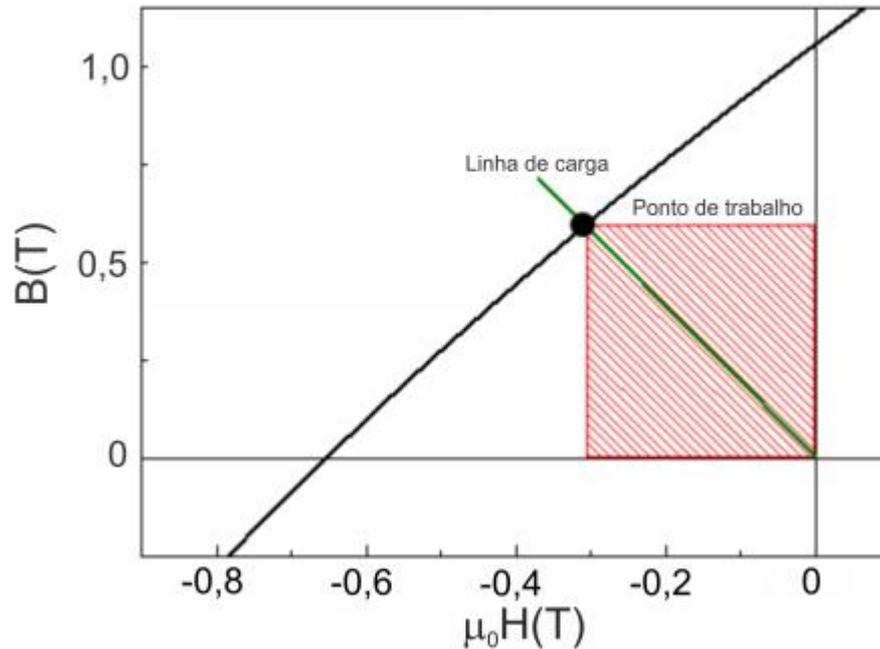


Fonte: (COEY; J. M. D. 2010).

O $(BH)_{max}$ é caracterizado pelo segundo quadrante da curva de histerese, onde ocorre a desmagnetização, onde compreender esse quadrante é altamente determinante na aplicabilidade de um certo material magnético para ímãs permanentes. Onde o que define essa qualidade é o produto energético máximo, que é mensurado em quilojoule por metro cúbico (kJ/m^3) ou Mega-Gauss Oersted ($MG - Oe$), sendo representado pela área do maior do quadrante desmagnetizado, da curva de B em função de H como mostrado na Figura 11, que representa o produto energético máximo. Desse modo ao longo do tempo foi buscado melhorias no produto energético máximo, visando melhorias no desempenho magnético dos ímãs

permanentes, como também redução nas dimensões desses ímãs, possibilitando construir dispositivos cada vez mais reduzidos e eficientes (OLIVEIRA, 2016).

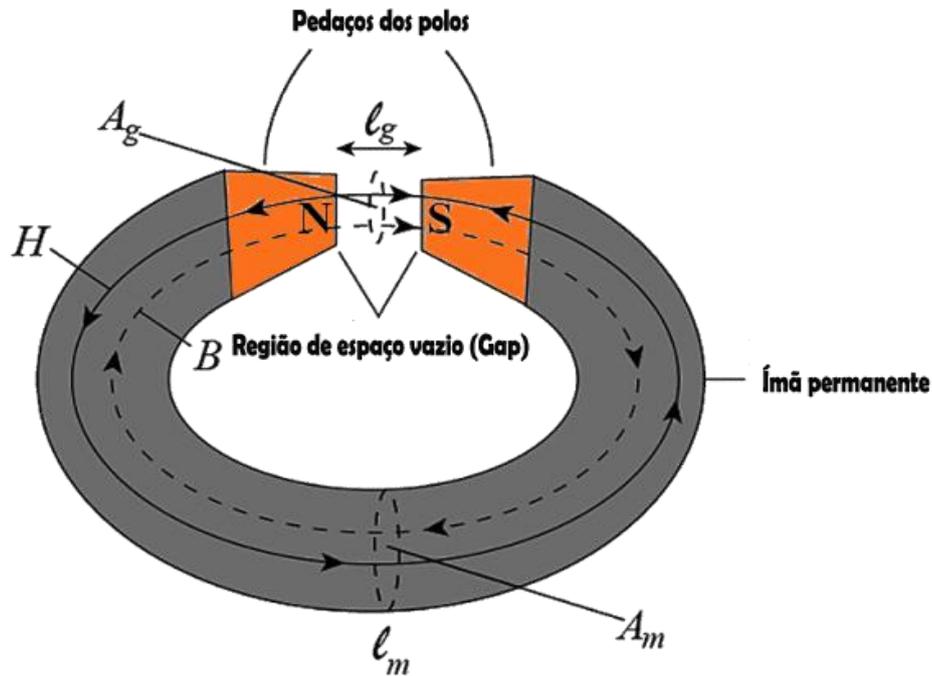
Figura 11- Curva de desmagnetização da histerese B-H



Fonte: (OLIVEIRA, 2016).

Para compreender o $(BH)_{max}$ devemos considerar um material ferromagnético em formato toroidal como demonstra a Figura 12, com comprimento l_m e área de seção transversal A_m que fornece um pequeno campo H_g , onde é retirado uma pequena porção do material formando uma região de espaço vazio (*gap*), e com a presença desse *gap* e provido um campo desmagnetizante nesta região. A orientação do campo magnético \vec{B} são contínuas e orientadas inversamente ao campo magnético (PAPAEFTHYMIU, 2022).

Figura 12- Representação esquemática de circuito magnético aberto



Fonte: adaptado de (PAPAEFTHYMIIOU, 2022).

Desse modo de acordo com a integral de Maxwell's, a superfícies de \vec{B} com ausência causada pelo *gap* pode ser descrita como:

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{a} = 0 \quad (4.7.1)$$

Ao percorrer o fluxo do campo magnético na região da espira:

$$B_m A_m = B_g A_g \quad (4.7.2)$$

Onde B_m e B_g , representam a densidades de indução magnética. Onde lei de Ampère para materiais sem corrente elétrica ao seu redor nos fornece (PAPAEFTHYMIIOU, 2022):

$$\oint \vec{H} \cdot d\vec{l} = 0 \quad (4.7.3)$$

De acordo com a Equação (4.7.3):

$$H_m l_m = H_g l_g \quad (4.7.4)$$

Ao multiplicar a Equação (4.7.4) pela Equação (4.7.2), é obtido:

$$B_m A_m H_m l_m = B_g A_g H_g l_g \quad (4.7.5)$$

Ao utilizar que $\vec{B}_g = \mu_0 \vec{H}_g$ dentro do *gap* e reorganizando os termos é obtido (PAPAEFTHYMIU, 2022).

$$H_g^2 = (B_m H_m) \left(\frac{A_m l_m}{\mu_0 A_g l_g} \right) = (B_m H_m) \left(\frac{V_m}{\mu_0 V_g} \right) \quad (4.7.6)$$

Onde V_m e V_g representam respectivamente os volumes do material magnético e do *gap*, desse modo para ser produzido um campo magnético H_g no *gap*, a porção do material será mínima quando o produto $B_m H_m$ for máximo. A indução magnética dentro do material, $\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$, é dada por (OLIVEIRA, 2016):

$$B = \mu_0(M_s - H) \quad (4.7.7)$$

Logo o produto energético BH será:

$$BH = \mu_0(M_s H - H^2) \quad (4.7.8)$$

O BH será máximo quando cumprir os seguintes requisitos:

$$\frac{d(BH)}{dH} = 0 \quad (4.7.9)$$

e

$$\frac{d^2(BH)}{dH^2} < 0 \quad (4.7.10)$$

Logo:

$$BH = \mu_0 M_s H - \mu_0 H^2 \Rightarrow BH = \mu_0 M_s - 2\mu_0 H \quad (4.7.11)$$

Desse modo:

$$\frac{d(BH)}{dH} = \mu_0 M_s - 2\mu_0 H \Rightarrow \mu_0 M_s - 2\mu_0 H = 0 \Rightarrow M_s = 2H \Rightarrow H = \frac{M_s}{2} \quad (4.7.12)$$

Como resultado da Equação (4.7.12) o campo magnético H que tende a maximizar o BH será quando o campo for $H = M_s/2$, para avaliar se é ponto de máximo basta checar o sinal da segunda derivada:

$$\frac{d^2(BH)}{dH^2} = \frac{d(\mu_0 M_s - 2\mu_0 H)}{dH} = -2\mu_0 \quad (4.7.13)$$

Como o sinal da segunda derivada é negativo, é cumprido os requisitos das Equações (4.7.9) e (4.7.10), desse modo basta substituir o valor de H que maximiza o BH na Equação (4.7.8):

$$(BH)_{max} = \mu_0 \left[M_s \frac{M_s}{2} - \left(\frac{M_s}{2} \right)^2 \right] = \mu_0 \left[\frac{M_s^2}{2} - \frac{M_s^2}{4} \right] = \mu_0 \left[\frac{2M_s^2 - M_s^2}{4} \right] \quad (4.7.14)$$

Logo a partir da Equação (4.7.14), para um produto energético máximo que seja ideal de um ímã permanente é obtido:

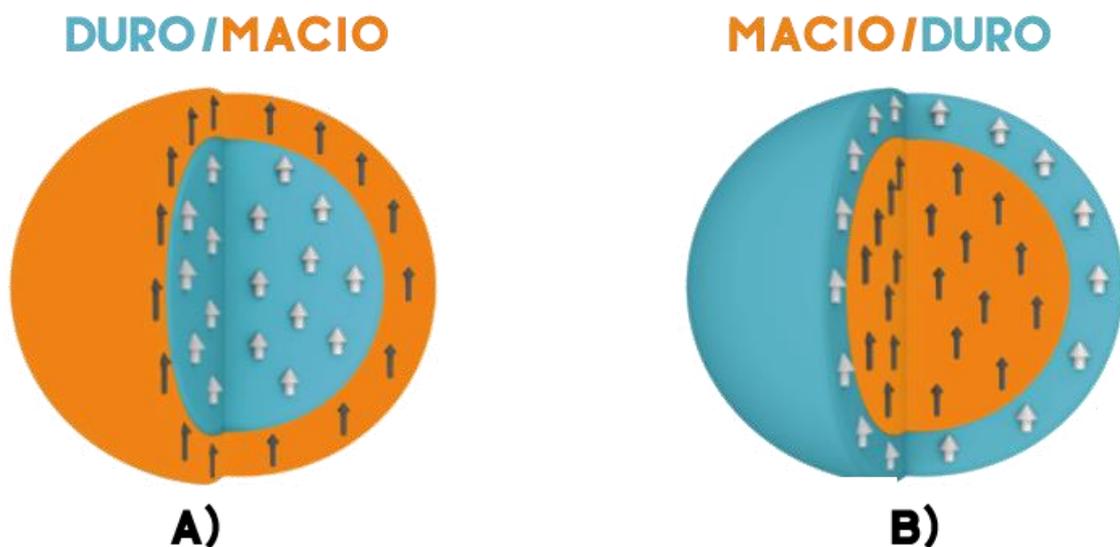
$$(BH)_{max} = \frac{1}{4} \mu_0 M_s^2 \quad (4.7.15)$$

Onde o produto energético máximo é dependente da magnetização de saturação, ou seja, quanto maior a magnetização de saturação, melhor o produto energético máximo de um ímã permanente.

4.8 COMPORTAMENTO MAGNÉTICO EM SISTEMAS NÚCLEO-CASCA

Sistemas bi-magnéticos do tipo núcleo casca partem da combinação de propriedades dos materiais ferromagnéticos duro e macio como demonstrado na Figura 13. A primeira combinação, que é demonstrada na Figura 13.A é de um núcleo magnético duro envolto de uma casca macia, que de acordo com Oliveira (2016): é possível obter um aumento significativo na magnetização de saturação, onde esse tipo de combinação pode nos oferecer melhorias no $(BH)_{max}$.

Figura 13- Representação de estruturas bi-magnéticas do tipo núcleo-casca



Fonte: adaptado de LÓPEZ-ORTEGA; ESTRADER; SALAZAR-ALVAREZ; ROCA; NOGUÉS (2015).

Outro tipo de combinação de nanopartículas magnéticas é constituído de um núcleo magnético macio envolto de uma casca magnética dura representado na Figura 13.B, onde essa segunda combinação é o objeto de estudo dessa pesquisa. Nesse tipo de estrutura tanto o núcleo como a casca podem exibir propriedades

ferromagnéticas (FM), ferrimagnéticas (FiM) ou antiferromagnética (AFM), nesse sistema do tipo núcleo-casca a interação de troca entre os materiais nos proporciona maior liberdade para modificar o comportamento magnético desses sistemas (LÓPEZ-ORTEGA; ESTRADER; SALAZAR-ALVAREZ; ROCA; NOGUÉS, 2015).

Com base nessa interação entre materiais AFM e FM, em 1956 Meiklejon, observou que em uma nanopartícula de Co/CoO, um fenômeno que foi denominado de “Exchange Bias” que consiste basicamente, no deslocamento da curva de histerese de um material ferromagnético, onde alguns autores definiram esse fenômeno como “Uma nova descoberta de um tipo de anisotropia magnética, descrito como anisotropia de troca, onde essa anisotropia de troca é resultante da interação entre materiais AFM e FM” (COEY; J. M. D. 2010).

Desde a descoberta do “*Exchange Bias*”, a busca por melhorias nas propriedades magnéticas das estruturas do tipo núcleo-casca tanto das que partem das combinações de materiais ferromagnéticos duro/maio e macio/duro se tornou de interesse de estudo, onde a segunda combinação macio/duro que é representada esquematicamente na Figura 13.B foi escolhida como foco desta pesquisa. Onde a primeira aparição desse tipo de combinação foi em 1964, por R.B Falk, onde o núcleo era constituído de FeCo e a casca dura de Co-Ferrita, e possuindo um $(BH)_{max}$ em torno de 32 kJ.m^3 (LÓPEZ-ORTEGA; ESTRADER; SALAZAR-ALVAREZ; ROCA; NOGUÉS, 2015).

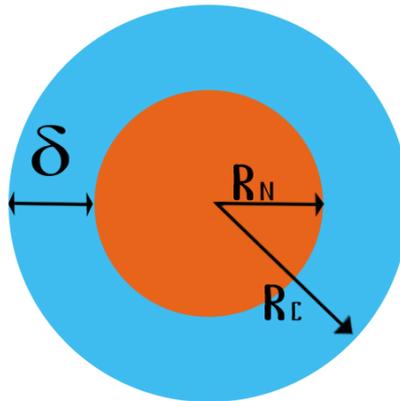
Outro fator importante para compreender o comportamento magnético de nanoestruturas do tipo núcleo-casca, é a magnetização de saturação, que é inversamente proporcional ao tamanho da casca, onde a magnetização média total desse sistema pode ser definida como (OLIVEIRA, 2016):

$$M = f_n M_s^n + f_c M_s^c \quad (4.8.1)$$

Onde f_n e f_c representam as frações volumétricas do núcleo e da casca, respectivamente. O sistema de estudo da pesquisa, é um sistema núcleo-casca esférico, que pode ser representado pela Figura 14, onde δ remete a espessura da

casca, R_n e R_c correspondem respectivamente ao raio do núcleo e raio da casca, desse modo é de interesse definir a porção volumétrica, dos materiais magnéticos duros e macios desse sistema.

Figura 14- Representação de uma nanopartícula do tipo núcleo-casca



Fonte: adaptado de (OLIVEIRA, 2016).

Onde nesse tipo de sistema o volume é dado por:

$$V = \frac{4\pi r^3}{3} \quad (4.8.2)$$

Desse modo f_n e f_c são descritos como:

$$f_n = \frac{\frac{4\pi r_n^3}{3}}{\frac{4\pi r_c^3}{3}} = \frac{r_n^3}{r_c^3} = \frac{r_n^3}{(r_n + \delta)^3} \quad (4.8.3)$$

$$f_c = 1 - f_n = 1 - \frac{r_n^3}{(r_n + \delta)^3} \quad (4.8.4)$$

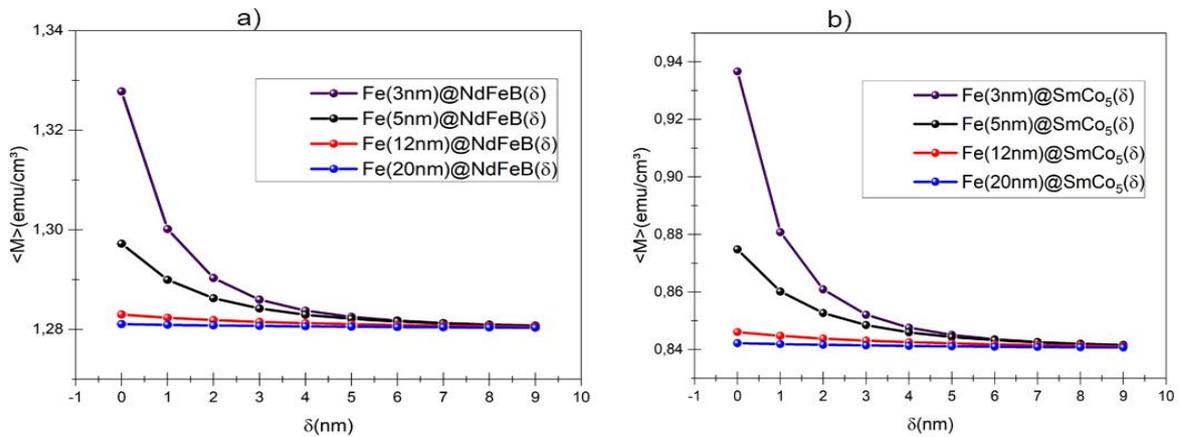
Onde a magnetização média da Equação (4.8.1) pode ser reescrita como

$$M = \frac{r_n^3}{(r_n + \delta)^3} M_s^n + M_s^c \left[1 - \frac{r_n^3}{(r_n + \delta)^3} \right] \quad (4.8.5)$$

De acordo com a Equação (4.8.5) a magnetização média decresce à medida que as dimensões no núcleo aumentam, como pode ser visto na Figura 15, onde

temos a magnetização média de dois sistemas nanoestruturados do tipo núcleo@casca um de Fe@SmCo₅ na Figura 15.B e outro de Fe@NdFeB na Figura 15.A, com seus diâmetros de núcleo e da casca variando respectivamente: 3, 5, 12 e 20 nanômetros. Podemos observar que à medida que a dimensão do núcleo aumenta a magnetização média diminui.

Figura 15- Representação da magnetização média



Fonte: Autor, 2023.

A anisotropia também é dependente dos constituintes magnéticos do sistema núcleo@casca, sendo assim a constante de anisotropia pode ser descrita como:

$$K = f_n K_n + f_c K_c \quad (4.8.6)$$

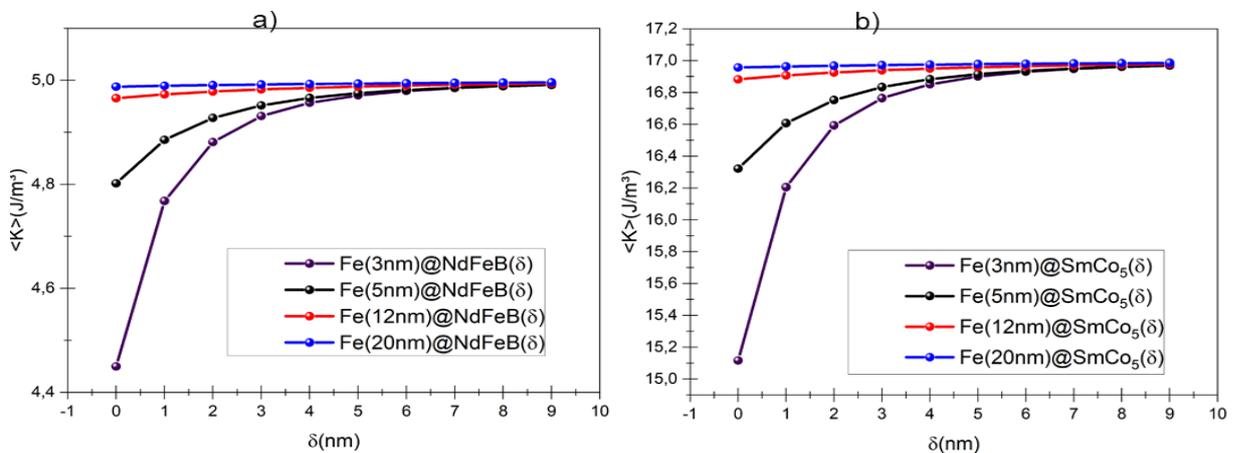
Desse modo analogamente utilizando as Equações (4.8.3) e (4.8.4) pode descrever a última equação como:

$$K = \frac{r_n^3}{(r_n + \delta)^3} K_n + K_c \left[1 - \frac{r_n^3}{(r_n + \delta)^3} \right] \quad (4.8.7)$$

Onde K_n e K_c representam respectivamente, a constante de anisotropia do material do núcleo e da casca, desse modo a anisotropia é dependente do tamanho casca, com núcleo consideravelmente pequeno a constante de anisotropia decresce com maior velocidade, em contrapartida com núcleos maiores ela decresce com menor velocidade (OLIVEIRA, 2016).

Em relação a anisotropia média de sistemas nanoestruturados do tipo núcleo@casca podemos observar na Figura 16, dois sistemas um composto de Fe@SmCo₅ representado na Figura 16.B e outro composto de Fe@NdFeB descrito na Figura 16.A, ambos variando suas dimensões do núcleo respectivamente em 3, 5, 12 e 20 nanômetros. Sendo possível perceber que em núcleo com dimensões menores a anisotropia média é relativamente baixa, e ao prover aumento significativos nas dimensões no núcleo a anisotropia média de sistemas nanoestruturados do tipo núcleo@casca tendem a aumentar.

Figura 16- Representação da anisotropia média



Fonte: Autor, 2023.

Outro fator de interesse em sistemas magnéticos é o campo coercivo, onde ele é responsável por reverter a magnetização na curva de histerese, sendo definido como (PAPAEFTHYMIU, 2022):

$$H_c = \frac{2K}{M_s} \quad (4.8.8)$$

Onde K representa a constante de anisotropia e M_s a magnetização de saturação. Com base nas Equações (4.8.5), (4.8.7), nos remete que o campo coercivo também é dependente das dimensões do núcleo e da casca, dessa maneira o campo coercivo dessas nanopartículas pode ser descrito como (OLIVEIRA, 2016):

$$H_c = \frac{2 \left[\frac{r_n^3}{(r_n + \delta)^3} \right] K_n + K_c \left[1 - \frac{r_n^3}{(r_n + \delta)^3} \right]}{\frac{r_n^3}{(r_n + \delta)^3} M_s^n + M_s^c \left[1 - \frac{r_n^3}{(r_n + \delta)^3} \right]} \quad (4.8.9)$$

Com base na Equação (4.8.9) em sistemas do tipo núcleo-casca esféricos, constituídos de um núcleo com material magnético macio e de uma casca com material magnético duro, o campo coercivo tende a aumentar de acordo com a dimensão da casca, a magnetização média M decresce de acordo com δ , já a anisotropia cresce com aumento da casca.

5 $(BH)_{max}$ EM SISTEMAS NÚCLEO@CASCA ESFÉRICOS

Desde a descoberta dos ímãs terras raras no século XX, esses ímãs são amplamente utilizados em várias áreas de atuação devido a seu alto desempenho magnético, como por exemplo, equipamento de processamento de alimentos, exploração de petróleo e gás, celulares, computadores, alto-falantes, eletrodomésticos, satélites e sistemas de radares. Dentre os ímãs terra raras o que se destacam são: SmCo_5 , $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ e $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ (CROAT; ORMEROD, 2022).

Com os avanços nas técnicas de sínteses de nanopartículas magnéticas, foi possibilitado grande controle e crescimento de parâmetros de interesse nessas estruturas, como por exemplo aumento no produto energético máximo. Esse tipo de estrutura que é representada na Figura 13, parte da combinação de propriedades intrínsecas de materiais duro-macio, resultando em novas propriedades aprimoradas, onde a interação entre os dois constituintes nos permite maior liberdade para modificar as propriedades magnéticas da nanopartícula (LÓPEZ-ORTEGA; ESTRADER; SALAZAR-ALVAREZ; ROCA; NOGUÉS, 2015).

Dentre as diversas áreas de aplicação de nanopartículas bi-magnéticas, a área de interesse de estudo dessa pesquisa é de ímãs permanentes de alta performance, onde essas nanoestruturas nos permitem teoricamente melhorias no $(BH)_{max}$, desde o início do século XX o valor $(BH)_{max}$ aumentou consideravelmente em ímãs permanentes como mostra a Figura 10, sendo um fator impactante nos ímãs

permanentes. Atualmente as melhores opções do mercado em ímãs permanentes são respectivamente, ímãs de $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ com $(BH)_{max}$ em torno de $515 \text{ kJ} \cdot \text{m}^{-3}$, e ímãs de SmCo_5 com $(BH)_{max}$ em torno de $175 \text{ kJ} \cdot \text{m}^{-3}$ (PAPAEFTHYMIYOU, 2022).

5.1 $(BH)_{max}$ EM SISTEMAS NÚCLEO@CASCA ESFÉRICOS Fe@NdFeB

Com a descoberta do NdFeB foi possibilitado um aumento significativo no $(BH)_{max}$ dos ímãs permanentes, em torno de 80%, isso na década de 1980. Porém desde o final da década de 1980 não ocorreu avanços significativos no $(BH)_{max}$, desse modo buscam avanços relevantes em ímãs permanentes, tanto no $(BH)_{max}$ como na estabilidade térmica. Uma forma possível de propiciar avanços é utilizando as propriedades magnéticas distintas, proveniente das nanoestruturas bi-magnéticas acopladas magneticamente através de uma interface, partido da interação entre materiais magnéticos duros e macios. (CROAT; ORMEROD, 2022).

Como citado no Seção 4.7, o $(BH)_{max}$ é um fator de extrema importância para definir a qualidade de um material ferromagnético na aplicação de ímãs permanentes, levando em consideração que o NdFeB possui um valor de produto energético máximo muito acima de média, se torna de interesse sobrepor esse limite combinando suas propriedades de interesse como sua alta coercividade. Desse modo, nesta pesquisa será realizado um estudo teórico do produto energético máximo, em um sistema núcleo@casca de Fe(d)@NdFeB(δ), sendo uma nanopartícula com seu núcleo macio e sua casca dura.

Como base em superar o limite do produto energético máximo dos ímãs atuais o NdFeB foi escolhido por apresentar um produto energético máximo em torno de $515 \text{ kJ} \cdot \text{m}^{-3}$, com magnetização orientada e sinterizada, possuindo eficiência de 100%. O NdFeB possui densidade de anisotropia em torno de $(K = 5 \times 10^6 \text{ J/m}^3)$, e sua magnetização de saturação corresponde a $(M_s = 1,28 \times 10^6 \text{ A/m})$, já o ferro possui baixa densidade de anisotropia $(K = 2,8 \times 10^6 \text{ J/m}^3)$ e alta magnetização de saturação $(M_s = 1,71 \times 10^6 \text{ A/m})$ (COEY; J. M. D. 2020).

Para elevar o produto energético máximo é necessário alta coercividade, que corresponde à alta anisotropia. Desse modo em sistema nanoestruturados do tipo núcleo@casca constituídos de núcleo com material magnético duro e casca com material magnético macio, à medida que a dimensão volumétrica da casca cresce a magnetização média também aumenta, mas em contramão a energia de anisotropia decresce, sendo necessário que a nanoestrutura seja otimizada, alisando o impacto do diâmetro da casca de NdFeB (OLIVEIRA, 2016).

A busca para elevar o produto energético máximo se torna de interesse do meio acadêmico, onde podemos citar pesquisas recentes que possuem foco em analisar o $(BH)_{max}$ em nanoestruturas com diferentes geometrias, como por exemplo esférica e cilíndrica. No que diz respeito a geometria esférica, em um estudo do produto energético máximo em uma nanoestrutura de $\text{SmCo}_5@Fe$, foi observado que o maior impacto no padrão magnético, ocorre na ação do campo dipolar do núcleo na casca (OLIVEIRA, 2018).

Em outro estudo, que analisou o $(BH)_{max}$ em uma nanoestrutura cilíndrica, composta de $\text{FePt}@Fe$, foi observado que, para melhorias no $(BH)_{max}$ é necessário pequenas dimensões no núcleo, já o Fe por possui alta energia de troca favorece a orientação da magnetização resultando em um maior produto energético máximo (SOUZA, 2019). Desse modo compreender o impacto do campo dipolar nas nanoestruturas, como também os mecanismos de reversão da magnetização e a interação energia de interface entre os constituintes se torna um caminho para compreender e elevar o $(BH)_{max}$.

Em sistemas nanoestruturados do tipo núcleo@casca com núcleo macio e a casca dura, a magnetização média em sistemas com núcleo macio, tendem a ser maiores em núcleos com dimensões menores, ao aumentar as dimensões do núcleo a magnetização média decresce. Já a anisotropia tende a crescer de acordo com aumento nas dimensões do núcleo.

Desse modo nesta pesquisa foi realizado o estudo teórico do produto energético máximo, em um sistema nanoestruturado do tipo núcleo@casca, composto

por um núcleo com material magnético macio de Ferro (Fe) e sua casca com material magnético duro de Neodímio Ferro Boro (NdFeB). Nesse sistema de estudo, as espessuras tanto do núcleo quanto da casca foram respectivamente 5,12 e 21 nanômetros, de modo a analisar o quanto o produto energético máximo varia de acordo com essas dimensões.

As dimensões escolhidas por esta pesquisa foram propostas, com foco em prover variações significativas no comportamento magnético da nanoestrutura bimagnética do tipo núcleo@casca. Desse modo a facilitar o comparativo do produto energético máximo final de acordo com as dimensões propostas. Com base em analisar esse comportamento foi utilizado simulações computacionais para calcular numericamente o $(BH)_{max}$ nessas nanoestruturas, primeiramente uma nanoestrutura de Fe@NdFeB e posteriormente uma nanoestrutura de Fe@SmCo₅.

5.2 $(BH)_{max}$ EM SISTEMAS NÚCLEO@CASCA ESFÉRICOS DE Fe@SmCo₅

Dentre os ímãs terra raras que se destacam no mercado, essa pesquisa tem como interesse o SmCo₅ que possui $(BH)_{max}$ em torno de $175 \text{ kJ} \cdot \text{m}^{-3}$, como também apresenta uma característica altamente interessante, que é poder trabalhar em altas temperaturas, possuindo temperatura crítica ($T_c = 1004\text{k}$) com sua cristalografia hexagonal (PAPAEFTHYMIU, 2022). O SmCo₅ possui alta anisotropia magnética em torno de $(17 \times 10^6 \text{ J/m}^3)$ e devido a sua grande estabilidade térmica é uma liga importante para ser utilizada como material magnético em ímãs permanentes que necessitem serem aplicados a altas temperaturas (WU, L. *et al*, 2016).

Sendo a estabilidade um fator importante para um ímã permanente, de modo que devido a aplicabilidade podem surgir problemas que atrapalhem a qualidade do ímã, como por exemplo, efeitos temporários como a redução da magnetização remanente, devido às altas temperaturas que o ímã esteja empregado. Já em efeitos permanentes que podem prejudicar o desempenho do ímã temos a deterioração permanente do campo magnético, que pode ser causado por exposição a campo muitos altos causando desmagnetização de campo, exposição a altas temperaturas

causando desmagnetização térmica, e alteração na microestrutura devido a um longo tempo exposto a altas temperaturas, causando envelhecimento (JILES, 2017).

Em contrapartida aos problemas que podem ser causados em ímãs permanentes por operarem em altas temperaturas o SmCo_5 surge com uma proposta interessante para fomentar uma nanoestrutura bi-magnéticas estabilizada, e devido a possui alta anisotropia e alta temperatura de Curie, tendem a ser escolhido para fabricar ímãs permanentes com alta coercividade que possam operar em temperaturas elevadas (JILES, 2017).

Na presente pesquisa será realizado um estudo teórico no produto energético máximo, de uma estrutura do tipo núcleo@casca de $\text{Fe(d)}@ \text{SmCo}_5(\delta)$, constituída de um núcleo macio revestida de uma casca dura, onde as dimensões tanto do núcleo como da casca variam respectivamente entre 3, 5,12 e 20 nanômetros, visando compreender como o produto energético máximo dessa nanoestrutura se comporta com essa variação de diâmetro.

5.3 MODELO NUMÉRICO EM SISTEMAS NÚCLEO-CASCA

O sistema estudado no presente trabalho consiste em uma nanoestrutura com geometria esférica, contendo um núcleo de material magnético macio, revestido por uma casca com material magnético duro. Na descrição numérica deste sistema consideramos que os eixos de anisotropia tanto do núcleo, quanto da casca estão na mesma direção. Além disso, serão levados em consideração os seguintes parâmetros geométricos como diâmetro do núcleo, espessura da casca e parâmetros intrínsecos para descrever os materiais magnéticos em termos das quantidades físicas mais usuais em magnetismo.

O sistema é descrito em termos de célula de simulação, descrito na Seção 4.3, cada célula de simulação representa o momento magnético de uma porção do material. Consideramos uma única partícula submetida a um campo magnético externo \vec{H} com intensidade suficiente para que os momentos magnéticos estejam todos paralelos ao campo aplicado, o que caracteriza um sistema magneticamente

saturado. Posteriormente o campo aplicado é reduzido lentamente até atingir o valor de campo magnético nulo, em seguida o campo magnético tem seu sentido invertido e sua intensidade é aumentada até que ocorra a reversão total da magnetização da partícula.

Para cada valor de \vec{H} é encontrado o padrão magnético da nanopartícula, esse padrão magnético é obtido quando cada momento magnético se encontra em situação de torque nulo, situação essa que é caracterizada pelo momento magnético alinhado paralelamente ao campo efetivo local. Essa situação é calculada numericamente através do método auto-consistente, que segue com o algoritmo representado na Seção 4.5. De posse da configuração magnética de equilíbrio, será feito sequencialmente o cálculo da magnetização efetiva, a indução magnética bem como o produto energético máximo (OLIVEIRA,2016).

6 RESULTADOS E DISCUSSÃO

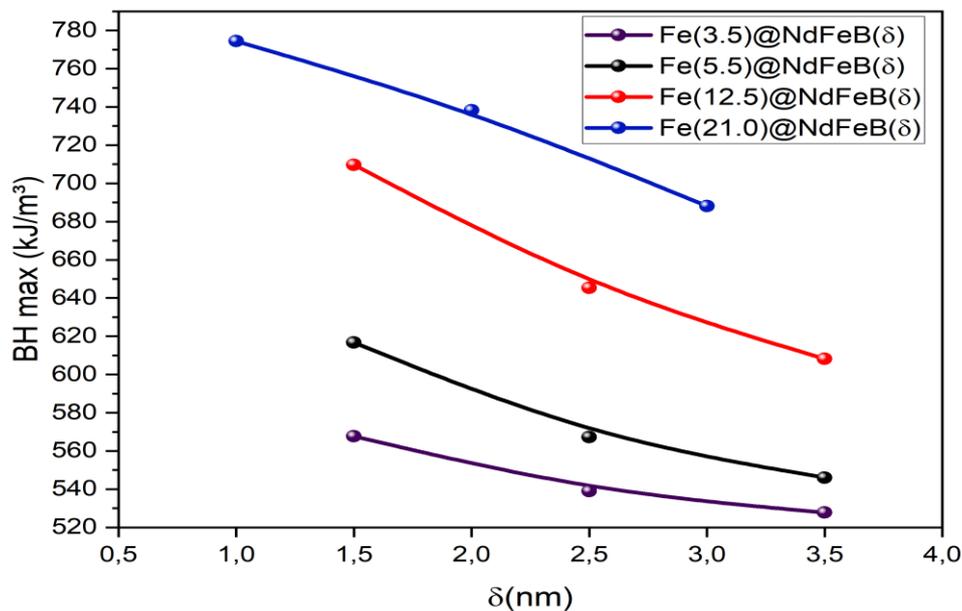
Nesta pesquisa foi realizado a análise do comportamento do produto energético máximo em duas nanoestruturas bi-magnéticas do tipo núcleo@casca, uma sendo composta pelos materiais magnéticos Fe@NdFeB e a outra composta pelos materiais magnéticos Fe@SmCo₅, ambas com geometria esférica. Em ambas as nanoestruturas, o produto energético máximo foi analisado considerando partículas com dimensões equivalentes, sendo as dimensões do núcleo de 3,5 nm, 5,5 nm, 12,5 nm e 21,0 nm. Para partículas cujo núcleo apresentam diâmetro de 21 nm espessura da casca (δ) foi considerada de 1,0 nm, 2,0 nm. Para os núcleos com tamanho de 5,5 nm e 12,5 nm considerou-se cascas de 1,5 nm, 2,5 nm e 3,5 nm.

Para nanopartículas com núcleo de 21 nm de diâmetro foram utilizadas células de simulação com aresta de 1,0 nanômetros. Tal escolha permitiu uma diminuição do esforço computacional, sem que houvesse perda no detalhamento numérico do sistema.

Na análise do produto energético máximo em uma nanoestrutura bimagnética do tipo núcleo@casca composta de Fe@NdFeB foi observado um comportamento,

onde o produto energético máximo $(BH)_{max}$ possui valores mais elevados considerando núcleos de maior dimensão. Considerando um diâmetro específico e analisando diferentes espessuras de casca observou-se que o $(BH)_{max}$ apresenta uma redução à medida que a espessura da casca aumenta. Como pode ser visto na Figura 17, uma partícula com um núcleo com 5,5 nm de diâmetro e casca de 1,5 nm, apresenta $(BH)_{max}$ de 616,7 kJ/m³, ao passo que para um núcleo de 21 nm de diâmetro e casca de 1,0 nm de espessura o produto energético foi de 774,4 kJ/m³, resultando em um aumento de 25% no produto energético máximo.

Figura 17- Produto energético máximo em nanopartícula de Fe@NdFeB



Fonte: Autor, 2023.

Uma comparação de volume percentual da composição da nanopartícula mostra que, em uma nanoestrutura com núcleo de 5,5 nm e casca com 1,5 nm com outra, 28,70 % do material está no núcleo, ao passo que 71,30 % localizam-se na casca. Por outro lado, uma nanoestrutura com núcleo de 21,0 nm e casca de 1,0 nm, possui 77,23 % de seu volume percentual contido no núcleo e apenas 22,77 % de seu volume na casca. Considerando o fato de que a magnetização de saturação do Fe é maior que a do NdFeB, o produto energético máximo é maior para partícula com núcleos maiores, como era de se esperar visto o comportamento mostrado na Figura

15. Desse modo, a alta magnetização de saturação do Ferro é um fator que implica diretamente no $(BH)_{max}$ dessa nanoestrutura. O aumento na espessura da casca leva a uma diminuição da magnetização média na nanoestrutura, tal fato implica num impacto negativo na otimização do $(BH)_{max}$. Esse comportamento pode ser visto na Figura 17.

Em todos os casos analisados, à medida que houve incremento na espessura da casca o $(BH)_{max}$ apresentou diminuição de seu valor observado. Em termos de comparação, como pode ser visto na Figura 17, uma estrutura com núcleo com 12,5 nm e casca com 1,5 nm possui $(BH)_{max}$ em torno de $709,7 \text{ kJ/m}^3$, já uma estrutura com mesmo diâmetro do núcleo de 12,5 nm e casca com 3,5 nm seu $(BH)_{max}$ cai para $608,1 \text{ kJ/m}^3$, uma diminuição considerável de 14% no $(BH)_{max}$, em um aumento de 2,0 nm na espessura da casca.

Ao comparar uma nanoestrutura de Fe(3,5 nm)@NdFeB(1,5 nm) que possui $(BH)_{max}$ teórico de $567,6774 \text{ kJ/m}^3$, com outra nanoestrutura de Fe(12,5 nm)@NdFeB(1,5 nm) onde ela possui $(BH)_{max}$ de $709,7131 \text{ kJ/m}^3$, um aumento de 25,02% no $(BH)_{max}$, levando em consideração que a espessura da casca foi fixada em 1,5 nm. Desse modo a magnetização do Fe se torna o fator que impacta diretamente no produto energético máximo das nanoestruturas analisadas, e com isso para meios de comparação devemos analisar outros tipos de nanoestruturas para analisar o impacto do NdFeB.

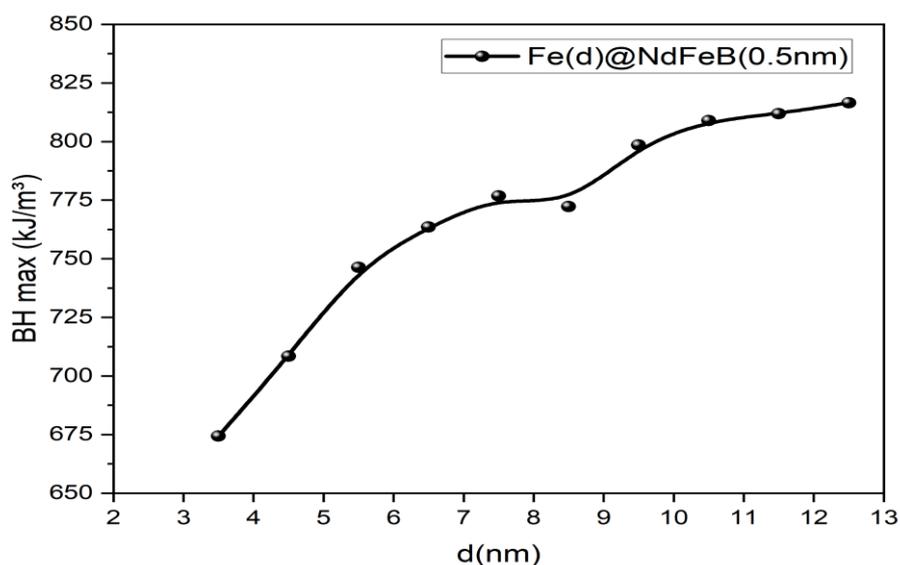
Vale ressaltar que um nanocompósito formado por Nd₂Fe₁₄B/ α -FeCo possui $(BH)_{max}$ em torno de $320 \approx 480 \text{ kJ/m}^3$ (PAPAEFTHYMIU, 2022), valor que comparado com uma nanoestrutura de Fe@NdFeB com núcleo de 5,5 nm e casca de 1,5 nm possuindo $(BH)_{max}$ teórico de $616,7054 \text{ kJ/m}^3$ foi menor. Já em uma pesquisa recente que simula o $(BH)_{max}$ de uma nanoestrutura semelhante de α -Fe@Nd₂Fe₁₄B em altas temperaturas, foi observado em nanocompósito de 6 nm, que o percentual volumétrico de núcleo de Fe ideal para um $(BH)_{max}$ otimizado é de 70%, e em uma temperatura próxima da operacional de um ímã permanente de Nd₂Fe₁₄B que é torno

de 453,15 K, o $(BH)_{max}$ no nanocompósito de α -Fe@Nd₂Fe₁₄B foi em torno de 550 kJ/m^3 (WESTMORELAND *et al.*, 2020).

Uma nanoestrutura de Fe@NdFeB com núcleo com dimensão de 5,5 nm e casca com 1,5 nm possui $(BH)_{max}$ em torno de 616,7 kJ/m^3 , e ao compará-lo um material de Nd₂Fe₁₄B que possui $(BH)_{max}$ em torno de 516 kJ/m^3 , em sua forma orientada e sintetizada (COEY, 2020), foi observado um aumento significativo no produto energético máximo de 19%. Já a mesma nanoestrutura de Fe@NdFeB com núcleo de 5,5 nm e agora com uma casca com espessura reduzida de 0,5 nm possui $(BH)_{max}$ de 746,4 kJ/m^3 , e comparado com o Nd₂Fe₁₄B teve aumento de 44% no $(BH)_{max}$.

Levando em consideração esse raciocínio, à medida que a dimensões do núcleo crescem considerando uma casca com espessura fixa, ocorre aumento significativo do $(BH)_{max}$. Na Figura 18 mostramos o comportamento do $(BH)_{max}$ em nanoestrutura de Fe@NdFeB. Nessa análise temos o núcleo variando de 3,5 nm até 12,5 nm e casca de espessura fixa de 0,5 nm.

Figura 18- Produto energético máximo em nanopartícula de Fe@NdFeB



Fonte: Autor, 2023.

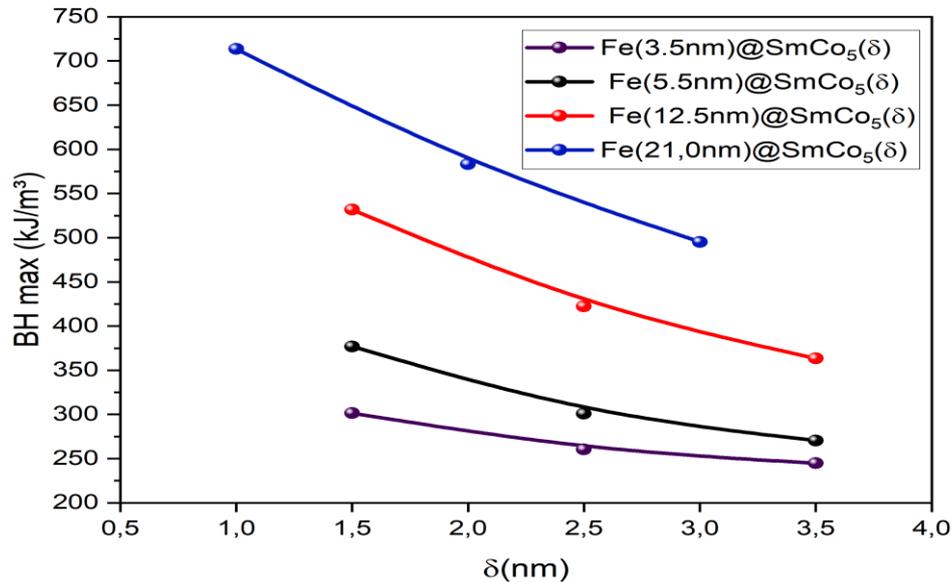
Ao comparar uma nanoestrutura de Fe@NdFeB com núcleo de diâmetro 3,5 nm e casca de diâmetro 0,5 nm que possui $(BH)_{max}$ de $674,3560 \text{ kJ/m}^3$, com a mesma nanoestrutura com o núcleo com 12,5 nm e casca com diâmetro de 0,5 nm possui $(BH)_{max}$ de $816,5 \text{ kJ/m}^3$, um aumento significativo de 21,07%. Em relação com $(BH)_{max}$ do material magnético Nd₂Fe₁₄B, a nanoestrutura obteve um aumento consideravelmente elevado de 58%.

Observando a Figura 18 podemos comparar uma nanoestrutura de Fe@NdFeB com núcleo de diâmetro 3,5 nm e casca de diâmetro 1,5 nm que possui $(BH)_{max}$ de $567,67 \text{ kJ/m}^3$. Os mesmos materiais, constituindo uma estrutura com núcleo de 12,5 nm de diâmetro e casca com 0,5 nm de espessura o $(BH)_{max}$ é de $816,58 \text{ kJ/m}^3$, um aumento significativo de cerca de 43%. Em relação com $(BH)_{max}$ do material magnético Nd₂Fe₁₄B que possui $(BH)_{max}$ teórico de 516 kJ/m^3 (COEY, 2020), a última nanoestrutura mencionada obteve um aumento consideravelmente elevado de 58,2%.

Desse modo uma nanoestrutura composta de Fe@NdFeB, com núcleo de diâmetro com 12,5 nm e casca com diâmetro de 0,5 nm apresentou o maior $(BH)_{max}$ nos diâmetros analisados, possuindo $(BH)_{max}$ em torno de $816,5 \text{ kJ/m}^3$. Como também foi observado um comportamento fora do padrão da curva do $(BH)_{max}$ na Figura 18, onde do diâmetro de núcleo 2,5 nm para o diâmetro 3,5 nm ocorreu decaimento do $(BH)_{max}$, esse decaimento também foi observado na passagem de diâmetro de 7,5 nm para 8,5 nm.

Já em nanopartículas bi-magnéticas de Fe@SmCo₅ com geometria esférica, foi observado um padrão similar das nanopartículas de Fe@NdFeB, que pode ser visto na Figura 19, onde o aumento do $(BH)_{max}$ está entrelaçado com aumento da dimensão do núcleo e diminuição do tamanho da casca. Onde uma nanopartícula de Fe@SmCo₅ com núcleo de dimensão 5,5 nm e com casca de espessura 1,5 apresentou $(BH)_{max}$ em torno de $376,9 \text{ kJ/m}^3$, e ao compará-la com outra nanopartícula de Fe@SmCo₅ agora com núcleo de dimensão 21,0 nm e possuindo mesmo tamanho de casca de 1,5 nm o $(BH)_{max}$ apresentado foi de $713,5 \text{ kJ/m}^3$, um aumento considerável de 87%.

Figura 19- Produto energético máximo em nanopartícula de Fe@SmCo₅



Fonte: Autor, 2023.

O produto energético máximo teórico para SmCo₅ está em torno de 150 kJ/m^3 (COEY, 2010), em termos de comparação uma nanoestrutura de Fe@SmCo₅ com núcleo de dimensão 12,5 nm e casca com dimensão de 1,5 nm apresenta $(BH)_{max}$ de 531,7 kJ/m^3 , apresentando um aumento considerável em relação a um material magnético isolado, onde foi observado que o percentual volumétrico da casca de SmCo₅ que envolve o núcleo de Fe, contribui diretamente no produto energético máximo dessa nanopartícula.

O percentual volumétrico da casca em uma nanoestrutura de Fe@SmCo₅ com núcleo de 5,5 nm e casca com espessura de 1,5 está em torno de 72,91%, já em uma nanoestrutura com núcleo de 21,0 nm e casca com espessura de 1,0 o percentual volumétrico da casca é de 23,88%. O que reflete diretamente no aumento do $(BH)_{max}$, onde o núcleo de ferro é responsável por esse aumento devido sua alta magnetização de saturação, e como visto na Equação (4.7.15) o $(BH)_{max}$ é dependente da magnetização de saturação.

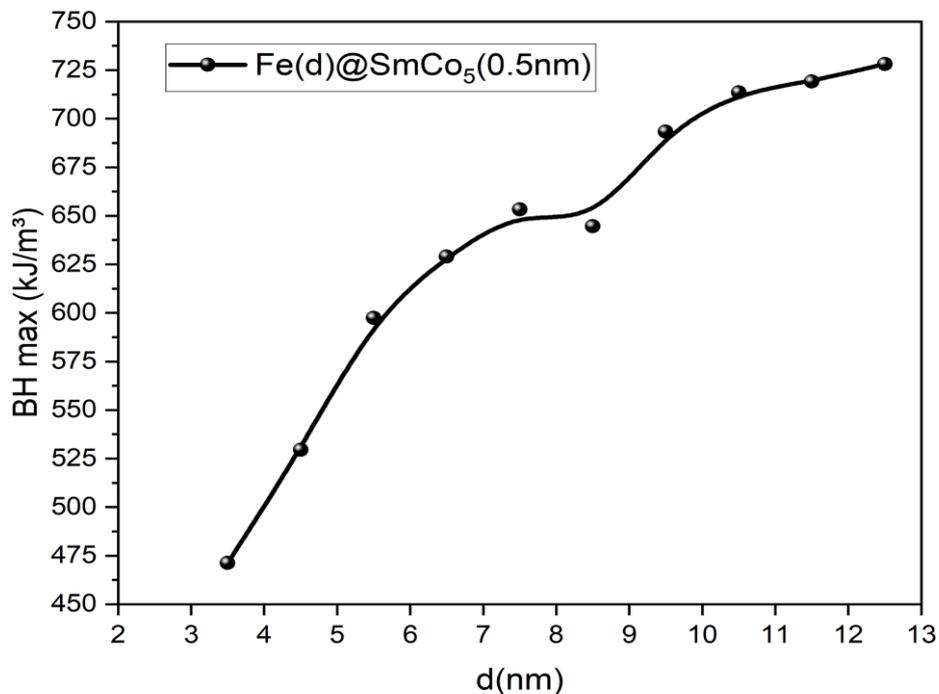
Como citado na estrutura de Fe@NdFeB na nanoestrutura de Fe@SmCo₅ em todas as dimensões analisadas nesta pesquisa, o $(BH)_{max}$ cresce à medida que a dimensão do núcleo cresce e a dimensão da casca diminui. Como por exemplo em uma nanoestrutura de Fe@SmCo₅ com núcleo de tamanho 12,5 nm e casca com tamanho de 1,5 nm, que possui $(BH)_{max}$ de 531,7 kJ/m^3 , já com a mesma dimensão do núcleo de 12,5 nm e agora com a casca maior de 3,5 nm o $(BH)_{max}$ decresce para 363,3 kJ/m^3 , uma diminuição de 31,6% no $(BH)_{max}$.

Em termos de comparação, em uma pesquisa que analisou o produto energético máximo de nanoestrutura de SmCo₅@Fe, que é uma combinação inversa da estudada nessa pesquisa, sendo que o comportamento apresentado nessa nanoestrutura foi de que à medida que as dimensões do núcleo de SmCo₅ aumentavam o $(BH)_{max}$ decrescia, o que é esperado, já que a magnetização de saturação é favorecida pelo valor elevado que Fe possui, e que está diretamente relacionada ao $(BH)_{max}$. Na pesquisa em questão o $(BH)_{max}$ elevado foi encontrado na nanoestrutura composta de SmCo₅(3,5 nm)@Fe(2,5 nm), apresentando $(BH)_{max}$ de 845,909 kJ/m^3 , valor consideravelmente elevado para ímãs permanentes, e comparado a mesma nanoestrutura só que partindo de um combinação inversa de Fe(3,5 nm)@SmCo₅(2,5 nm) apresentou $(BH)_{max}$ 260,3734 kJ/m^3 (OLIVEIRA et al., 2018). Desse modo a combinação inversa que é o foco desta pesquisa, onde ela possui núcleo magnético macio e casca com material magnético duro, possui comportamento magnético que está diretamente relacionado a dimensão do núcleo de Fe.

Vale salientar que em uma nanoestrutura de Fe(3,5 nm)@SmCo₅(1,5) possui $(BH)_{max}$ de 301,4043 kJ/m^3 , já na mesma nanoestrutura possuindo agora com as dimensões Fe(12,5 nm)@SmCo₅(1,5) possui $(BH)_{max}$ de 531,7426 kJ/m^3 , um aumento considerável de 76,42% no produto energético máximo, apresentando um comportamento altamente dependente do percentual volumétrico do Fe na nanoestrutura.

Com base nesse comportamento de que o $(BH)_{max}$ tem aumento à medida que o núcleo cresce atrelado com casca mais finas, foi analisado o $(BH)_{max}$ com aumento das dimensões do núcleo de 3,5 nm a 12,5 nm e com uma casca fixa de 0,5 nm, e como esperado foi observado um crescimento gradual, como demonstrado na Figura 20.

Figura 20- Produto energético máximo em nanopartícula de Fe@SmCo₅



Fonte: Autor, 2023.

Esse crescimento mostrado na Figura 20, parte de uma nanoestrutura de Fe@SmCo₅ com núcleo de dimensão 2,5 nm e casca com 0,5 nm, apresentando $(BH)_{max}$ de $479,4 \text{ kJ/m}^3$, já na mesma nanoestrutura agora com núcleo com dimensão de 12,5 nm e com casca de dimensão de 0,5 nm foi apresentado um $(BH)_{max}$ de $728,2 \text{ kJ/m}^3$, um aumento de 51,8%, um aumento elevado. Foi observado também que na passagem de dimensão de núcleo de diâmetro de 2,5 nm para 3,5 nm

ocorre uma diminuição no $(BH)_{max}$, como na passagem de diâmetro do núcleo de 7,5 nm para 8,5 nm.

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Com base na análise das duas nanopartículas esféricas de Fe@NdFeB e Fe@SmCo₅, constituídas de núcleo com material ferromagnético macio e casca com material ferromagnético duro, cujo núcleo D varia nas dimensões 3,5, 5,5 nm, 12,5 nm e 21,0 nm, e a casca δ varia nas dimensões 1,0 nm para o núcleo de 21,0 nm e 1,5 nm, 2,5 nm e 3,5 nm para as demais dimensões, apresentaram potencial em superar o limite teórico do $(BH)_{max}$, sendo esse fator uma peça chave na construção e evolução de ímãs permanentes de alta performance.

As duas nanopartículas analisadas apresentam comportamentos similares, onde o núcleo de Ferro impactou diretamente no $(BH)_{max}$ das duas nanoestruturas, à medida que as dimensões de núcleo eram aumentadas, o $(BH)_{max}$ também crescia. Ao analisar o mesmo tamanho de núcleo, e aumentar gradativamente o tamanho da casca de 0,5 nm até 3,5 nm, o $(BH)_{max}$ decresceu gradativamente, sendo assim os melhores resultados apresentados foram onde possuíam uma casca mais fina.

A partir desse crescimento gradual no $(BH)_{max}$ à medida que a dimensão do núcleo cresce atrelado com dimensão de casca menores, o produto energético máximo pode ser melhorado com núcleo de dimensões maiores em torno de 12,5 nm e com casca de dimensões menores em torno de 0,5 nm. Sendo que ao analisar o comportamento do produto energético máximo nas duas estruturas com dimensão de casca 0,5 nm o crescimento apresentado no produto energético máximo se mostra promissor em superar os limites dos ímãs atuais, levando em consideração o tamanho da casca.

A nanopartícula de Fe@NdFeB apresenta grande potencial em exibir $(BH)_{max}$ maiores devido a sua alta magnetização de saturação, já com núcleo de dimensão de 12,5 nm e com casca com dimensão de 0,5 nm apresentou $(BH)_{max}$ elevado de 816,5 kJ/m^3 , sendo um valor consideravelmente alto para ímãs permanentes.

Fundamentado nos resultados obtidos foi possível compreender o comportamento magnético dessas nanoestruturas, o que possibilita teoricamente analisar o comportamento do $(BH)_{max}$ com o tipo da composição da nanoestrutura, como também analisar o comportamento magnético em função das propriedades geométricas da estrutura, dos materiais magnéticos utilizados. E com isso o objetivo principal desta pesquisa foi alcançado.

Em termos de dificuldades encontradas nessa pesquisa, o tempo necessário para simular o $(BH)_{max}$ das nanoestruturas é um fator impactante, sendo que algumas nanoestruturas com dimensões de núcleo maiores, demandam de meses para serem concluídas, sendo que foi necessário um cuidado especial no controle do cronograma da pesquisa.

Com base na análise das nanoestruturas, o crescimento apresentado no $(BH)_{max}$ à medida que as dimensões do núcleo aumentam, é um ponto que deve ser analisado em pesquisas futuras, e que pode impactar na construção de ímãs permanentes de alta performance. E com base nos resultados as nanoestruturas possibilitam sim melhorias nesse fator impactante nos ímãs permanentes que é o produto energético máximo, o que abre novas opções de materiais magnéticos a serem analisados futuramente.

REFERÊNCIAS

BINNS, Chris. **Nanomagnetism: fundamentals and applications**. Oxford, Uk: Elsevier, 2014.

CALLISTER, W. D; RETHWISCH, D. G. **Ciência e engenharia de materiais: uma introdução**. 9. ed. Rio de Janeiro: Ltc, 2019. 912 p.

COEY, J. M. D. **Magnetism and Magnetic Materials**. [s.l.] Cambridge University Press, 2010.

COEY, J.M.D. **Perspective and Prospects for Rare Earth Permanent Magnets. Engineering**, [S.L.], v. 6, n. 2, p. 119-131, fev. 2020. Elsevier BV.

CROAT, J. J.; ORMEROD, J. **Modern Permanent Magnets**. [s.l.] Woodhead Publishing, 2022.

FERREIRA, F. A.; NASCIMENTO, M. **Terras raras: aplicações atuais e reciclagem**. Rio de Janeiro: CETEM/MCTI, 2013. (Série Tecnologia Mineral, 91).

FISCHBACHER, J. *et al.* Micromagnetics of rare-earth efficient permanent magnets. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 51, n. 19, p. 193002, 20 abr. 2018.

GIL, ANTÔNIO CARLOS. **Como elaborar projetos de pesquisa**. 4. ed. - São Paulo: Atlas, 2002.

GUIMARÃES, A. P. **Principles of Nanomagnetism**. Cham: Springer International Publishing, 2017.

J. PING LIU *et al.* **Nanoscale Magnetic Materials and Applications**. [s.l.] Springer Science & Business Media, 2010.

JILES, D. **Introduction to magnetism and magnetic materials**. [s.l.] CRC Press, 2017.

KRONMÜLLER, Helmut. **General Micromagnetic Theory and Applications**. Materials Science And Technology, [S.L.], p. 1-43, 9 mai 2019. Wiley.

LEITE, Vanessa Souza; FIGUEIREDO, Wagner. Determinação de curvas de histerese. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, [S.L.], v. 29, n. 1, p. 53-56, jun. 2007. FapUNIFESP (SciELO).

LI, D. *et al.* **FePt/Co core/shell nanoparticle-based anisotropic nanocomposites and their exchange spring behavior**. Nanoscale, v. 10, n. 8, p. 4061–4067, 2018.

LIU, J.P. Exchange-Coupled Nanocomposite Permanent Magnets. **Nanoscale Magnetic Materials And Applications**, [S.L.], p. 309-335, 2009. Springer US.

LIU, X. *et al.* **Oriented exchange-coupled L1₀-FePt/Co core-shell nanoparticles with variable Co thickness.** RSC Advances, v. 12, n. 12, p. 7568–7573, 2022.

LÓPEZ-ORTEGA, Alberto; ESTRADER, Marta; SALAZAR-ALVAREZ, German; ROCA, Alejandro G.; NOGUÉS, Josep. **Applications of exchange coupled bi-magnetic hard/soft and soft/hard magnetic core/shell nanoparticles.** Physics Reports, [S.L.], v. 553, p. 1-32, fev. 2015. Elsevier BV.

OLIVEIRA, Leonardo Linhares. **Nanoestruturas magnéticas do tipo núcleo-casca: um estudo do impacto do campo dipolar.** 2016. 142f. Tese (Doutorado em Física) - Centro de Ciências Exatas e da Terra, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2016.

OLIVEIRA, L. L. *et al.* **High-energy product SmCo₅@Fe core-shell nanoparticles.** Physical Review B, v. 97, n. 13, 16 abr. 2018.

PAPAEFTHYMIOU, G.C. **Nanomagnetism: An Interdisciplinary Approach** (1st ed.).2022. Chapman and Hall/CRC.

SAYAMA, J. *et al.* **Newly developed SmCo₅ thin film with perpendicular magnetic anisotropy.** Journal of Physics D: Applied Physics, v. 37, n. 1, p. L1–L4, 10 dez. 2003.

SOUZA, R. M. *et al.* **Energy product of cylindrical FePt@CoFe₂ and FePt@Fe nanoparticles.** AIP Advances, v. 9, n. 12, p. 125131, 1 dez. 2019.

ULBRICH, K.; HOLA, K.; ŠŮBR, V. *et al.* **Targeted Drug Delivery with Polymers and Magnetic Nanoparticles: Covalent and Noncovalent Approaches Release Control, and Clinical Studies.** Chem. Rev. 116, p. 5338-5431, 2016.

WU, L.; MENDOZA-GARCIA, A.; LI, Q. *et al.* **Organic Phase Syntheses of Magnetic Nanoparticles and Their Applications.** Chem. Rev. 116, p. 10473-10512, 2016.

ZHA, C. L.; DUMAS, R. K.; FANG, Y. Y.; BONANNI, V.; NOGUÉS, J.; ÅKERMAN, Johan. **Continuously graded anisotropy in single (Fe₅₃Pt₄₇)_{100-x}Cu_x films.** Applied Physics Letters, [S.L.], v. 97, n. 18, p. 182504, nov. 2010. AIP Publishing.

WESTMORELAND, S. C. *et al.* **Atomistic simulations of α -Fe/Nd₂Fe₁₄B magnetic core/shell nanocomposites with enhanced energy product for high temperature permanent magnet applications.** Journal of Applied Physics, v. 127, n. 13, p. 133901, 7 abr. 2020.