



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA E EXPERIMENTAL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

# **Nucleação de Vórtices em Nanoelementos Elípticos**

**Felipe Fávaro de Oliveira**

**Orientador: Prof. Dr. Artur da Silva Carriço**

**Co-orientadora Profa. Dra. Ana Lúcia Dantas**

Natal

2012

# Nucleação de Vórtices em Nanoelementos Elípticos

**Felipe Fávaro de Oliveira**

**Orientador: Prof. Dr. Artur da Silva Carriço**

**Co-orientadora Profa. Dra. Ana Lúcia Dantas**

Dissertação apresentada à Universidade  
Federal do Rio Grande do Norte como  
requisito parcial à obtenção do grau de  
Mestre em Física.

Natal

2012

# Agradecimentos

Primeiramente, à *minha família*, os grandes educadores e pilares da minha vida.

Especialmente à minha mãe *Carla Glade Fávaro*, sem a qual eu não seria ninguém e não estaria onde estou hoje.

À minha esposa *Alessandra Ferreira Moreira* e sua família, pessoas com corações iluminados.

Ao *Prof. Dr. Artur da Silva Carriço*, um verdadeiro mestre e um exemplo de vida e dedicação.

Aos *professores* do Departamento de Física da UFRN que contribuíram para a minha formação acadêmica neste mestrado.

Aos amigos do *grupo de magnetismo* da UFRN, UERN e colaboradores - o sucesso sempre depende de parcerias.

Aos meus amigos dos encontros de quarta e quinta feiras, em especial meus grandes

parceiros *Davi Marinho*, *Luiz Felipe Melo*, *Rafael Cordeiro*, *Felipe Matias*, *Raul Spindola*, *Bruno* e *André*, sem os quais eu não seria quem sou hoje - obrigado pela amizade que me fortalece!

Aos meus amigos do **departamento de Física** da UFRN **Edmilson Félix**, **Manilo Soares**, **Thiago Moura**, **Gracinha Dias**, **Cesar**, **Nathan**, **Ivan Alves** pela força e ajuda ao longo de toda minha pesquisa.

À CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro.

# Resumo

Este trabalho apresenta um estudo teórico sobre a nucleação de vórtices em nanoelementos elípticos de Ferro cujas dimensões dos eixos principal e secundário são da ordem de centenas de nanômetros. Ele será dividido em três etapas: primeiramente, um panorama geral e uma justificativa no interesse do estudo de nanosistemas e suas aplicações. Segundo, uma explicação da simulação computacional utilizada para os cálculos dos estados de remanência após a saturação em um campo externo com valor muito superior ao campo de exchange do material para nanoelementos acoplados e não-acoplados a um substrato antiferromagnético. Sistemas com eixos em tal ordem de grandeza e altura da ordem de grandeza do comprimento de troca do material possuem uma tendência natural à nucleação de fluxos fechados, como vórtices. Terceiro, daremos ênfase à nucleação de vórtices duplos, os principais tipos e as dimensões nos quais eles ocorrem (diagrama de fases) e os fatores que podem influenciar na nucleação e controle do estado remanente. Mostraremos que podemos controlar principalmente as distâncias entre os núcleos dos vórtices variando o valor do campo de acoplamento de interface. Finalmente, daremos uma expectativa de continuidade deste trabalho com objetivos e aplicações.

# Abstract

The present work reports a theoretical study of the vortex nucleation in elliptical nanoelements of iron with the dimensions of the principal and secondary axes in the range of hundreds of nanometers. It will be divided into three steps: first of all, a general panorama and a justification for the interest of the study of nanosystems and their applications. Second, a explanation about the computational simulations applied for the calculations of the remanent states after the saturation in a external field which value is grater then the exchange field of the material for nanoelements coupled or not to a antiferromagnetic substrate. Systems with that range of axes dimensions and height in the range of a few dozens of nanometers have a natural tendency to nucleate closed magnetic flux, like vortex. Third, we will emphasize the nucleation of double vortex, the main types and the dimensions in which they occur (phase diagram) and the factors that may influence in the nucleation and control of the remanent state. We shown that we can control specially the distance between the vortex cores changing the value of the interface field. Finally, we present a expectative of continuity of this work with objectives and applications.

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>iii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Simulações Micromagnéticas</b>	<b>5</b>
2.1 Introdução . . . . .	5
2.2 Histerese Magnética - Curvas de Magnetização . . . . .	6
2.3 Energias Envolvidas . . . . .	8
2.4 Energia Magnética por Célula . . . . .	10
2.4.1 Energia de Troca . . . . .	10
2.4.2 Energia Zeeman e Energia de Acoplamento na Interface . . . . .	16
2.4.3 Energia de Anisotropia . . . . .	17
2.4.4 Energia Dipolar . . . . .	18
2.5 Campo Médio Local . . . . .	19
2.5.1 Campo de Troca . . . . .	21
2.5.2 Campo Zeeman . . . . .	21
2.5.3 Campo de Troca na Interface . . . . .	21
2.5.4 Campo de Anisotropia . . . . .	22
2.5.5 Campo Dipolar . . . . .	23
2.5.6 Comprimento de Troca . . . . .	25

2.6	Método Autoconsistente . . . . .	26
<b>3</b>	<b>Nucleação de Vórtices Duplos em Nanoelementos de Ferro</b>	<b>28</b>
3.1	Memórias Magnéticas . . . . .	29
3.1.1	Memória de Disco Rígido . . . . .	29
3.1.2	MRAM - Memória Magnetoresistiva de Acesso Aleatório . . . . .	30
3.1.3	MTJ - Memórias de Junções Magnéticas de Tunelamento . . . . .	32
3.2	Tipos de Nucleações de Vórtices Duplos . . . . .	33
3.2.1	Introdução . . . . .	33
3.2.2	<b>VDV</b> - Vórtice-Domínio-Vórtice . . . . .	34
3.2.3	<b>VAV</b> - Vórtice-Antivórtice-Vórtice . . . . .	36
3.3	Fatores de Influência sobre Processos de Nucleação e Estados de Equilíbrio	38
3.3.1	Dimensões Físicas . . . . .	41
3.3.2	Campo de Interface . . . . .	42
3.3.3	Influência do Campo Dipolar na Configuração de Equilíbrio . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Conclusão</b>	<b>61</b>
<b>5</b>	<b>Expectativas Futuras</b>	<b>62</b>
5.1	Relaxação do Substrato Anti-ferromagnético . . . . .	62
5.2	Dinâmica da Magnetização - Nano-osciladores . . . . .	64
<b>A</b>	<b>Produção Bibliográfica</b>	<b>67</b>



# Lista de Figuras

1.1	Figura esquemática referente, de maneira geral, ao sistema abordado neste documento. . . . .	1
1.2	Exemplos de possíveis configurações magnéticas que podem ser vistas em materiais ferromagnéticos acoplados a um substrato antiferromagnético; representados pela letra (a), temos dois estados de magnetização uniforme, representados pela letra (b) temos circulações de magnetização (vórtices) e por fim, representado pela letra (c) temos um estado de duplo vórtice. . .	2
1.3	Figura esquemática que representa o sistema abordado neste documento. O campo externo $H$ é aplicado na direção do eixo menor, assim como a direção do campo de troca na interface $H_{int}$ entre os materiais Ferro/antiferromagnéticos. . . . .	4
2.1	Figura esquemática que representa uma estrutura cúbica de corpo centrado $bcc$ . . . . .	9
2.2	Figura esquemática da representação do conceito de células de simulação. O índice $i$ representa a célula na qual se quer conhecer os valores de energia, $j$ representa os vizinhos responsáveis pelo campo de troca sobre $i$ , enquanto $k$ representa os vizinhos que contribuem à energia dipolar da célula $i$ . . . .	20

2.3	Figura esquemática representando cada termo do campo local em determinada célula de simulação. O índice $i$ representa a célula na qual calculamos os campos, $j$ representa os vizinhos responsáveis pelo campo de troca sobre $i$ , enquanto $k$ representa os vizinhos que contribuem com a energia dipolar da célula $i$ . . . . .	24
3.1	Figura esquemática que representa o funcionamento de uma memória de disco rígido com gravação longitudinal. . . . .	29
3.2	Figura esquemática que representa o esquema de funcionamento de uma memória que utiliza o princípio da magnetoresistência gigante. . . . .	31
3.3	Gráfico referente à variação da resistência com relação às possíveis orientações da bicamada (neste caso, bicamadas de Fe/Cr) . . . . .	32
3.4	Figura referente à curva de magnetização com três estados de equilíbrio representados, um domínio uniforme, o início da nucleação e o estado remanente, de um nanoelemento circular de dimensões 57nm x 57nm x 33nm sem acoplamento com um substrato AF. A coloração no mapa representa a componente $z$ da magnetização, onde o vermelho significa no plano e o azul perpendicular ao plano. Os valores do campo externo estão representados em $kOe$ . . . . .	35

- 3.5 Figura referente à curva de magnetização com três estados de vórtice-domínio-vórtice representados, primeiramente temos o ponto anterior ao início da nucleação, segundo temos o início da nucleação do vórtice duplo e finalmente o estado de equilíbrio remanente de um nanoelemento elíptico de dimensões 135nm x 455nm x 25nm sem acoplamento com um substrato AF. A coloração no mapa representa a componente  $z$  da magnetização, onde o vermelho representa fora do plano, o verde no plano e o azul para dentro do plano da figura. Os valores do campo externo estão representados em  $kOe$ . . . . . 37
- 3.6 Figura referente aos estados ampliados da figura 3.5. . . . . 38
- 3.7 Figura referente à curva de magnetização com cinco estados de vórtice-antivórtice-vórtice representados, primeiramente temos o ponto anterior ao início da nucleação, segundo temos o início da nucleação com um vórtice único, terceiro temos o deslocamento deste vórtice, quarto temos o primórdio da nucleação de um VAV e finalmente o estado de equilíbrio remanente de um nanoelemento elíptico de dimensões 135nm x 445nm x 25nm sem acoplamento com um substrato AF. A coloração no mapa representa a componente  $z$  da magnetização, onde o vermelho representa fora do plano, o verde no plano e o azul para dentro do plano da figura. Os valores do campo externo estão representados em  $kOe$ . . . . . 39
- 3.8 Figura referente aos estados ampliados da figura 3.7. . . . . 40
- 3.9 Diagrama de fases referente ao estudo dos possíveis estados de remanência em nanoelementos elípticos de Ferro com altura de 25nm. Os valores na ordenada são referentes ao eixo menor e os valores na abcissa são referentes ao eixo maior da elipse (ambos em nm). Vale ressaltar que o campo externo é na direção do eixo menor. . . . . 43

- 3.10 Figura esquemática que representa dois nano-contatos com distâncias entre si  $r$  variável de forma a obtermos ou não a sincronia de suas oscilações. . . . 44
- 3.11 Resultados experimentais que representam em (a) o espectro de emissão de dois nano-contatos sem interações e (b) a redução súbita na largura de linha quando suas oscilações entram em sincronia. . . . . 45
- 3.12 Resultados experimentais sobre a potência emitida individualmente por dois nano-contatos. A partir da linha tracejada, temos a sincronização de suas oscilações, como demonstrado em (b) e (d) e o aumento relativo na potência emitida. . . . . 46
- 3.13 Figura referente ao estudo da influência do valor do acoplamento de interface em um nanoelemento de dimensões  $125nm \times 375nm \times 25nm$ ; em vermelho temos a distância entre o vórtice localizado na parte inferior ( $y < 0$ ) do nanoelemento e o antivórtice, em azul temos a distância entre o antivórtice e o vórtice localizado na parte superior ( $y > 0$ ) do nanoelemento. No gráfico inserido (pontos pretos) temos a distância entre os dois vórtices. A ordenada se refere às distâncias em nanômetros. . . . . 47
- 3.14 (a) Visão ampliada do centro do nanoelemento acoplado com campo de interface de  $0,5kOe$ . (b) Visão ampliada do centro do nanoelemento sem acoplamento. (c) Visão ampliada do centro do nanoelemento acoplado com campo de interface de  $-0,4kOe$ . . . . . 48
- 3.15 Figura esquemática do movimento referente à influência do campo de interface na nucleação de um VAV. . . . . 49
- 3.16 Figura referente às magnetizações de nanoelementos de dimensões  $125nm \times 375nm \times 25nm$ . Os valores dos campos de interface limites estão representados na legenda da figura, assim como os estados remanentes de cada curva estão representados em anexo. . . . . 50

- 3.17 Figura referente à variação da distância entre os vórtices na nucleação VDV em nanoelementos (azul)  $115nm \times 425nm \times 20nm$  e (vermelho)  $195nm \times 425nm \times 20nm$ . Os valores das distâncias estão em nanômetros e o campo de interface em  $kOe$ . . . . . 51
- 3.18 Figura referente às curvas de magnetização de um nano-elemento de dimensões  $195nm \times 425nm \times 20nm$ ; em preto temos a curva referente ao sistema sem acoplamento de interface, em vermelho com  $H_{int} = 2.0kOe$  e em azul com  $H_{int} = -2.0kOe$ . Ao lado temos (a) o estado de equilíbrio referente ao início da nucleação sem acoplamento e (b) o estado de equilíbrio em remanência. A coloração se refere à magnetização fora do plano e as distâncias se referem às distâncias entre os vórtices em nanômetros. . . . . 52
- 3.19 Representação das distâncias (a)(c) mínimas e (b)(d) máximas para nanoelementos de dimensões  $115nm \times 425nm \times 20nm$  e  $195nm \times 425nm \times 20nm$ , respectivamente. Em cada mapa temos a distância entre os vórtices escrita em nanômetros. Ao lado, temos um gráfico da magnetização no eixo z (com referência na magnetização de saturação) para os limites do campo de interface (ver coloração). . . . . 53
- 3.20 Figura referente ao (a) estado de equilíbrio e (b) ao mapa da configuração gerada pelo campo dipolar de um nano-elemento de dimensões  $115nm \times 305nm \times 25nm$ . No primeiro, a coloração se refere à magnetização fora do plano e no segundo se refere ao módulo do campo dipolar em unidades do programa de simulação. . . . . 55

- 3.21 Figura referente ao (a) estado de equilíbrio e (b) ao mapa da configuração gerada pelo campo dipolar de um nano-elemento de dimensões  $145nm \times 455nm \times 25nm$ . No primeiro, a coloração se refere à magnetização fora do plano e no segundo se refere ao módulo do campo dipolar em unidades do programa de simulação. . . . . 56
- 3.22 Figura referente ao (a) estado de equilíbrio e (b) ao mapa da configuração gerada pelo campo dipolar de um nano-elemento de dimensões  $115nm \times 385nm \times 25nm$ . No primeiro, a coloração se refere à magnetização fora do plano e no segundo se refere ao módulo do campo dipolar em unidades do programa de simulação. . . . . 58
- 3.23 Figura referente ao (a) estado de equilíbrio e (b) ao mapa da configuração gerada pelo campo dipolar de um nano-elemento de dimensões  $195nm \times 495nm \times 25nm$ . No primeiro, a coloração se refere à magnetização fora do plano e no segundo se refere ao módulo do campo dipolar em unidades do programa de simulação. . . . . 59
- 5.1 Imagens de contraste magnético (ver referência citada) adquiridas do Fe (a) e Mn (b) de energia de ressonância em discos com bicamadas de  $2\mu m$ . As imagens das bordas do Fe e Mn para discos de  $1\mu m$  de diâmetro são mostrados em (c) e (d), respectivamente. A seta indica a direção de propagação do feixe de raios-x. . . . . 63

# Capítulo 1

## Introdução

Elementos de materiais ferromagnéticos acoplados a um substrato antiferromagnético (como mostra a figura 1.1) são alvos de estudos em diversos grupos no mundo por seu importante uso em memórias magnéticas resistivas ou de tunelamento[1][2]. Como veremos mais adiante, diversos equipamentos atuais como memórias de disco rígido (sensores GMR), memórias magneto-resistivas, emissores de radiação microondas, dentre outros têm como base de funcionamento elementos ferromagnéticos estabilizados por um substrato antiferromagnético.

A configuração de equilíbrio da magnetização destes elementos ferromagnéticos pode assumir diversos formatos, como podemos ver em alguns exemplos representados na figura 1.2. Inicialmente, o objetivo deste estudo era obter uma configuração magnética

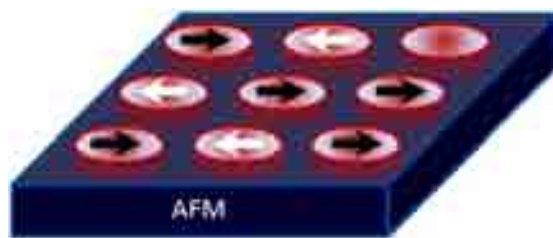


Figura 1.1: Figura esquemática referente, de maneira geral, ao sistema abordado neste documento.

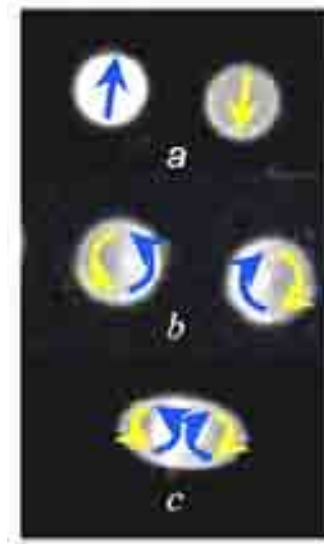


Figura 1.2: Exemplos de possíveis configurações magnéticas que podem ser vistas em materiais ferromagnéticos acoplados a um substrato antiferromagnético; representados pela letra (a), temos dois estados de magnetização uniforme, representados pela letra (b) temos circulações de magnetização (vórtices) e por fim, representado pela letra (c) temos um estado de duplo vórtice.

estável e com magnetização uniforme nestes sistemas (estados representados pela letra (a) na referente figura citada), isto devido ao forte impacto que o fenômeno da magnetoresistência gigante, desenvolvido simultaneamente por dois grupos distintos em 1989, um deles liderado por A. Fert[3] e outro liderado por P. Grünberg[4], teve no desenvolvimento de células de memória com configurações de magnetização uniforme podendo representar *bits* (unidade de gravação de informação) diferentes de acordo com a resistência elétrica desta unidade. Com os aprimoramentos dos estudos nesta área do conhecimento, novas aplicações como **emissores de radiação nanométricos**, conhecidos como nanosciladores, trouxeram a atenção para os estados não-uniformes da magnetização (como mostram as letras (b) e (c) na referente figura citada), conhecidos como **vórtices**. Estas aplicações serão abordadas em detalhes no capítulo 3 deste documento.

Atualmente, as prioridades destes estudos são o aumento na densidade de gravação



em memórias e a otimização na emissão de radiação nos nano-osciladores. O grande desafio em diminuirmos cada vez mais as dimensões dos elementos ferromagnéticos para tal finalidade é o **limite superparamagnético**. Para definirmos tal limite, primeiramente vamos introduzir uma grandeza chave neste estudo, conhecida como *tempo de relaxação* da magnetização (tempo necessário para que a magnetização uniforme do sistema inverta naturalmente seu sentido), dado por:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{KV}{k_B T}\right) \quad (1.1)$$

onde  $K$  é a constante de anisotropia,  $V$  é o volume da partícula ( $KV$  é a energia de anisotropia). O fator  $\tau_0$  é tomado da ordem de  $10^{-9}s$ . Vamos, por exemplo, supor que o tempo de medida da magnetização de um elemento ferromagnético cúbico de determinado experimento seja da ordem de segundos; para tanto, teremos  $E = KV = K.a^3$ , onde  $a$  é aresta do cristal. Temos, por fim,  $E \simeq 25k_B T$ . Isto significa que se a energia de anisotropia  $KV$  for aproximadamente 25 vezes maior do que a energia térmica do sistema, tal experimento cujos passos de medida necessitam de segundos medirá uma magnetização nula, como se o sistema perdesse suas características ferromagnéticas. Neste ponto, atingimos o limite superparamagnético de tal partícula.

Ao longo deste documento iremos estudar elementos elípticos de ferro com eixos maior e menor e altura da ordem de centenas de nanômetros acoplado a um substrato antiferromagnético com spins em direções fixas pré-determinadas, como mostra a figura esquemática 1.3. Nesta configuração, estes elementos possuem como estado de equilíbrio da magnetização *vórtices duplos*, os quais, como iremos mostrar posteriormente, são fortes candidatos na otimização dos nano-elementos. Mais especificamente, estamos interessados em obter uma ferramenta computacional de modelagem que nos forneça estados de equilíbrios de magnetização destes sistemas após a aplicação de um campo externo

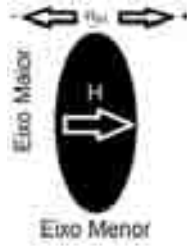


Figura 1.3: Figura esquemática que representa o sistema abordado neste documento. O campo externo  $H$  é aplicado na direção do eixo menor, assim como a direção do campo de troca na interface  $H_{int}$  entre os materiais Ferro/antiferromagnéticos.

com valor suficiente para saturar a amostra. A partir disto, iremos focar nossos estudos em duas direções: primeiramente, iremos estudar os fatores que controlam a distância entre dois vórtices duplos (são eles: dimensões físicas e campo de interface). Segundo, iremos analisar a contribuição do termo de energia dipolar na configuração magnética de equilíbrio, tópico de massiva importância na compreensão dos mecanismos de controle em nano-elementos ferromagnéticos.

# Capítulo 2

## Simulações Micromagnéticas

### 2.1 Introdução

Cientistas e historiadores ocidentais acreditam que foram os gregos, na província de Magnésia, que primeiro estudaram e refletiram sobre as propriedades de um mineral posteriormente chamado de *magnetita*, o qual apresentava em seu estado natural uma poderosa atração pelo ferro. Foram encontradas informações gregas escritas datadas de 800 anos a.C.. Porém, existem diversas controvérsias sobre tal descoberta, visto que existem ainda relatos chineses datados em 4000 anos a.C. que citam propriedades em um mineral que se parecem com as propriedades da magnetita[5].

Neste período na Grécia, existiam duas principais idéias sobre o novo fenômeno presente neste mineral; os defensores de uma das mais importantes escolas de Filosofia, os *Animistas*, colocavam tal propriedade de origem divina. Thales, Anaxagoras, dentre outros, acreditavam que tal "pedra" possuía uma alma. Os defensores da escola atomista tinham suas deduções baseadas em concepções gerais da metafísica, com pequenas relações com o que hoje nós considerariamos como *fatós*. Por exemplo, Diogenes, contemporâneo de Anaxagoras, dizia que existia umidade no ferro, com a qual a magnetita alimentava sua aridez. Um fato interessante é que foi Lucretius o primeiro a perceber que materiais

com características magnéticas também podiam se repelir.

Estas idéias permearam a humanidade durante séculos. Existem relatos de experimentos relacionados, por exemplo, à teoria de Diogenes feitos no séc. XVI por John Baptista Porta[6] tentando mostrar a validade de tal explicação através da humidade do ferro, pesando amostras dos minerais durante as interações. Seguiram-se muitos anos sem progresso em tal área, pois a pesquisa era limitada às considerações teológicas. Foi somente após o século XVI que experimentos, teorias e aplicações de tal fenômeno tomaram um rumo distinto, caminhando em direção aos conceitos hoje estabelecidos sobre o magnetismo dos materiais.

Uma vez que as *equações de Maxwell* estavam consolidadas nos permitindo conceitualmente separar causas e efeitos do magnetismo, o progresso tinha de ser estabelecido na tentativa de obter entendimento sobre as **fontes** de tal fenômeno. Um passo enorme na direção deste objetivo foi dado na proposta do elétron em 1897 em seu modelo atômico pelo inglês John Joseph Thomson - ele propôs o elétron, uma partícula fundamental com carga  $e = 1.602 \times 10^{-19}C$  e massa de repouso  $m = 9.11 \times 10^{-28}g$ .

Com a entrada do séc. XX, teorias clássicas abriram espaço para a mecânica quântica, fornecendo diversas descrições e modelos para o átomo. Atualmente, nos baseamos na *mecânica quântica* para explicarmos satisfatoriamente fenômenos relacionados ao magnetismo espontâneo de diversos materiais.

## 2.2 Histerese Magnética - Curvas de Magnetização

Inicialmente, definimos um gráfico cuja ordenada seria o valor de  $H$  (campo externo aplicado) e a abscissa seria o valor da magnetização média por unidade de volume (geralmente tomando a magnetização de saturação da amostra  $M_S$  como referência) como a *curva de magnetização* de um determinado sistema. O fenômeno da histerese magnética pode

ser considerado como uma *impressão digital*, experimentalmente falando, do ferromagnetismo. A variedade de formatos de histereses é uma consequência direta das diversas possibilidades de estruturas magnéticas nucleadas.

Estas estruturas são resultado do balanço de uma competição entre diversas energias (cada um destes termos serão discutidos individualmente neste mesmo capítulo): a energia de troca ou *exchange energy* (resultado da interação de cada spin com sua vizinhança próxima), a qual favorece uma configuração de magnetização uniforme; a energia de troca entre os materiais F e AF, se o sistema magnético estiver acoplado à um substrato (energia restrita à interface do domínio), a qual favorece uma configuração de magnetização antiparalela à direção dos spins do AF; a anisotropia magnética (energia intrínseca do sistema), a qual favorece uma configuração de magnetização alinhada com determinado eixo favorável, chamado de *eixo de anisotropia*; a energia Zeeman (resultado da interação entre o sistema magnético e o campo magnético externo aplicado), a qual favorece o alinhamento da magnetização com a direção do campo externo; por fim, a energia magnetostática ou dipolar (resultado da interação entre os dipolos magnéticos que compõem o sistema), a qual favorece uma configuração magnética cuja principal tendência é a redução da carga dipolar no sistema.

Através da aplicação de um campo externo com um valor alto, o sistema se torna magnetizado uniformemente na direção deste (dizemos que o sistema está *saturado*), o que nos fornece como estado magnético de equilíbrio um grande domínio uniforme que ocupa todo o espaço do nano-elemento. A medida que o campo externo diminui seu valor, configurações de magnetização que se adequam aos outros termos de energia são formadas. Quando ocorre a inversão do campo com valores altos, um grande domínio uniforme se apresenta na direção oposta ao domínio inicial. Fato é que no fenômeno da *histerese magnética*, quando temos a aplicação de um campo cíclico, a curva de magnetização de retorno não segue o mesmo caminho da curva de magnetização inicial.

Um dos focos deste trabalho é o estudo da configuração magnética de nanoelementos em um ponto específico da curva de magnetização, a **remanência**. Este é o ponto que representa a configuração magnética resultante no sistema após a aplicação de um campo com valor elevado e a sua remoção (medida da magnetização em  $H = 0$ ).

## 2.3 Energias Envolvidas

Vamos agora descrever o modelo utilizado na formulação do algoritmo utilizado para calcular os resultados reportados neste documento sobre configurações de equilíbrio em nano-elementos elípticos de ferro, uma abordagem através da **energia** magnética do elemento. Determinamos *configuração de equilíbrio* a estrutura formada que tem sua energia total minimizada, ou seja, que os momentos magnéticos em todos os pontos da estrutura apontem na direção do campo magnético efetivo local, constituindo desta maneira um *torque* nulo na magnetização local.

Em um volume  $d^3$  de um material cristalino com uma estrutura cúbica de corpo centrado (*bcc*, Body Centered Cubic - representada na figura 2.1), temos o número de átomos  $N$  expresso pela equação:

$$N = 2 \left( \frac{d^3}{a_0^3} \right) \quad (2.1)$$

Na qual  $a_0$  é chamado de *parâmetro de rede* do material magnético em questão - o valor da aresta do cubo da estrutura *bcc*. A divisão  $\frac{d^3}{a_0^3}$  nos fornece o número de **células unitárias** em determinado volume; levando em conta que a célula desta estrutura cúbica apresenta um átomo em cada um dos seus 8 vértices e um átomo central, sabemos que cada átomo de um vértice também pertence a 7 outras células vizinhas, assim o número de átomos por célula (e a razão do fator 2 na equação 2.1) vale dois.

Imagine, por exemplo, um cristal cúbico de ferro de aresta igual a  $d = 120nm$ ; o

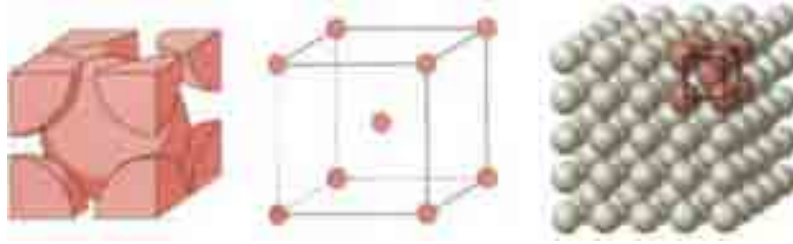


Figura 2.1: Figura esquemática que representa uma estrutura cúbica de corpo centrado *bcc*.

parâmetro de rede para o ferro vale  $a_0^{Fe} = 0,287nm$ [7]. Este cristal possui, de acordo com a equação 2.1, 146.193.493 átomos. Um número nesta ordem de grandeza tornaria qualquer simulação computacional sobre cada átomo de um sistema nanométrico inviável, ainda mais levando em conta que quanto maior o cristal, maior será o número de átomos que o compõem (crescimento com expoente cúbico).

Para facilitar o cálculo computacional sobre configurações magnéticas em sistemas cujo número de átomos é muito grande como o descrito no exemplo anterior, vamos introduzir o conceito de **célula de simulação**. Em 1907, Weiss postulou que materiais ferromagnéticos podem ser subdivididos em regiões, chamadas de *domínios magnéticos*. Em cada um deles, o grau de alinhamento dos momentos magnéticos atômicos é conduzido por um campo magnético molecular, o que nos leva à ideia de uma *célula*, onde podemos assumir a direção da magnetização como sendo a média da magnetização atômica. O parâmetro que controlará o tamanho desta célula é o *comprimento de troca*, que será estudado mais adiante neste capítulo.

Tomaremos a célula de simulação utilizada em nossos trabalhos computacionais como um cubo de aresta  $d$ . Cada uma destas células terá seus termos de energias magnéticas tratados cuidadosamente.

Consideremos um sistema de  $i$  átomos e volume  $V$ , cujas direções dos momentos magnéticos são representadas pelos versores  $\hat{s}_i$ . A energia total deste sistema é dada por:

$$\begin{aligned}
E = & - J_e \sum_i \sum_j \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \vec{H} \cdot M_S V \sum_i \vec{s}_i \\
& - \vec{H}_{INT} \cdot M_S V \sum_i \vec{s}_i - \frac{KV}{2} \sum_i (s_i^z)^2 \\
& + \frac{M_S^2 V}{2} \sum_i \sum_k \left( \frac{\vec{s}_i \cdot \vec{s}_k}{r_{ik}^3} - \frac{3(\vec{s}_i \cdot \vec{r}_{ik})(\vec{s}_k \cdot \vec{r}_{ik})}{r_{ik}^5} \right)
\end{aligned} \tag{2.2}$$

onde os termos representam, respectivamente: a *energia de troca*, onde  $J_e$  é a integral de troca entre dois átomos  $i$  e  $j$ ; a *energia Zeeman*, tendo  $H$  como o valor do campo externo,  $M_s$  como a magnetização de saturação e  $V$  o volume do sistema; a *energia de troca entre os materiais  $F$  (restrita à interface) e  $AF$* , representada por um campo magnético de interface  $H_{int}$ ; a *anisotropia cristalina*, onde  $K$  é a constante de anisotropia; a *energia dipolar*, onde  $r_{ik}$  é a distância entre os  $i$ -ésimo e  $k$ -ésimo átomos. Vale ressaltarmos que os somatórios em  $j$  se restringem à vizinhança próxima do átomo em questão  $i$ . Já os somatórios em  $k$  representam todos os átomos componentes do sistema.

Um dos objetivos deste capítulo é reescrevermos a equação 2.2 em função de um sistema de células cúbicas de arestas  $d$ . Cada unidade desta terá um número  $N'$  de átomos indicado pela equação 2.1. Esta transformação é encontrada na literatura em [9].

## 2.4 Energia Magnética por Célula

### 2.4.1 Energia de Troca

Classicamente, a energia de troca (*exchange energy*) de um determinado átomo  $i$  com sua vizinhança próxima  $j$  é dada por:

$$H_e = - \sum_j 2J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \tag{2.3}$$



Se a integral de troca é isotrópica, ou seja, possui as mesmas propriedades físicas independentemente da direção considerada, e igual a  $J_e$ , teremos:

$$H_e = -2J_e \sum_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.4)$$

A energia total do sistema é dada pela soma da equação anterior sobre todos os átomos  $i$ , assim:

$$H_e = -2J_e \sum_i \sum_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.5)$$

Em determinados problemas, especialmente em simulações de configurações magnéticas como o do presente trabalho, faz-se apropriado considerarmos os operadores de spin,  $\vec{S}$ , da equação 2.4 como vetores clássicos. Assim, tal equação poderá ser reescrita na forma:

$$H_e = -2J_e S^2 \sum_j \cos \phi_{i,j} \quad (2.6)$$

onde  $\phi_{ij}$  é o ângulo entre as direções dos vetores clássicos de momento angular de spin; e ainda:

$$\cos \phi_{i,j} = \hat{u}_i \cdot \hat{u}_j = \alpha_{1i}\alpha_{1j} + \alpha_{2i}\alpha_{2j} + \alpha_{3i}\alpha_{3j} \quad (2.7)$$

sabendo que  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  e  $\alpha_3$  são os co-senos diretores de um vetor unitário em relação aos eixos  $x$ ,  $y$ , e  $z$ , respectivamente.

Ao assumirmos que o ângulo entre os dois vetores unitários  $\hat{u}_i$  e  $\hat{u}_j$  é muito pequeno, podemos expandir os cossenos diretores de  $\hat{u}_j$  através de uma série de Taylor em função

dos cossenos diretores de  $\hat{u}_i$ . Vamos expandir, por exemplo, o primeiro termo da equação 2.7:

$$\alpha_{1i}\alpha_{1j} = \alpha_{1i} \left( \alpha_{1i} + \vec{r}_{i,j} \cdot \nabla \alpha_{1i} + \frac{1}{2} (\vec{r}_{i,j} \cdot \nabla \alpha_{1i})^2 \alpha_{1i} + \dots \right) \quad (2.8)$$

Com o objetivo de obtermos uma equação equivalente à 2.5, somaremos esta expressão sobre os vizinhos próximos  $j$ .

$$\sum_j \alpha_{1i}\alpha_{1j} = \alpha_{1i}^2 + \alpha_{1i} \sum_j (\vec{r}_{i,j} \cdot \nabla \alpha_{1i}) + \frac{1}{2} \alpha_{1i} \sum_j (\vec{r}_{i,j} \cdot \nabla \alpha_{1i})^2 \alpha_{1i} + \dots$$

Para uma célula cúbica, termos como  $\sum_j \vec{r}_{i,j} \cdot \nabla \alpha_{1i}$  e termos cruzados oriundos de  $\sum_j 1/2(\vec{r}_{i,j} \cdot \nabla \alpha_{1i})^2$ , como  $\sum x_{i,j}y_{i,j}(\partial^2 \alpha_{i,j}/\partial x_{i,j}\partial y_{i,j})$  são nulos por conta da simetria.

Temos, portanto:

$$\alpha_{1i}\alpha_{1j} = \alpha_{1i}^2 + \frac{1}{2} \alpha_{1i} \left( x_{ij}^2 \frac{\partial^2 \alpha_{1i}}{\partial x_{ij}^2} + y_{ij}^2 \frac{\partial^2 \alpha_{1i}}{\partial y_{ij}^2} + z_{ij}^2 \frac{\partial^2 \alpha_{1i}}{\partial z_{ij}^2} \right) + \dots$$

Por fim, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \sum_j \cos \phi_{i,j} &= (\alpha_{1i}^2 + \alpha_{2i}^2 + \alpha_{3i}^2) + \frac{1}{2} \alpha_{1i} \frac{\partial^2 \alpha_{1i}}{\partial x_{ij}^2} \sum_j x_{i,j}^2 + \frac{1}{2} \alpha_{1i} \frac{\partial^2 \alpha_{1i}}{\partial y_{ij}^2} \sum_j y_{i,j}^2 + \frac{1}{2} \alpha_{1i} \frac{\partial^2 \alpha_{1i}}{\partial z_{ij}^2} \sum_j z_{i,j}^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha_{2i} \frac{\partial^2 \alpha_{2i}}{\partial x_{ij}^2} \sum_j x_{i,j}^2 + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_j \cos \phi_{i,j} &= z + \frac{1}{2} \alpha_{1i} \frac{\partial^2 \alpha_{1i}}{\partial x_{ij}^2} \sum_j x_{i,j}^2 + \frac{1}{2} \alpha_{1i} \frac{\partial^2 \alpha_{1i}}{\partial y_{ij}^2} \sum_j y_{i,j}^2 + \frac{1}{2} \alpha_{1i} \frac{\partial^2 \alpha_{1i}}{\partial z_{ij}^2} \sum_j z_{i,j}^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha_{2i} \frac{\partial^2 \alpha_{2i}}{\partial x_{ij}^2} \sum_j x_{i,j}^2 + \dots \end{aligned}$$

Sendo possível ainda escrevermos  $\sum_j x_{i,j}^2 = \sum_j y_{i,j}^2 = \sum_j z_{i,j}^2 = \frac{1}{3} \sum_j r_{i,j}^2$ , teremos:

$$\sum_j \cos \phi_{i,j} = z + \frac{1}{6} \sum_j r_{i,j}^2 \hat{u} \cdot \nabla^2 \hat{u} \quad (2.9)$$

Ao considerarmos apenas a parte variável da energia em 2.9, excluindo o termo definido  $z$ , a expressão da energia de troca será:

$$E_e = -\frac{J_e S^2}{3} \sum_j r_{i,j}^2 \hat{u} \cdot \nabla^2 \hat{u} \quad (2.10)$$

Com o auxílio da identidade vetorial

$$\begin{aligned} \nabla^2(\hat{u} \cdot \hat{u}) &= 2[(\nabla\alpha_1)^2 + (\nabla\alpha_2)^2 + (\nabla\alpha_3)^2] + 2(\hat{u} \cdot \nabla^2 \hat{u}) \\ &= 0 \end{aligned}$$

a equação 2.10 poderá ser escrita como:

$$E_e = \frac{J_e S^2}{3} \sum_j r_{i,j}^2 [(\nabla\alpha_1)^2 + (\nabla\alpha_2)^2 + (\nabla\alpha_3)^2] \quad (2.11)$$

Para uma estrutura cúbica, simples, de corpo centrado ou face centrada, podemos escrever a expressão  $\sum_j r_{i,j}^2 = 6a^2$ . Portanto, temos finalmente uma expressão para a energia de troca em função dos cossenos diretores representando a direção dos vetores clássicos da magnetização:

$$E_e = 2J_e S^2 a^2 [(\nabla\alpha_1)^2 + (\nabla\alpha_2)^2 + (\nabla\alpha_3)^2] \quad (2.12)$$

levando em conta um cubo de aresta  $a$ . Podemos também escrever a energia por unidade de volume:

$$\frac{E}{a^3} = A[(\nabla\alpha_1)^2 + (\nabla\alpha_2)^2 + (\nabla\alpha_3)^2] \quad (2.13)$$

Definindo o parâmetro  $A$  para uma célula bcc:

$$A = \frac{2J_e S^2}{a} \quad (2.14)$$

conhecido na literatura[9] como *rigidez de troca* (ou *exchange stiffness*).

### Energia de Troca para Simulações Micromagnéticas

Vamos considerar agora uma pequena partícula cúbica de aresta  $\delta$  como célula de simulação. A energia por unidade de volume é a mesma representada pela equação 2.13:

$$\begin{aligned} \frac{E}{\delta^3} = A \sum_{mnk} & \left[ \left( \frac{\partial\alpha_{1,m,n,k}}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial\alpha_{2,m,n,k}}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial\alpha_{3,m,n,k}}{\partial x} \right)^2 \right. \\ & + \left( \frac{\partial\alpha_{1,m,n,k}}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial\alpha_{2,m,n,k}}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial\alpha_{3,m,n,k}}{\partial y} \right)^2 \\ & \left. + \left( \frac{\partial\alpha_{1,m,n,k}}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial\alpha_{2,m,n,k}}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial\alpha_{3,m,n,k}}{\partial z} \right)^2 \right] \end{aligned}$$

Vamos reescrever tal equação considerando a definição de derivada em função do limite onde  $\delta$  é pequeno; calculando cada parte separadamente:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial\alpha_{1,m,n,k}}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial\alpha_{2,m,n,k}}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial\alpha_{3,m,n,k}}{\partial x} \right)^2 &= \left( \frac{\alpha_{1(m+1),n,k} - \alpha_{1m,n,k}}{\delta} \right)^2 \\ &+ \left( \frac{\alpha_{2(m+1),n,k} - \alpha_{2m,n,k}}{\delta} \right)^2 + \left( \frac{\alpha_{3(m+1),n,k} - \alpha_{3m,n,k}}{\delta} \right)^2 \end{aligned}$$

$$\left( \frac{\partial\alpha_{1,m,n,k}}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial\alpha_{2,m,n,k}}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial\alpha_{3,m,n,k}}{\partial y} \right)^2 = \left( \frac{\alpha_{1m,(n+1),k} - \alpha_{1m,n,k}}{\delta} \right)^2$$

$$\begin{aligned}
 & + \left( \frac{\alpha_{2_{m,(n+1),k}} - \alpha_{2_{m,n,k}}}{\delta} \right)^2 + \left( \frac{\alpha_{3_{m,(n+1),k}} - \alpha_{3_{m,n,k}}}{\delta} \right)^2 \\
 & \left( \frac{\partial \alpha_{1_{m,n,k}}}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial \alpha_{2_{m,n,k}}}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial \alpha_{3_{m,n,k}}}{\partial z} \right)^2 = \left( \frac{\alpha_{1_{m,n,(k+1)}} - \alpha_{1_{m,n,k}}}{\delta} \right)^2 \\
 & + \left( \frac{\alpha_{2_{m,n,(k+1)}} - \alpha_{2_{m,n,k}}}{\delta} \right)^2 + \left( \frac{\alpha_{3_{m,n,(k+1)}} - \alpha_{3_{m,n,k}}}{\delta} \right)^2
 \end{aligned}$$

Teremos, portanto:

$$\begin{aligned}
 \left( \frac{\partial \alpha_{1_{m,n,k}}}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \alpha_{2_{m,n,k}}}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial \alpha_{3_{m,n,k}}}{\partial x} \right)^2 &= \frac{1}{\delta^2} \left[ \left( \alpha_{1_{(m+1),n,k}}^2 + \alpha_{1_{m,n,k}}^2 - 2\alpha_{1_{(m+1),n,k}} \alpha_{1_{m,n,k}} \right) \right. \\
 & \left. + \left( \alpha_{2_{(m+1),n,k}}^2 + \alpha_{2_{m,n,k}}^2 - 2\alpha_{2_{(m+1),n,k}} \alpha_{2_{m,n,k}} \right) + \left( \alpha_{3_{(m+1),n,k}}^2 + \alpha_{3_{m,n,k}}^2 - 2\alpha_{3_{(m+1),n,k}} \alpha_{3_{m,n,k}} \right) \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \left( \frac{\partial \alpha_{1_{m,n,k}}}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial \alpha_{2_{m,n,k}}}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial \alpha_{3_{m,n,k}}}{\partial y} \right)^2 &= \frac{1}{\delta^2} \left[ \left( \alpha_{1_{m,(n+1),k}}^2 + \alpha_{1_{m,n,k}}^2 - 2\alpha_{1_{m,(n+1),k}} \alpha_{1_{m,n,k}} \right) \right. \\
 & \left. + \left( \alpha_{2_{m,(n+1),k}}^2 + \alpha_{2_{m,n,k}}^2 - 2\alpha_{2_{m,(n+1),k}} \alpha_{2_{m,n,k}} \right) + \left( \alpha_{3_{m,(n+1),k}}^2 + \alpha_{3_{m,n,k}}^2 - 2\alpha_{3_{m,(n+1),k}} \alpha_{3_{m,n,k}} \right) \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \left( \frac{\partial \alpha_{1_{m,n,k}}}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial \alpha_{2_{m,n,k}}}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial \alpha_{3_{m,n,k}}}{\partial z} \right)^2 &= \frac{1}{\delta^2} \left[ \left( \alpha_{1_{m,n,(k+1)}}^2 + \alpha_{1_{m,n,k}}^2 - 2\alpha_{1_{m,n,(k+1)}} \alpha_{1_{m,n,k}} \right) \right. \\
 & \left. + \left( \alpha_{2_{m,n,(k+1)}}^2 + \alpha_{2_{m,n,k}}^2 - 2\alpha_{2_{m,n,(k+1)}} \alpha_{2_{m,n,k}} \right) + \left( \alpha_{3_{m,n,(k+1)}}^2 + \alpha_{3_{m,n,k}}^2 - 2\alpha_{3_{m,n,(k+1)}} \alpha_{3_{m,n,k}} \right) \right]
 \end{aligned}$$

Ao somarmos as três equações acima, podemos reescrever, sabendo que a soma dos termos positivos (módulos dos versores que representam os cossenos diretores) é igual a 6, a equação 2.13 na forma:

$$\begin{aligned}
 \frac{E}{\delta^3} = \frac{2A}{\delta^2} \sum_{m,n,k} \left[ 3 - \alpha_{1_{(m+1),n,k}} \alpha_{1_{m,n,k}} - \alpha_{2_{(m+1),n,k}} \alpha_{2_{m,n,k}} - \alpha_{3_{(m+1),n,k}} \alpha_{3_{m,n,k}} \right. \\
 - \alpha_{1_{m,(n+1),k}} \alpha_{1_{m,n,k}} - \alpha_{2_{m,(n+1),k}} \alpha_{2_{m,n,k}} - \alpha_{3_{m,(n+1),k}} \alpha_{3_{m,n,k}} \\
 \left. - \alpha_{1_{m,n,(k+1)}} \alpha_{1_{m,n,k}} - \alpha_{2_{m,n,(k+1)}} \alpha_{2_{m,n,k}} - \alpha_{3_{m,n,(k+1)}} \alpha_{3_{m,n,k}} \right] \quad (2.15)
 \end{aligned}$$

O que nos leva à:

$$\frac{E}{\delta^3} = \frac{2A}{\delta^2} \sum_{mnk} \left[ \begin{aligned} &3 - \hat{\mu}_{(m+1),n,k} \cdot \hat{\mu}_{m,n,k} \\ &\quad - \hat{\mu}_{m,(n+1),k} \cdot \hat{\mu}_{m,n,k} \\ &\quad - \hat{\mu}_{m,n,(k+1)} \cdot \hat{\mu}_{m,n,k} \end{aligned} \right]$$

$$\frac{E}{\delta^3} = \frac{2A}{\delta^2} \sum_{mnk} \left[ \begin{aligned} &1 - \hat{\mu}_{(m+1),n,k} \cdot \hat{\mu}_{m,n,k} + \\ &\quad 1 - \hat{\mu}_{m,(n+1),k} \cdot \hat{\mu}_{m,n,k} + \\ &\quad 1 - \hat{\mu}_{m,n,(k+1)} \cdot \hat{\mu}_{m,n,k} \end{aligned} \right]$$

Por fim, a energia de troca por unidade de volume entre células cúbicas de lado  $\delta$  será:

$$\frac{E_{exc}}{\delta^3} = \frac{A}{\delta^2} \sum_{i,j} \left[ 1 - \hat{\mu}_i \cdot \hat{\mu}_j \right] \quad (2.16)$$

De forma que a soma sobre o índice  $i$  representa a energia total de um sistema com  $i$  células cúbicas sobre sua vizinhança próxima  $j$ .

### 2.4.2 Energia Zeeman e Energia de Acoplamento na Interface

Quando aplicamos um campo externo sobre um sistema magnético, a energia correspondente à interação entre os spins do material e o campo magnético é chamada de *energia Zeeman*. Ela é mínima quando as direções do campo externo e da magnetização estão alinhadas.

Em sistemas ferromagnéticos acoplados à substratos antiferromagnéticos (*exchange bias*), existe uma energia de troca entre os spins do material F e AF, a qual se restringe apenas à camada da interface do material ferromagnético.

Levando em conta a idéia de célula de simulação, consideraremos que as energias Zeeman e de Acoplamento por unidade de volume são independentes da dimensão da célula  $d$ ; para um sistema completo, somaremos tais termos célula por célula, nos fornecendo:

$$\frac{1}{d^3} (E_{zeeman} + E_{int}^{z=1}) = -\vec{H} \cdot M_S \sum_i \hat{m}_i - \vec{H}_{int} \cdot M_S \sum_i \hat{m}_i^{z=1} \quad (2.17)$$

na qual  $H_{int}$  é o campo na interface (o índice  $z = 1$  indica a região onde este campo atua, apenas na primeira camada do material F).

### 2.4.3 Energia de Anisotropia

Até o momento, todos os termos de energia vistos são *isotrópicos*, ou seja, independem da orientação adotada como referencial no sistema. Se todas as energias tivessem esta característica, a magnetização total sempre se anularia com campo magnético externo nulo. Entretanto, materiais magnéticos reais não são isotrópicos, possuindo um eixo privilegiado de magnetização. Este eixo é chamado de **eixo de anisotropia** e a energia associada à este fator é chamada de **energia de anisotropia**, originada basicamente nas interações dos spins e órbitas dos elétrons[10] - estas órbitas estão relacionadas à estrutura cristalográfica do material e, através de tais interações, fazem a magnetização possuir uma preferência no alinhamento com determinados eixos cristalográficos. Portanto, existem direções espaciais nas quais o material se magnetiza mais facilmente do que em outras.

Esta energia é geralmente pequena se comparada com a energia de troca, mas a direção da magnetização é determinada apenas pela anisotropia, pois o *exchange* tenta apenas alinhar os spins do material paralelamente uns aos outros, sem direções preferenciais.

Em termos do ângulo entre a magnetização e o eixo de anisotropia,  $\theta$ , tal energia pode ser expressada como:

$$E_a = KV \text{sen}^2\theta \quad (2.18)$$

Onde  $K$  é a constante de anisotropia (a qual varia para cada material). Para nos concentrarmos em células de simulação com volume  $d^3$ , a energia de anisotropia por unidade de volume será:

$$\frac{E_a}{d^3} = K \text{sen}^2\theta \quad (2.19)$$

#### 2.4.4 Energia Dipolar

Outra contribuição energética é oriunda da *energia dipolar* ou *energia magnetostática*, a qual tem origem nas interações clássicas entre os dipolos magnéticos intrínsecos dos átomos. Ela é dada pela equação:

$$E_{dip} = \frac{M_S^2 V^2}{2} \sum_i \sum_k \left( \frac{\vec{s}_i \cdot \vec{s}_k}{r_{ik}^3} - \frac{3(\vec{s}_i \cdot \vec{r}_{ik})(\vec{s}_k \cdot \vec{r}_{ik})}{r_{ik}^5} \right)$$

Onde o vetor  $\vec{r}_{ik}$  representa a distância entre dois átomos  $i$  e  $k$  do material (e seus respectivos momentos magnéticos). Para implantarmos o conceito de célula de simulação, tal distância deverá ser reescrita em função da aresta  $d$  da unidade cúbica: teremos  $\vec{r} = d\vec{n}$ , onde  $\vec{n}$  é um vetor adimensional que representa a direção referente à distância entre duas células de simulação.

A equação acima poderá ser, então, reescrita na forma:

$$E_{dip} = \frac{M_S^2 V^2}{2d^3} \sum_i \sum_k \left( \frac{\vec{s}_i \cdot \vec{s}_k}{n_{ik}^3} - \frac{3(\vec{s}_i \cdot \vec{n}_{ik})(\vec{s}_k \cdot \vec{n}_{ik})}{n_{ik}^5} \right)$$

Neste caso,  $i$  representa a célula onde a energia estará sendo somada (este índice admite valores maiores do que um e menores do que o número de células de simulação que



compõem o sistema) e  $k$  seus vizinhos que contribuirão para a energia dipolar sobre a célula  $i$ . O fator 2 é adicionado à equação para corrigir a possível soma dupla sobre duas posições  $i$  e  $k$  que comutem.

A figura 2.2[7] nos fornece uma representação do conceito de célula de simulação utilizado neste trabalho. A energia dipolar por unidade de volume será dada por:

$$\frac{E_{dip}}{d^3} = \frac{M_S^2}{2} \sum_i \sum_k \left( \frac{\vec{s}_i \cdot \vec{s}_k}{n_{ik}^3} - \frac{3(\vec{s}_i \cdot \vec{n}_{ik})(\vec{s}_k \cdot \vec{n}_{ik})}{n_{ik}^5} \right)$$

Agora, tendo conhecimento sobre todos os termos de energia (por unidade de volume) que contribuem para determinar a estrutura magnética de um sistema acoplado, podemos escrever a energia total por unidade de volume como:

$$\begin{aligned} E_T = & \frac{A}{d^2} \sum_j \sum_k (1 - \hat{m}_j \cdot \hat{m}_k) - M_S \vec{H}_I \cdot \sum_i \hat{m}_i - \\ & M_S \vec{H} \cdot \sum_j \hat{m}_j - K \sum_j (m_j^x)^2 + \\ & \frac{M_S^2}{2} \sum_i \sum_k \left( \frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_k}{n_{ik}^3} - \frac{3(\hat{m}_i \cdot \hat{n}_{ik})(\hat{m}_k \cdot \hat{n}_{ik})}{n_{ik}^5} \right) \end{aligned} \quad (2.20)$$

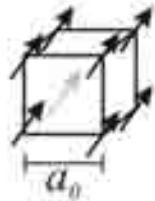
## 2.5 Campo Médio Local

O campo local em determinada célula de simulação  $i$  é dado pelo gradiente da energia calculada desta com respeito à direção (versor) de seu momento magnético, ou seja:

$$\vec{H}_i^p = -\frac{1}{M_S} \frac{\partial E_T}{\partial \hat{m}_i^p} \quad (2.21)$$

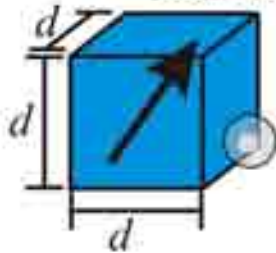
Onde os índices  $p$  e  $i$  indicam, respectivamente, as direções cartesianas (x, y e z) e a célula de simulação onde o campo médio estará sendo calculado. Assim como fizemos com os cálculos das energias em cada célula, iremos tratar de cada termo do campo local médio separadamente, utilizando sempre como referência a equação 2.20.

### Célula Cristalina



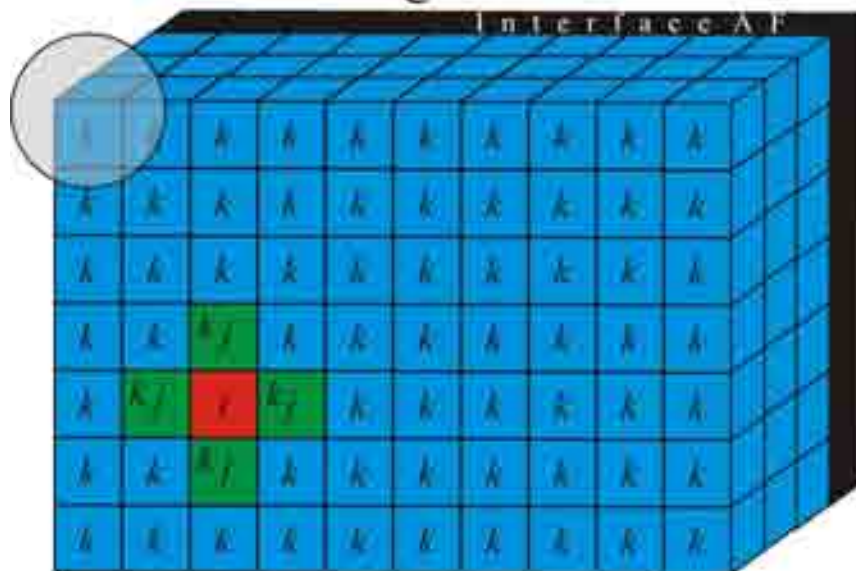
- 1) Parâmetro de rede  $a_0$  da ordem de ångstrons;
- 2) Energias escritas em termos de átomos ;
- 3) 2 átomos por célula  $bcc$  ;

### Célula de Simulação



- 1) Parâmetro  $d$  da ordem de alguns nanômetros ;
- 2) Energias escritas em termos do volume da célula ;
- 3) Milhares de átomos por célula ;

### Sistema Magnético



- 1) Dimensões de centenas de nanômetros;
- 2) Energias escritas em termos de células unitárias;

Figura 2.2: Figura esquemática da representação do conceito de células de simulação. O índice  $i$  representa a célula na qual se quer conhecer os valores de energia,  $j$  representa os vizinhos responsáveis pelo campo de troca sobre  $i$ , enquanto  $k$  representa os vizinhos que contribuem à energia dipolar da célula  $i$ .

### 2.5.1 Campo de Troca

Utilizando o primeiro termo em 2.20, o campo referente à energia de troca que atuará em determinada célula de simulação  $i$  na direção  $p$  será:

$$\begin{aligned}
 \vec{H}_{i\ exc}^p &= -\frac{1}{M_S} \frac{\partial}{\partial \hat{m}_i^p} E_e \\
 \vec{H}_{i\ exc}^p &= -\frac{1}{M_S} \frac{\partial}{\partial \hat{m}_i^p} \left[ \frac{A}{d^2} \sum_j \left( 1 - \hat{m}_i^p \cdot \hat{m}_j \right) \right] \\
 \vec{H}_{i\ exc}^p &= \frac{A}{M_S d^2} \sum_j \hat{m}_j^p
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

Onde a soma sobre o índice  $j$  indica a vizinhança mais próxima da célula  $i$  considerada. Para o caso do modelo tridimensional tratado neste trabalho, existem até *seis* células vizinhas que contribuem para o campo de troca local na célula  $i$  (observe os índices representados na figura 2.2[7]).

### 2.5.2 Campo Zeeman

Podemos escrever a derivada para o campo local Zeeman como:

$$\begin{aligned}
 \vec{H}_{i\ Zeeman}^p &= -\frac{1}{M_S} \frac{\partial}{\partial \hat{m}_i^p} \left[ -\vec{H} \cdot M_S \sum_i \hat{m}_i^p \right] \\
 \vec{H}_{i\ Zeeman}^p &= \vec{H}
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

O que nos mostra que o termo do campo médio local referente à energia de interação Zeeman é o próprio valor do campo magnético externo aplicado sobre o sistema (considerando este como uma constante).

### 2.5.3 Campo de Troca na Interface

Vamos representar o campo local referente à esta energia em uma célula de simulação  $i$  como  $H_{int}$  que, como já citado anteriormente, é restrito às células que compõem apenas

a primeira camada do material ferromagnético. A derivada pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}\vec{H}_{i\ int}^{p\ z=1} &= -\frac{1}{M_S} \frac{\partial}{\partial \hat{m}_i^p} \left[ -\vec{H}_{i\ int}^i \cdot M_S \sum_i \hat{m}_i^p \right] \\ \vec{H}_{i\ int}^{p\ z=1} &= \vec{H}_{i\ int}^i\end{aligned}\quad (2.24)$$

note que o campo local de acoplamento também é uma constante que se restringe apenas à camada de interface ( $z = 1$ ).

### 2.5.4 Campo de Anisotropia

Baseando-se no fato dito que a energia de anisotropia possui seu mínimo quando a magnetização do sistema possui a mesma direção do eixo de anisotropia, podemos afirmar que o campo local de anisotropia possui valores máximos quando a magnetização de cada célula está alinhada com tal eixo. Consideremos neste trabalho que o eixo de anisotropia está na direção do eixo cartesiano  $x$ , a mesma direção de aplicação do campo magnético externo (fato que nos fornece facilmente vórtices duplos como estados remanentes em nano-elementos elípticos de ferro alongados na direção  $y$ ). Este termo será calculado pela expressão:

$$\begin{aligned}\vec{H}_{i\ anis}^p &= -\frac{1}{M_S} \frac{\partial}{\partial \hat{m}_i^p} \left[ -K m^{x2} \right] \\ \vec{H}_{i\ anis}^p &= \frac{2K}{M_S} \hat{m}^x\end{aligned}\quad (2.25)$$

tal campo é bastante conhecido na literatura sobre estado sólido, pois indica o valor do campo externo que deve ser aplicado para que haja uma reversão na direção da magnetização de determinado sistema.

### 2.5.5 Campo Dipolar

A energia magnetostática é considerada de longo alcance; cada célula de simulação  $i$  recebe uma contribuição dipolar energética de cada outra célula  $k$  que compõem o sistema magnético. Levando em conta que sua direção e sentido não são triviais assim como os outros campos abordados nesta seção, vamos calcular cada direção  $p$  do campo dipolar local separadamente.

Primeiramente, consideremos a direção  $p = x$ , o que nos fornece:

$$\begin{aligned} \vec{H}_{i \text{ dip}}^x &= -M_S \frac{\partial}{\partial \hat{m}_i^x} \sum_k \left( \frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_k}{n_{ik}^3} - \frac{3(\hat{m}_i \cdot \vec{n}_{ik})(\hat{m}_k \cdot \vec{n}_{ik})}{n_{ik}^5} \right) \\ \vec{H}_{i \text{ dip}}^x &= M_S \frac{\partial}{\partial \hat{m}_i^x} \sum_k \left( \frac{3(m_i^x n_{ik}^x + m_i^y n_{ik}^y + m_i^z n_{ik}^z)(m_k^x n_{ik}^x + m_k^y n_{ik}^y + m_k^z n_{ik}^z)}{n_{ik}^5} \right) \\ &\quad - M_S \frac{\partial}{\partial \hat{m}_i^x} \sum_k \left( \frac{m_i^x m_k^x + m_i^y m_k^y + m_i^z m_k^z}{n_{ik}^3} \right) \end{aligned}$$

Portanto, o campo dipolar local na direção  $x$  será dado por:

$$\vec{H}_{i \text{ dip}}^x = M_S \sum_k \left( \frac{3n_{ik}^x (m_k^x n_{ik}^x + m_k^y n_{ik}^y + m_k^z n_{ik}^z)}{n_{ik}^5} - \frac{m_k^x}{n_{ik}^3} \right) \quad (2.26)$$

analogamente, podemos escrever as componentes  $y$  e  $z$  deste campo como:

$$\vec{H}_{i \text{ dip}}^y = M_S \sum_k \left( \frac{3n_{ik}^y (m_k^x n_{ik}^x + m_k^y n_{ik}^y + m_k^z n_{ik}^z)}{n_{ik}^5} - \frac{m_k^y}{n_{ik}^3} \right) \quad (2.27)$$

$$\vec{H}_{i \text{ dip}}^z = M_S \sum_k \left( \frac{3n_{ik}^z (m_k^x n_{ik}^x + m_k^y n_{ik}^y + m_k^z n_{ik}^z)}{n_{ik}^5} - \frac{m_k^z}{n_{ik}^3} \right) \quad (2.28)$$

a figura 2.3[7] nos fornece uma representação esquemática do perfil de ação de cada campo local calculado nestas seções anteriores. Desta forma, possuímos uma descrição completa e suficiente para o cálculo de estruturas magnéticas de equilíbrio em nanoelementos.

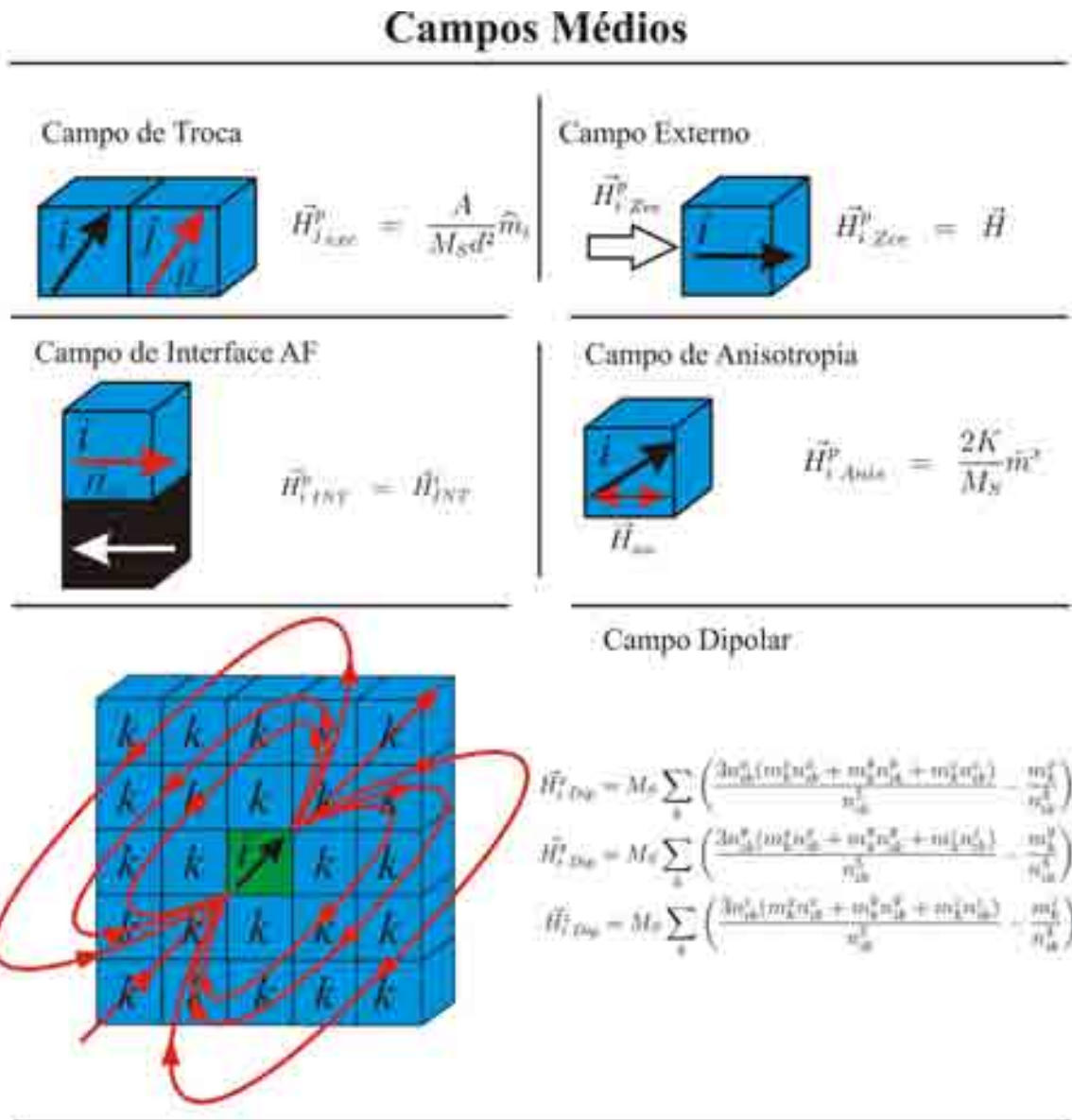


Figura 2.3: Figura esquemática representando cada termo do campo local em determinada célula de simulação. O índice  $i$  representa a célula na qual calculamos os campos,  $j$  representa os vizinhos responsáveis pelo campo de troca sobre  $i$ , enquanto  $k$  representa os vizinhos que contribuem com a energia dipolar da célula  $i$ .

Observe a tabela 2.1, a qual nos fornece valores úteis na configuração de uma simulação sobre nanoelementos de ferro (valores retirados em [11][12]).

Tabela 2.1: Parâmetros magnéticos do ferro.

	Fe
$M_S(A/m)$	$1,7 \times 10^6$
$A(J/m)$	$2,5 \times 10^{-11}$
$H_{EXC}(T) = A/M_S d^2$	$14,7/d_{nm}^2$
$K(J/m^3)$	$4,7 \times 10^4$
$H_{anis} = 2K/M_S(10^4 G)$	0,055

### 2.5.6 Comprimento de Troca

Podemos expressar o comprimento de troca por[13]:

$$l_{exc} = \sqrt{\frac{A}{K}}$$

Onde  $A$  é a constante de exchange e  $K$  a constante de anisotropia. Para materiais dipolares, a expressão que melhor representa tal grandeza é:

$$l_{exc} = \sqrt{\frac{2A}{M_S^2}} \quad (2.29)$$

Para o Ferro, o valor do comprimento de troca é 11,2 nm[14].

Em uma simulação micromagnética que utiliza células cúbicas de arestas  $d$ , esta deve ser menor do que o comprimento de troca. A razão para isto é que desta maneira a magnetização atômica dos componentes desta célula não sofre grandes alterações dentro

do volume  $d^3$ , o que nos permite fazer uma *magnetização atômica média* que representa todos os componentes dentro do volume da célula de simulação.

## 2.6 Método Autoconsistente

Como explicado anteriormente, o método empregado neste trabalho se refere à simulações de estruturas magnéticas de equilíbrio em nanoelementos de ferro; este é baseado no cálculo do torque entre a magnetização de cada célula de simulação e o campo médio local - ocorrerá um mínimo de energia quando estes dois vetores estiverem alinhados, com determinada tolerância de cálculo pré-estabelecida.

O *método autoconsistente* empregado em nosso algoritmo pode ser subdividido em algumas etapas:

1. Inicializarmos o sistema com uma determinada configuração magnética (ver explicação abaixo).
2. Calcularmos o campo médio local sobre cada célula de simulação.
3. Em posse deste valor, calculamos o *torque* entre o vetor de magnetização da célula em questão e o vetor campo médio local.
4. Se este torque for menor do que a tolerância pré-estabelecida ( $10^{-26} J$  para nosso sistema), a configuração é dita uma *configuração de equilíbrio* para tal célula de simulação.
5. Se este torque for maior do que tal tolerância, o momento magnético da célula é alinhado com o vetor campo médio calculado no referente passo e voltamos para o item 2. Tal processo é repetido até que o torque seja menor que a tolerância (item 4) ou se extrapole um número máximo pré-estabelecido de interações caso o sistema não convirja.



Para fazermos a curva de magnetização, este processo é realizado para diversos valores de campo magnético externo, onde para cada um destes valores o método auto-consistente é inicializado com o estado magnético correspondente ao estado de equilíbrio do valor anterior do campo externo. O primeiro estado corresponde a um valor alto de campo externo, com o qual esperamos um estado magnético saturado na direção deste.

## Capítulo 3

# Nucleação de Vórtices Duplos em Nanoelementos de Ferro

Como já citado anteriormente, o estudo dos possíveis estados magnéticos em elementos de Ferro (e outros componentes como a liga Permaloy) acoplados à um substrato antiferromagnético está atualmente em evidência[15]. Com o avanço nas técnicas de fabricação, o estudo teórico assume um papel importante na simulação, compreensão e construção de um modelo que represente o comportamento magnético de partículas sub-micrométricas individuais ou um conjunto interagente destas. Se a ordem de grandeza das dimensões destas partículas for suficientemente pequena, então suas propriedades magnéticas podem diferenciar-se substancialmente das propriedades magnéticas do material macroscópico em si. A publicação contínua nesta área do conhecimento nos mostra que o magnetismo nanométrico não está completamente compreendido.

Vamos agora a uma breve explicação sobre os tipos de memórias magnéticas no intuito de reforçar a importância geral do presente tema.

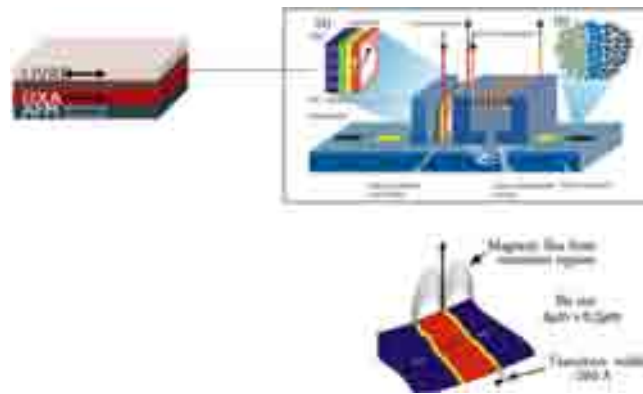


Figura 3.1: Figura esquemática que representa o funcionamento de uma memória de disco rígido com gravação longitudinal.

## 3.1 Memórias Magnéticas

### 3.1.1 Memória de Disco Rígido

Desde o fim do século passado até a atualidade, o principal tipo de memória utilizado nos computadores comuns (*desktops*) são *memórias de disco rígido*, nas quais as informações são armazenadas em discos magnéticos. Na figura 3.1 temos uma representação esquemática do funcionamento deste tipo de memória; no disco, temos os sítios magnéticos cujas orientações são definidas como os *bits* zero ou um, dependendo da orientação de sua magnetização; na cabeça de leitura e gravação temos bobinas que geram campos magnéticos por indução cujas intensidades variam de acordo com a intenção - para gravação, este campo deve possuir um valor alto, a fim de alterar o estado magnético do sítio-alvo; já para leitura, este campo deve possuir um valor baixo, de forma que tal estado se mantenha após a leitura. Vale ressaltar o fato que mesmo após o corte do fornecimento de energia ao computador, as informações gravadas neste tipo de memória não são perdidas.

Durante o tempo de inicialização de um computador que utiliza tal memória, os dados necessários são carregados a partir do disco rígido para as memórias do sistema, as quais

necessitam de uma fonte de energia constante (não gravam informações permanentemente) para manter seus estados de memória. Este processo de leitura que depende do trabalho mecânico do braço que contém a cabeça de leitura e gravação é relativamente lento, algo em torno de milhares de vezes mais lento do que o processamento interno da memória do sistema, o que torna tais computadores lentos, por exemplo, ao abrirmos um aplicativo.

### 3.1.2 MRAM - Memória Magnetoresistiva de Acesso Aleatório

Na tentativa de reduzir o tempo de processamento e leitura de dados perdido mecanicamente pelo braço utilizado na memória explicada anteriormente, um novo tipo de memória foi desenvolvido nas últimas décadas: a *memória magnetoresistiva de acesso aleatório* ou simplesmente *MRAM*. A unidade é composta basicamente por um filme ferromagnético GMR (*giant magneto-resistance*; em português, *magneto-resistência gigante*) onde uma das camadas possui magnetização com direção fixa através de um acoplamento F/AF, conhecida como camada de referência, e outra camada pode mudar a direção de sua magnetização sob determinadas circunstâncias. Quando reduzimos as dimensões deste filme GMR para sub-microns, o elemento passa a exibir estados de resistência binários[16], sem nenhum outro estado intermediário, o que favorece uma aplicação em memórias que utilizam a resistência elétrica como referente no armazenamento de informações.

A célula de memória baseada neste princípio de funcionamento é composta (ver a figura esquemática 3.2) de um elemento GMR, com as características definidas acima, e fios metálicos em direções ortogonais, de forma que as correntes elétricas conduzidas por estes sejam capazes de alterar, através do campo magnético gerado por elas, a direção da magnetização da camada livre do filme e também realizar a leitura da informação gravada; em geral, estas direções são referentes à camada fixa. O dado armazenado é então lido através da resistência elétrica do elemento - valores binários grande e pequeno serão ditos *bits* do sistema. A figura 3.3 nos fornece a variação da resistência em relação às possíveis

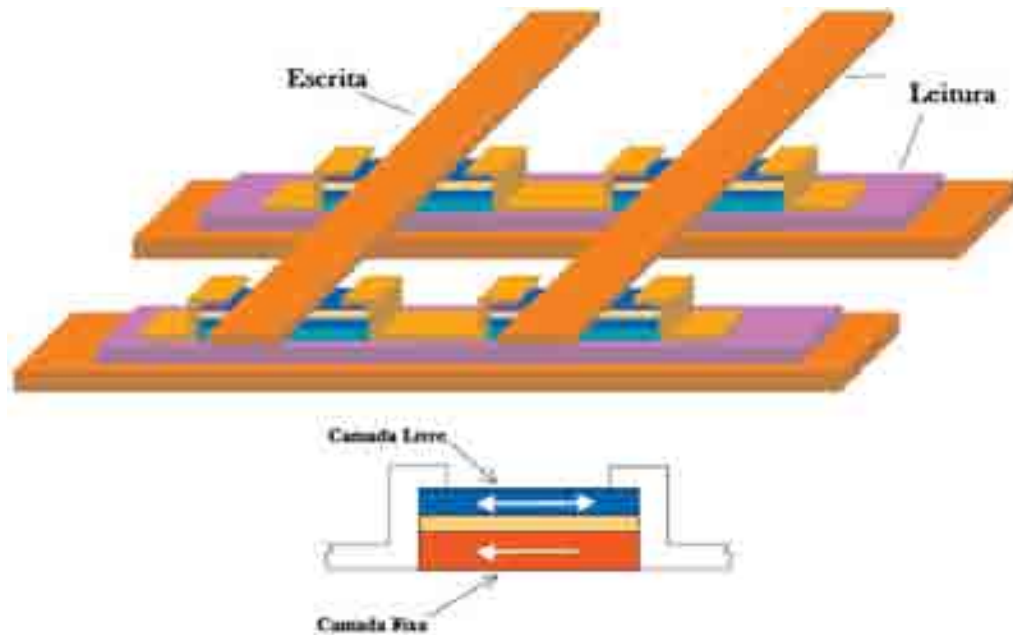


Figura 3.2: Figura esquemática que representa o esquema de funcionamento de uma memória que utiliza o princípio da magnetoresistência gigante.

orientações assumidas pelas camadas em uma estrutura GMR. Vale ressaltar que não é necessário o fornecimento constante de energia elétrica para o equipamento para que a informação seja mantida ao longo do tempo.

Entretanto, este tipo de memória apresenta uma série de inconvenientes às suas aplicações. Podemos encontrar na literatura [16] exemplos; um deles seria o fato destes dispositivos não conseguirem fornecer um sinal-retorno suficiente de leitura, pois possuem uma baixa resistência no filme metálico, da ordem de dezenas de  $\frac{\mu\Omega}{sq}$ . Para obtermos um sinal com intensidade suficiente para ser interpretado por um sensor de circuito, a corrente de leitura deve ser na faixa de dezenas de miliamperes - portanto, temos uma disparidade (de ordem  $10^3$ ) nas impedâncias relativas da memória e dos dispositivos de leitura.

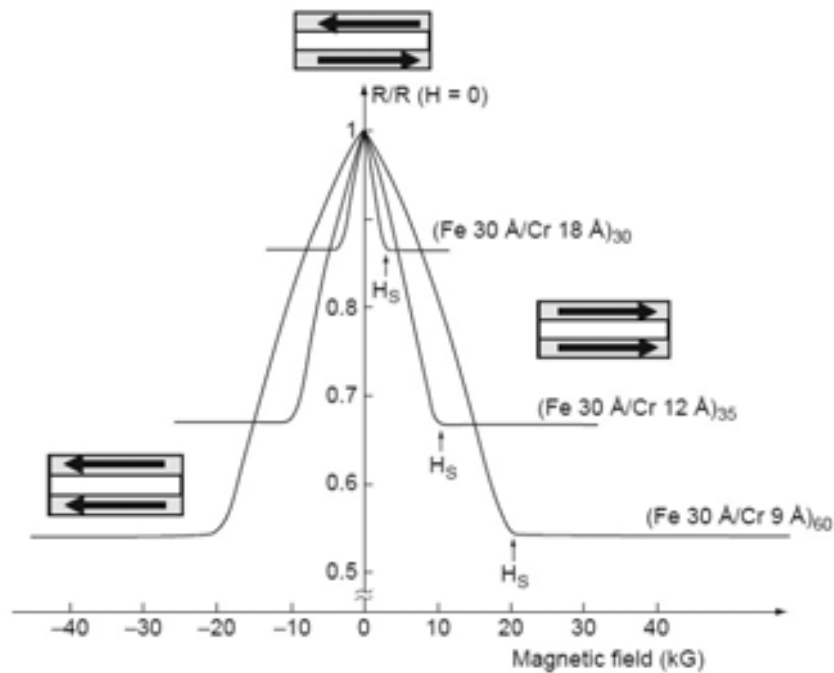


Figura 3.3: Gráfico referente à variação da resistência com relação às possíveis orientações da bicamada (neste caso, bicamadas de Fe/Cr)

### 3.1.3 MTJ - Memórias de Junções Magnéticas de Tunelamento

Nestes tipos de memória os dados são armazenados de maneira semelhante à descrita no item anterior, ou seja, existe uma camada com magnetização de direção fixa e uma camada livre. Para estes dispositivos, as correntes de leitura e escrita de informações passam **através** das células, ocorrendo o fenômeno de tunelamento da corrente quando esta encontra o isolante que separa as camadas magnéticas.

O formato de construção destas células é semelhante ao das células GMR, mas a passagem da corrente através do elemento nos fornece uma vantagem - a resistência de elementos MTJ é na faixa de *kohms*, muito superior à resistência exibida pela MRAM, o que elimina o problema da disparidade da impedância.

Existem outros formatos de memória que também utilizam ferromagnetos sub-micrométricos como componentes, como a *memória magnetoresistiva vertical de acesso*

*aleatório*[17], o que nos leva a afirmar que os estudos e principalmente a modelagem das possíveis configurações magnéticas de tais elementos possuem grande relevância tanto para o universo acadêmico quanto para a indústria atual.

## 3.2 Tipos de Nucleações de Vórtices Duplos

### 3.2.1 Introdução

Inicialmente, vamos introduzir uma explanação sobre este peculiar estado magnético - o **vórtice**. Tomando como base de observação a figura 3.4, podemos citar algumas características do processo de nucleação deste estado magnético. Na figura citada, a ordenada corresponde ao percentual da magnetização líquida em cada passo (com relação à magnetização de saturação  $M_S$  do nanoelemento) e a abscissa corresponde ao valor do campo externo aplicado em kOe.

Primeiramente, como dito na seção que retrata o *método autoconsistente* utilizado para a realização das simulações presentes neste trabalho, o processo é iniciado com um valor alto do campo magnético externo, suficientemente grande para saturar o elemento praticamente por completo, como representado no estado uniforme da figura 3.4. Após a redução periódica do valor do campo externo (neste caso, com passos no valor de  $100Oe$ ) percebemos uma pequena redução no valor da magnetização líquida na direção do campo externo, em torno de 22 por cento, até que com o valor do campo externo igual a  $2,2kOe$ , referente ao primeiro estado com fluxo fechado de magnetização representado na figura, existe uma queda brusca no valor de tal magnetização, desde 76 por cento de saturação até 43 por cento - este ponto representa o início da nucleação conhecida como **vórtice**. Esta redução brusca é uma impressão digital de tal estado magnético, nos permitindo identificar vórtices, de maneira geral, apenas observando sua curva de magnetização. A medida que o campo externo reduz seu valor, o vórtice se desloca em direção ao centro

do sistema, até que atingimos a remanência.

O valor da magnetização no eixo  $z$  está representado pela coloração no mapa - perceba que na configuração de equilíbrio em remanência existe uma região onde o valor da magnetização na direção  $z$  é acentuada; esta área chamaremos de *núcleo do vórtice* ou *vortex core*. Temos ainda as definições de *quiralidade* e *polaridade*, as quais representam, respectivamente, o sentido (horário ou anti-horário) da rotação da magnetização do vórtice e a direção da magnetização fora do plano - chamaremos de polaridade positiva se tal magnetização for para fora da figura e negativa se for para dentro da figura.

Vamos agora introduzir os dois tipos de nucleação de vórtices duplos que serão abordados neste trabalho e apresentar uma análise sobre os processos de nucleação de cada tipo, comparando tais resultados com o processo relatado acima para um único vórtice.

### 3.2.2 VDV - Vórtice-Domínio-Vórtice

Vamos tomar como base de observação a figura 3.5. Nesta, temos a curva de magnetização de um nanoelemento elíptico de Ferro com dimensões de 135nm x 455nm x 25nm sem acoplamento de interface; existem três estados de equilíbrio representados (a, b, c) - para melhor visualização, veja estes estados ampliados na figura 3.6; vamos tratar de cada um separadamente.

#### Análise do Processo de Nucleação de um VDV

Primeiramente, temos a configuração representada pela letra (a). A esta denominamos *S-domain* ou *domínio em S*. Tal estado precede a nucleação dos vórtices que, como dito anteriormente, é caracterizada pela queda brusca na magnetização líquida do sistema na direção do campo externo. Prosseguindo, temos o estado representado pela letra (b) - neste já podemos observar o início da nucleação de um vórtice duplo com quiralidades opostas separados por uma pequena região uniforme na direção oposta ao campo magnético



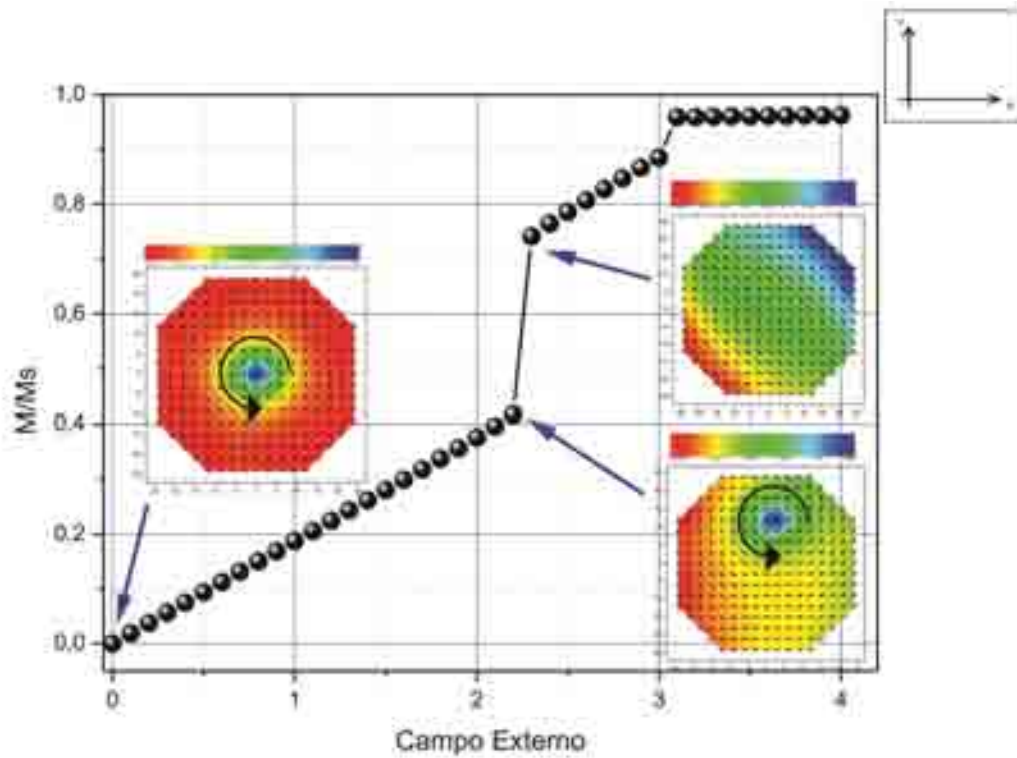


Figura 3.4: Figura referente à curva de magnetização com três estados de equilíbrio representados, um domínio uniforme, o início da nucleação e o estado remanente, de um nanoelemento circular de dimensões 57nm x 57nm x 33nm sem acoplamento com um substrato AF. A coloração no mapa representa a componente  $z$  da magnetização, onde o vermelho significa no plano e o azul perpendicular ao plano. Os valores do campo externo estão representados em  $kOe$ .

externo. A medida que o valor do campo externo diminui, estes dois vórtices vão se afastando um do outro e o conjunto se desloca em direção ao centro do nanoelemento.

Finalmente em remanência, estado representado pela letra (c), podemos ver claramente um grande domínio centrado em forma de um *diamante*, separando dois vórtices com quiralidades opostas e, neste caso, com polaridades opostas.

Podemos notar que o processo de nucleação deste tipo de par de vórtices se assemelha com o processo de nucleação descrito para um único vórtice, onde a característica marcante é uma única queda brusca no valor da magnetização, a qual ocorre com o campo externo no valor de  $1,8kOe$  para este caso.

### 3.2.3 VAV - Vórtice-Antivórtice-Vórtice

Vamos tomar como base de observação a figura 3.7. Nesta, temos a curva de magnetização de um nanoelemento elíptico de Ferro com dimensões de  $135nm \times 445nm \times 25nm$  sem acoplamento de interface; existem cinco estados de equilíbrio representados (a, b, c, d, e) - para uma melhor visualização, veja estes estados ampliados na figura 3.8; vamos tratar de cada um separadamente.

#### Análise do Processo de Nucleação de um VAV

Primeiramente temos o estado anterior ao início da nucleação, representado pela letra (a) - o estado *S-domain*. Posterior a este, marcado com a letra (b), observamos uma leve queda na magnetização líquida do sistema e percebemos que esta representa a nucleação de um vórtice único deslocado na parte superior do nanoelemento. No próximo ponto marcado (c), percebemos um deslocamento do núcleo do vórtice de aproximadamente  $90nm$  na direção do centro do nanoelemento, até que no próximo passo na curva de magnetização, representado pela letra (d), com o valor do campo externo de  $200Oe$ , ocorre outra queda brusca no valor da magnetização líquida; temos, então, a nucleação de dois vórtices com

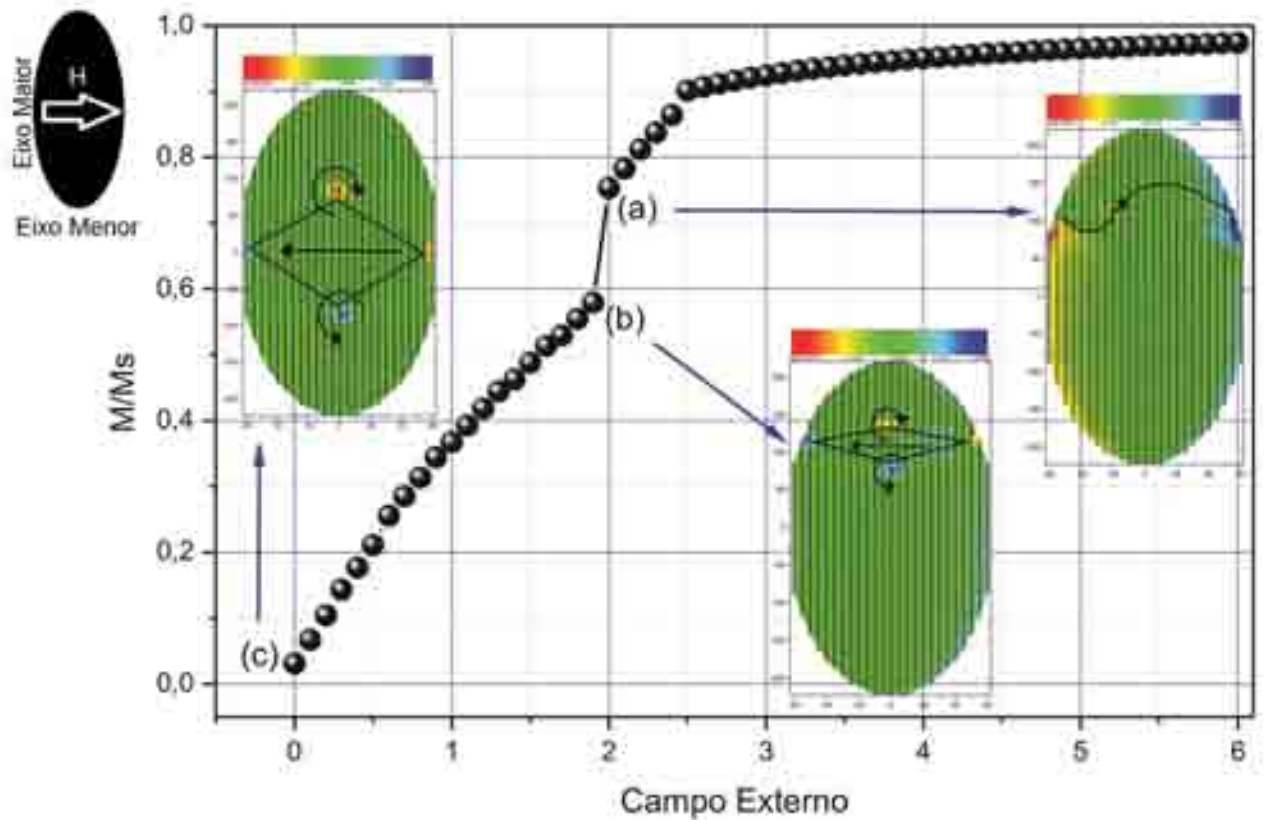


Figura 3.5: Figura referente à curva de magnetização com três estados de vórtice-domínio-vórtice representados, primeiramente temos o ponto anterior ao início da nucleação, segundo temos o início da nucleação do vórtice duplo e finalmente o estado de equilíbrio remanente de um nanoelemento elíptico de dimensões  $135\text{nm} \times 455\text{nm} \times 25\text{nm}$  sem acoplamento com um substrato AF. A coloração no mapa representa a componente  $z$  da magnetização, onde o vermelho representa fora do plano, o verde no plano e o azul para dentro do plano da figura. Os valores do campo externo estão representados em  $kOe$ .

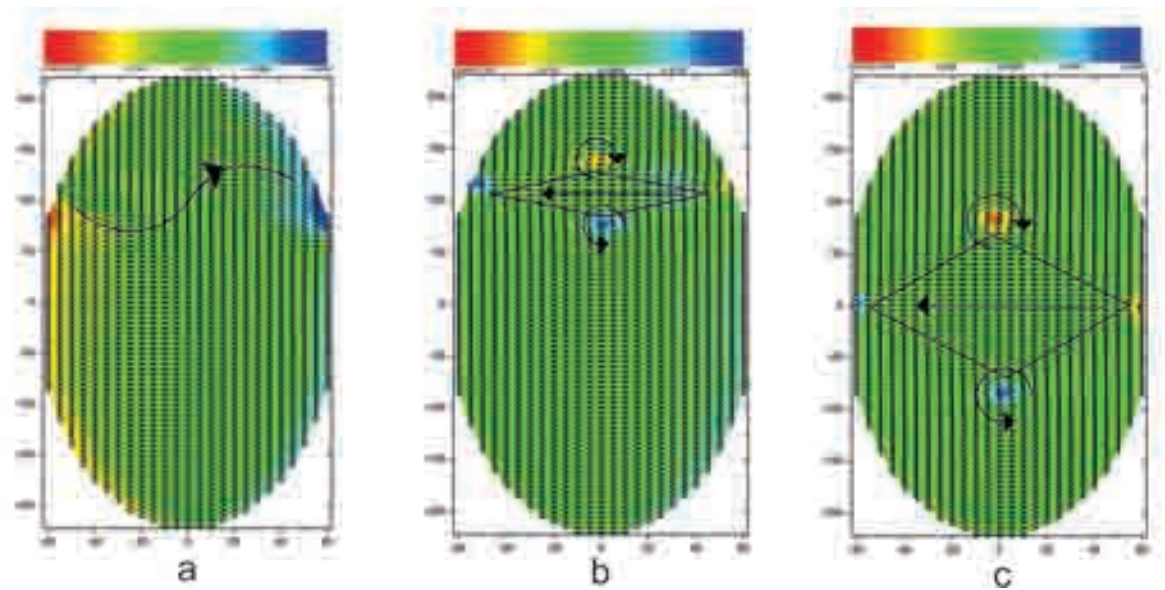


Figura 3.6: Figura referente aos estados ampliados da figura 3.5.

mesmas quiralidades separados por uma estrutura que denominaremos *antivórtice* devido ao formato da magnetização que o compõem.

Finalmente, na configuração de remanência representada pela letra (e), note que existem dois vórtices de mesmas quiralidades separados por um antivórtice.

Podemos perceber que o processo de nucleação, assim como o formato da curva de magnetização para o estado de vórtice duplo *VAV*, difere em diversos aspectos dos processos de nucleação de um único vórtice e do par de vórtices *VDV*.

### 3.3 Fatores de Influência sobre Processos de Nucleação e Estados de Equilíbrio

Atualmente existe um enorme interesse no estudo de fluxos fechados de magnetização, como vórtices, inspirado pelas excitações destes sistemas, as quais vêm sendo sugeridas como uma potencial nova maneira de construção de memórias magnéticas nanométricas[18]. Em geral, problemas apresentados em publicações recentes nesta área

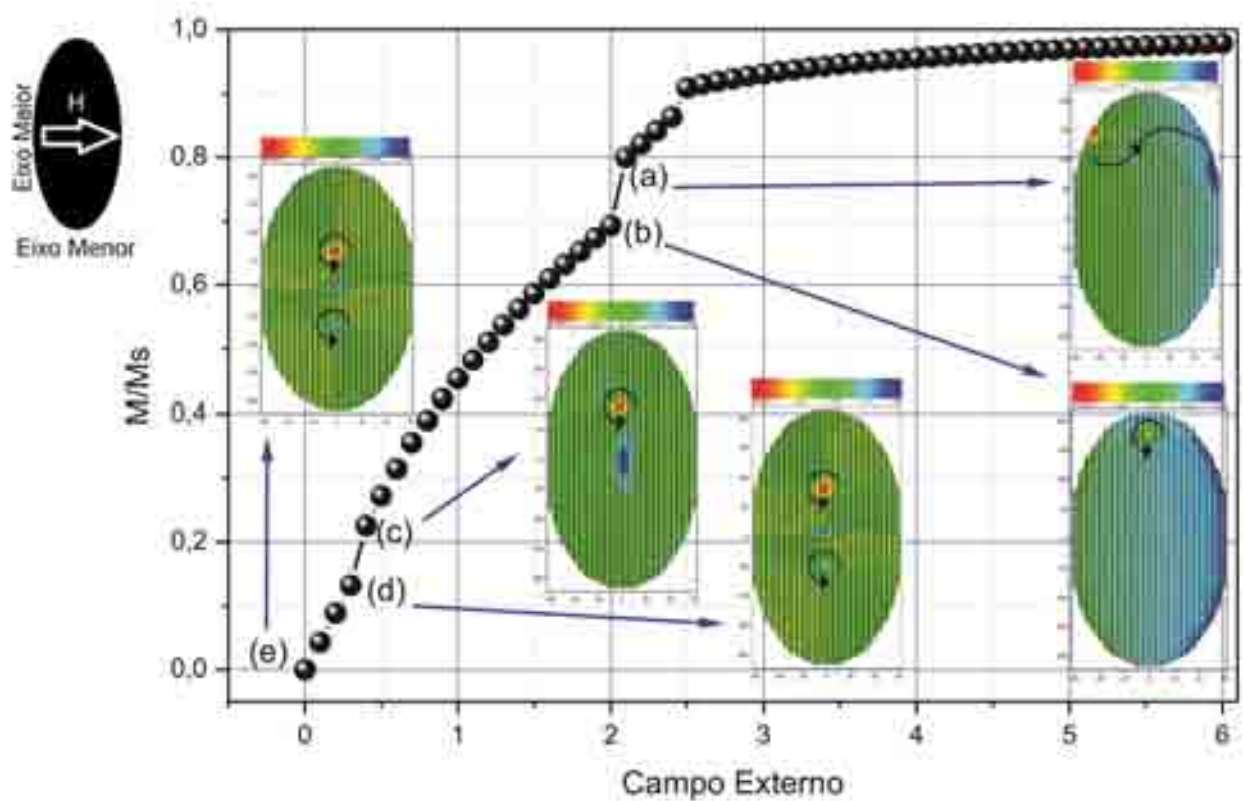


Figura 3.7: Figura referente à curva de magnetização com cinco estados de vórtice-antivórtice-vórtice representados, primeiramente temos o ponto anterior ao início da nucleação, segundo temos o início da nucleação com um vórtice único, terceiro temos o deslocamento deste vórtice, quarto temos o primórdio da nucleação de um VAV e finalmente o estado de equilíbrio remanente de um nanoelemento elíptico de dimensões  $135\text{nm} \times 445\text{nm} \times 25\text{nm}$  sem acoplamento com um substrato AF. A coloração no mapa representa a componente  $z$  da magnetização, onde o vermelho representa fora do plano, o verde no plano e o azul para dentro do plano da figura. Os valores do campo externo estão representados em  $kOe$ .

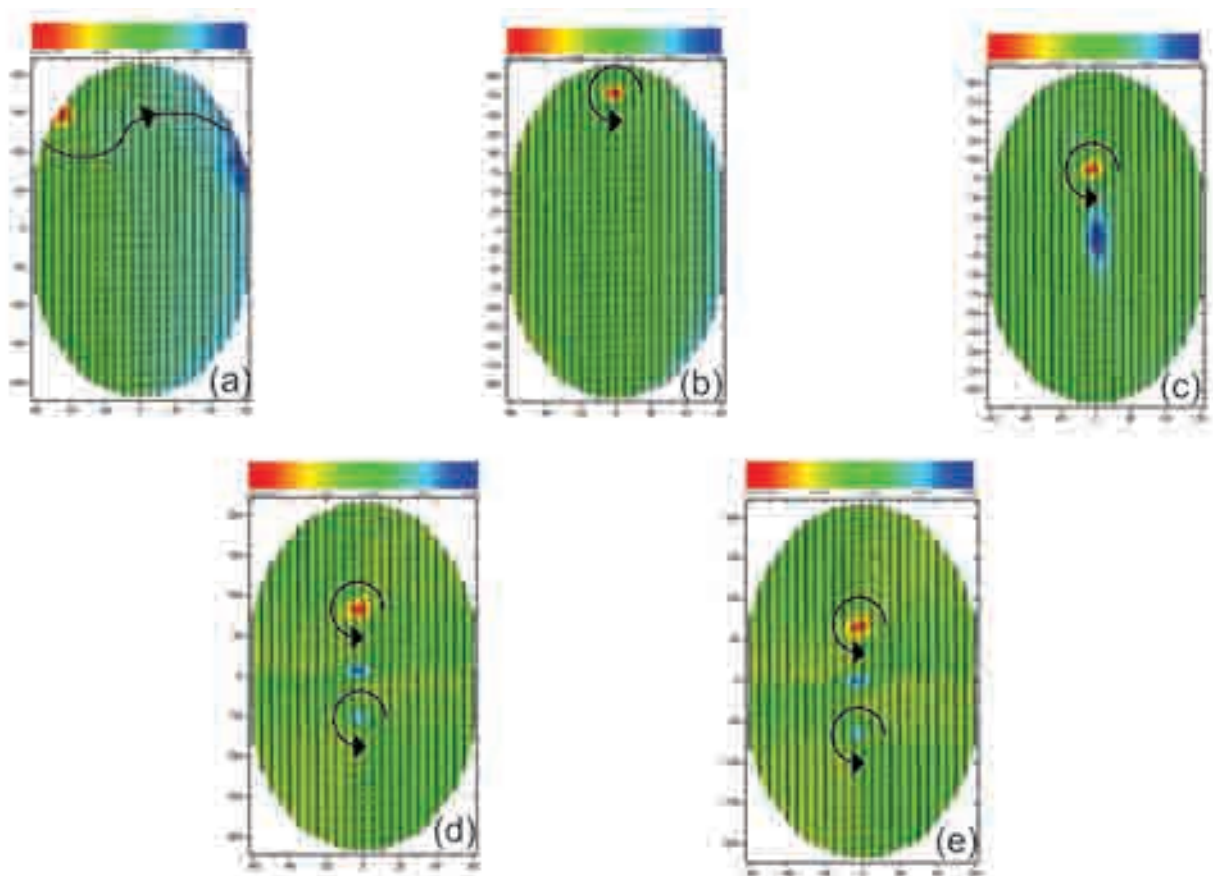


Figura 3.8: Figura referente aos estados ampliados da figura 3.7.

sugerem que o estudo dos estados de equilíbrio dos nanoelementos em diversos formatos e materiais ainda não é bem compreendido e modelado. Portanto, a presente seção fornecerá um estudo teórico dos estados de equilíbrio de nanoelementos elípticos de Ferro em diversas dimensões, assim como os fatores que possibilitam o controle de tais estados.

### 3.3.1 Dimensões Físicas

Vamos iniciar o estudo teórico com a análise da dependência que existe entre as possíveis configurações de equilíbrio e as dimensões cartesianas  $x, y$ . Primeiramente, partiremos da configuração básica com um nanoelemento elíptico de ferro, utilizando uma célula de simulação com aresta  $d = 5nm$ , altura de  $25nm$  e dimensões laterais nas faixas  $105nm \leq x \leq 195nm$  e  $305nm \leq y \leq 495nm$ . Vale ressaltar que o campo externo encontra-se na direção do eixo menor da elipse devido ao grande número de possibilidades de nucleação de vórtices duplos com esta configuração.

Ao observarmos a equação que nos fornece o campo magnético de um material magnetizado (livre de correntes elétricas, como nosso sistema) na forma integral[19]:

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left( \int_V \frac{(-\nabla \cdot \vec{M})(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} dV + \oint_S \frac{(\vec{M} \cdot \hat{n})(\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} dS \right) \quad (3.1)$$

podemos afirmar que a nucleação de vórtices ocorre de forma a minimizar o campo magnético relacionado à densidade de cargas superficial e volumétrica e, conseqüentemente, minimizar a energia magnética relacionada à tais termos.

Observe o diagrama na figura 3.9. Notavelmente, um fato importante que pode ser concluído a partir destes dados é que nanoelementos levemente alongados favorecem a nucleação de estados de duplo vórtices; mais especificamente, tais estados (incluindo VAV/VDV) são fortemente favorecidos em sistemas cujo eixo maior é na faixa desde 2,5 até 3,7 vezes maior do que o eixo menor. Para proporções menores, temos a nu-

cleação de vórtice único (obviamente, como mostra os pontos azuis espalhados na região de pontos verdes no diagrama, existem determinadas dimensões com tal razão levemente diferente desta faixa citada que nos fornecem um estado remanente atípico, mas estes são pontos isolados, validando uma análise geral) e para proporções maiores temos múltiplos vórtices. Outro ponto ressaltado no diagrama se refere especificamente à nucleação de vórtices duplos; percebemos que a nucleação VAV ocorre apenas em nanoelementos com eixo menor na faixa de  $115nm \leq x \leq 145nm$ , região onde a razão entre o eixo maior e o eixo menor é, em média, 2,6. Isto se dá devido principalmente ao custo de energia de troca que a estrutura do antivórtice possui para o sistema, especialmente se suas dimensões forem aumentando.

Este estudo é de extrema importância visto que os estados remanentes em nanoelementos diversos não possuem muito esforço de publicação ou sequer estudos teóricos e experimentais com informações precisas sobre o assunto, mesmo sabendo que estes já vem sendo utilizados na indústria[20] em diversos sistemas de memórias e até mesmo em outros sistemas teóricos. Isto significa que, por hora, vórtices em nanoestruturas estão sendo encarados como falhas ou impecílios, quando na verdade são estados naturais de equilíbrio em vários nanosistemas magnéticos, os quais devem ser conhecidos e controlados.

### 3.3.2 Campo de Interface

Há na literatura relatos[20] de vórtices gerados por nanocontatos bombeados por corrente elétrica contínua que são capazes de trabalhar em sistemas de semi-condutores como **emissores de radiação** (esta é na faixa de frequências de  $1GHz$  até  $40GHz$  com largura de linha na faixa de  $2 - 50MHz$  à temperatura ambiente). Isso se dá devido ao efeito de torque nos spins em multicamadas magnéticas que ocorre na escala nanométrica, o qual pode ser manipulado de forma a emitir sinais de estados estacionários na faixa de microondas citada.



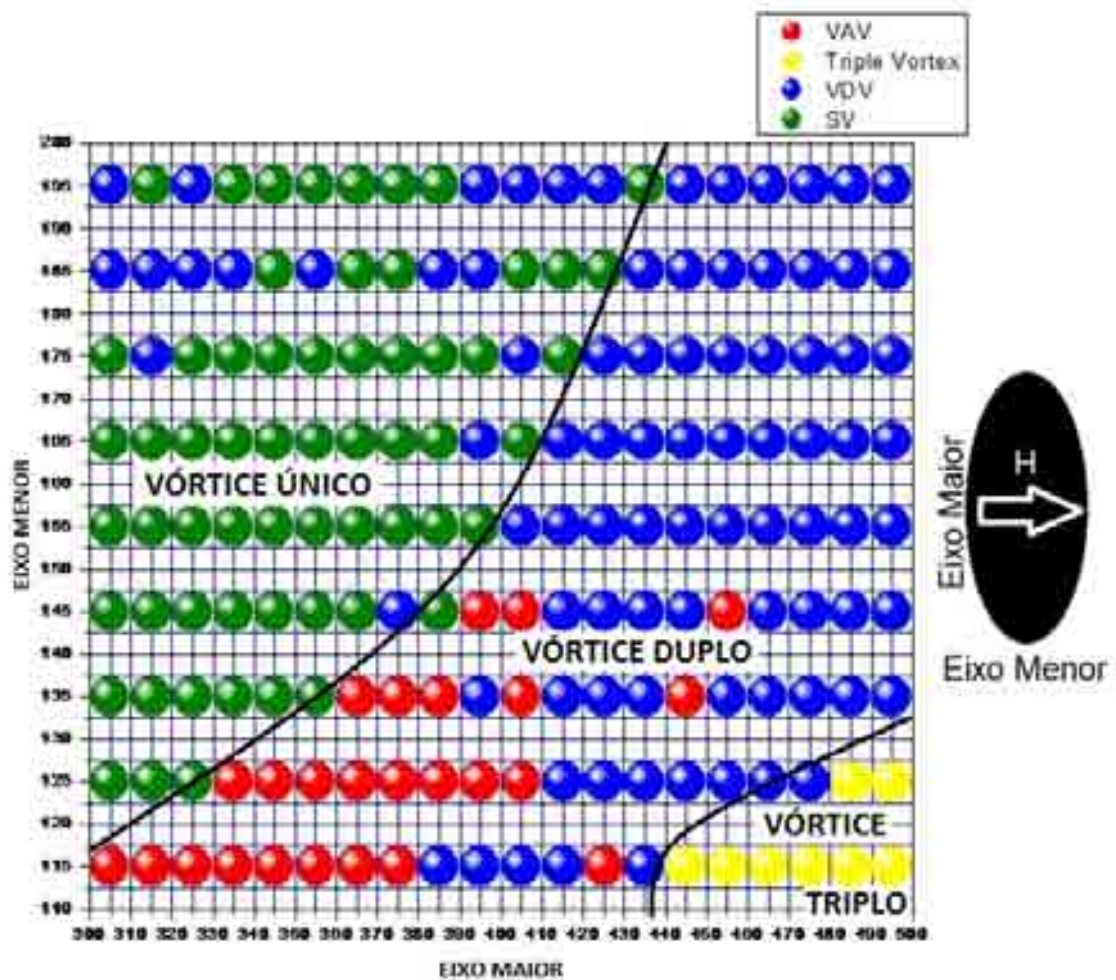


Figura 3.9: Diagrama de fases referente ao estudo dos possíveis estados de remanência em nanoelementos elípticos de Ferro com altura de  $25\text{nm}$ . Os valores na ordenada são referentes ao eixo menor e os valores na abcissa são referentes ao eixo maior da elipse (ambos em  $\text{nm}$ ). Vale ressaltar que o campo externo é na direção do eixo menor.

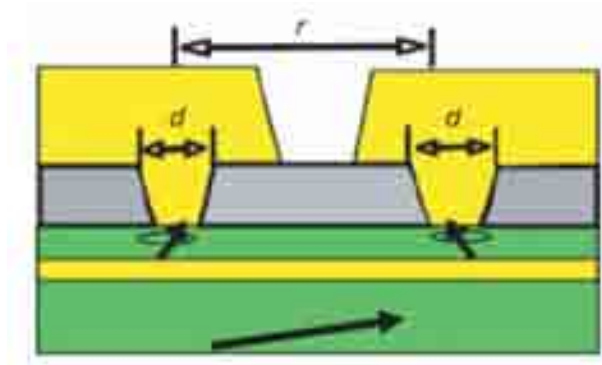


Figura 3.10: Figura esquemática que representa dois nano-contatos com distâncias entre si  $r$  variável de forma a obtermos ou não a sincronia de suas oscilações.

Essa idéia, conhecida usualmente como *nano-osciladores*, estabelece um novo uso para estruturas magneto-eletrônicas, como transmissores nanométricos direcionados e receptores de sinal para comunicação sem fios (wireless).

Um fato interessante é que um único *nano-oscilador de torque de spin*, ou *STNO - single spin-torque nanooscillator*, apresenta uma potência típica menor do que  $1nW$ . Para atingirmos potências que sejam aplicáveis tecnologicamente (da ordem de  $\mu W$ ), temos que ter um conjunto de nano-contatos (ou vórtices) oscilando em **sincronia**. Este estado sincronizado (agora aplicando no contexto de estudo onde temos apenas dois nano-contatos com a distância entre si sendo controlada e variada; veja figura 3.10[20]) é caracterizado por uma diminuição súbita na largura de linha de emissão e um grande aumento na potência emitida.

O estudo experimental realizado em [20] nos fornece o espectro de frequências emitidas (figura 3.11) quando os dois nanocontatos não estão sincronizados, representado pela letra (a), e quando há a sincronia, representado pela letra (b). Vemos claramente a redução na largura de linha emitida, o que favorece uma possível aplicação tecnológica em nano-transmissores.

Temos também o estudo experimental das potências individuais emitidas por dois

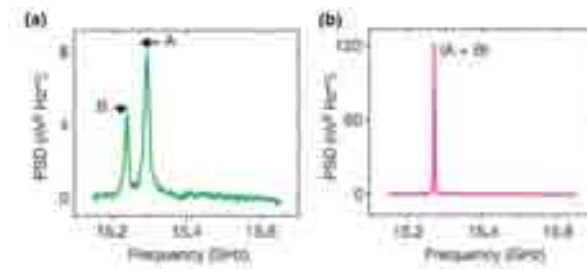


Figura 3.11: Resultados experimentais que representam em (a) o espectro de emissão de dois nano-contatos sem interações e (b) a redução súbita na largura de linha quando suas oscilações entram em sincronia.

nanocontatos no mesmo artigo, representado na figura 3.12. Após a linha tracejada, temos a sincronização de suas oscilações e o aumento significativo da potência emitida por cada contato individual.

Com tal ideia em mente, a presente seção reporta o estudo teórico sobre a influência do valor do campo de acoplamento de interface em nanoelementos elípticos de ferro utilizando células de simulação com arestas  $d = 5nm$  e variadas dimensões cartesianas, com o intuito de obtermos informações sobre o possível controle da distância entre dois vórtices em um mesmo nanoelemento para um estudo futuro de suas dinâmicas, assim como o estudo reportado em nanocontatos.

### Influência na Nucleação de um VAV

Reportamos agora o estudo da influência do campo de acoplamento de interface na nucleação VAV no estado remanente de um nanoelemento. No caso, o eixo menor da elipse possui  $125nm$  e o eixo maior  $375nm$  com altura de  $25nm$ . Vamos primeiramente analisar de maneira geral esta influência, mostrada na figura 3.13. Claramente, percebemos que no sistema sem acoplamento a distância entre o primeiro vórtice e o antivórtice, e entre este e o segundo vórtice são iguais, com valores de  $55nm$ , ou seja, o sistema é simétrico com relação à origem  $y = 0$ . Em valores positivos do campo de interface, percebemos que

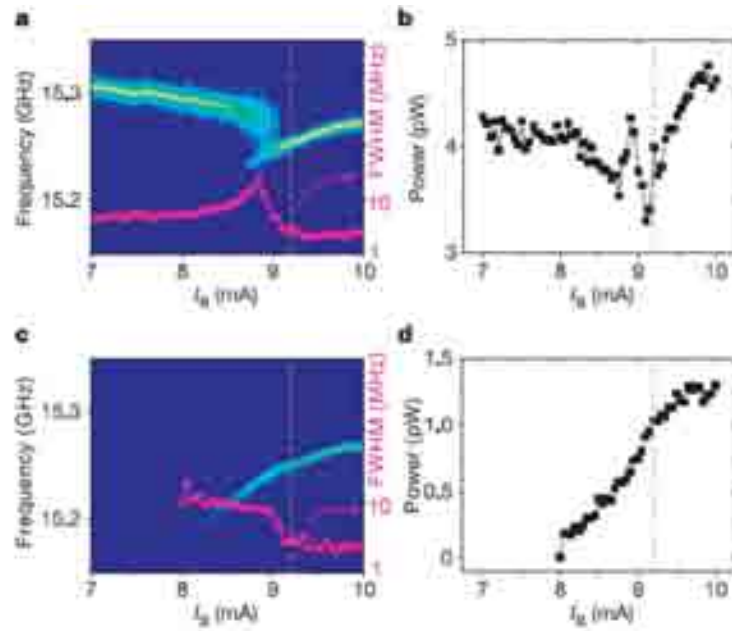


Figura 3.12: Resultados experimentais sobre a potência emitida individualmente por dois nano-contatos. A partir da linha tracejada, temos a sincronização de suas oscilações, como demonstrado em (b) e (d) e o aumento relativo na potência emitida.

o vórtice localizado em  $y < 0$  se aproxima do antivórtice e o vórtice localizado em  $y > 0$  se afasta do mesmo; em valores negativos do campo de interface, percebemos o efeito oposto (um resultado a ser ressaltado neste estudo é o fato de que a estrutura VAV não se mantém estável com valores de campo de interface superiores a  $0,6kOe$  ou inferiores a  $-0,6kOe$ , de maneira geral, ou seja, valores muito baixos - a partir destes limites ocorre uma transição, e nesta mesma dimensão temos um vórtice único como estado remanente de equilíbrio).

Na figura 3.14 temos uma visão ampliada da estrutura vórtice-antivórtice-vórtice: primeiramente com campo de interface de  $0,5kOe$  (a), depois sem acoplamento (b) e por último com campo de interface de  $-0,4kOe$  (c). A partir deste estudo, concluímos duas coisas: primeiro, o antivórtice não se desloca com a variação do campo de interface - o que ocorre é o deslocamento relativo dos dois vórtices com relação ao antivórtice. Segundo,

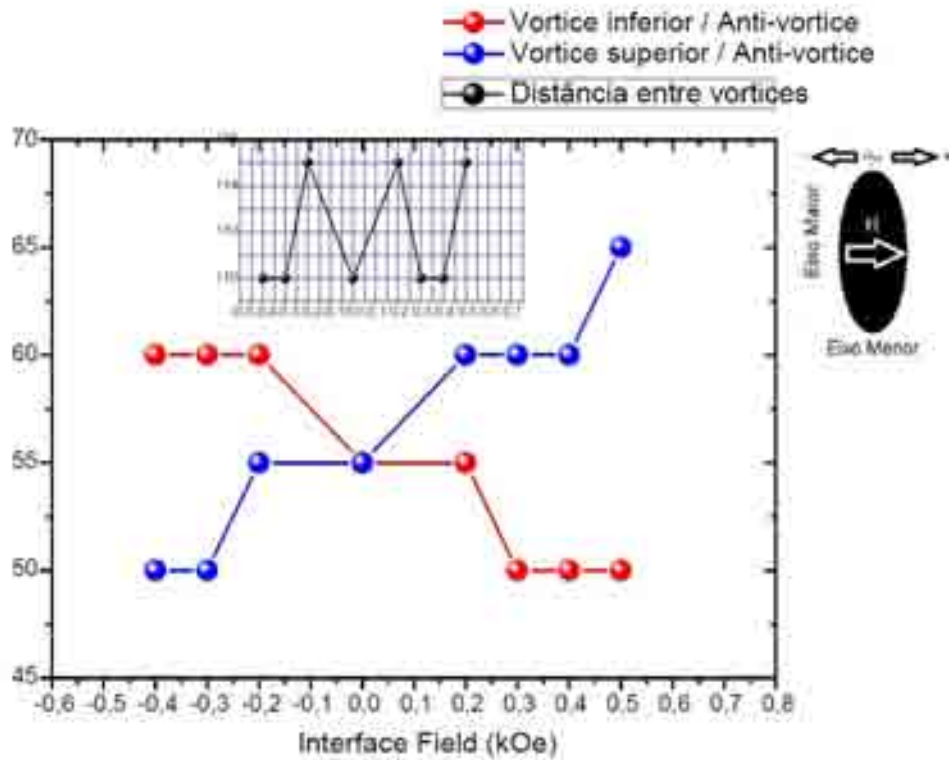


Figura 3.13: Figura referente ao estudo da influência do valor do acoplamento de interface em um nanoelemento de dimensões  $125nm \times 375nm \times 25nm$ ; em vermelho temos a distância entre o vórtice localizado na parte inferior ( $y < 0$ ) do nanoelemento e o antivórtice, em azul temos a distância entre o antivórtice e o vórtice localizado na parte superior ( $y > 0$ ) do nanoelemento. No gráfico inserido (pontos pretos) temos a distância entre os dois vórtices. A ordenada se refere às distâncias em nanômetros.

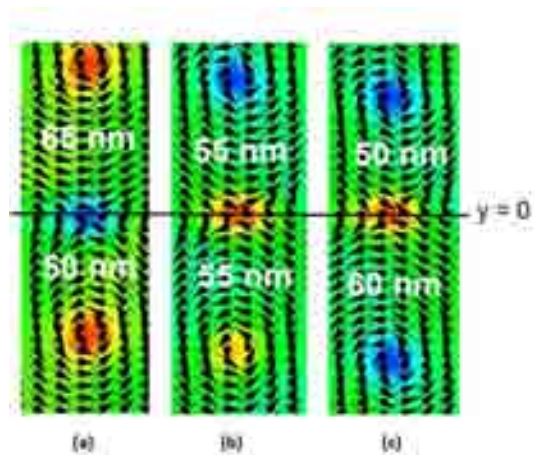


Figura 3.14: (a) Visão ampliada do centro do nanoelemento acoplado com campo de interface de  $0,5kOe$ . (b) Visão ampliada do centro do nanoelemento sem acoplamento. (c) Visão ampliada do centro do nanoelemento acoplado com campo de interface de  $-0,4kOe$ .

a distância média entre os dois vórtices permanece (considerando uma margem de erro na medida desta distância de 1 aresta da célula de simulação utilizada), praticamente a mesma (neste caso,  $110nm$ ). O movimento que ocorre está esquematizado na figura 3.15.

Vamos, agora, nos voltar para as curvas de magnetização destes nanoelementos representadas na figura 3.16. A partir desta, podemos afirmar que os valores limites do campo de interface para que se mantenha um VAV geram apenas pequenas diferenças nas curvas de magnetização com referencial na curva do nanoelemento desacoplado. Mesmo assim, o fato de termos uma variação nas posições dos vórtices nos faz acreditar em uma influência significativa na dinâmica deste sistema que será futuramente abordada (ver capítulo 04).

### Influência na Nucleação de um VDV

Apresentaremos agora resultados referentes à nanoelementos com altura de  $20nm$ , a qual apresenta diversas possibilidades de nucleação de VDV em remanência. Vale ressaltar que alguns destes resultados foram publicados (ver apêndice) no *Journal of Applied Physics* em 10 de fevereiro de 2012.

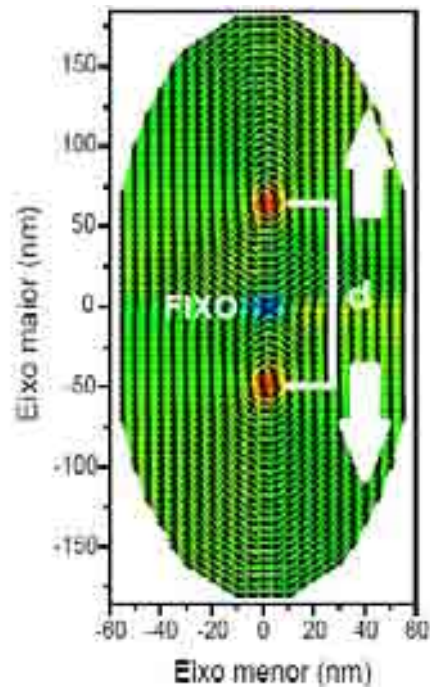


Figura 3.15: Figura esquemática do movimento referente à influência do campo de interface na nucleação de um VAV.

Vamos iniciar com o estudo da variação da distância entre um duplo vórtice nucleado em remanência em nano-elementos de dimensões  $115\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$  (linha azul) e  $195\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$  (linha vermelha), como mostra a figura 3.17. Primeiramente, temos a clara diferença que a nucleação do tipo VDV se mantém estável com valores do campo de interface muito maiores (da ordem de alguns  $kOe$ ) do que o necessário para desestabilizar uma nucleação do tipo VAV (da ordem de  $Oe$ , como mostra a figura 3.13). Outro fato notório é que a variação da distância entre os dois vórtices é bem mais acentuada - para o nano-elemento de dimensões  $115\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$  esta distância varia desde a metade até o dobro da distância para o sistema sem acoplamento de interface; para o nano-elemento de dimensões  $195\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$  esta distância varia desde 56 por cento até 175 por cento da distância para o sistema sem acoplamento de interface.

Na figura 3.18 temos a representação das curvas de magnetização referentes a um nano-

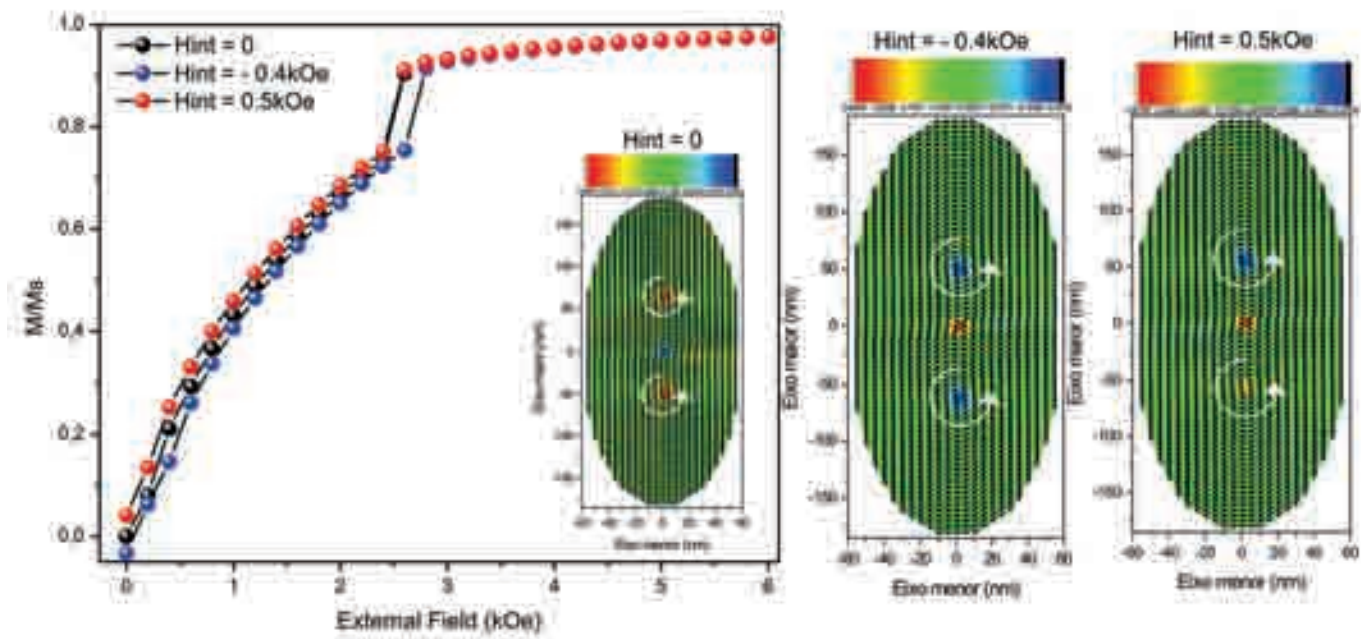


Figura 3.16: Figura referente às magnetizações de nanoelementos de dimensões  $125 \text{ nm} \times 375 \text{ nm} \times 25 \text{ nm}$ . Os valores dos campos de interface limites estão representados na legenda da figura, assim como os estados remanentes de cada curva estão representados em anexo.



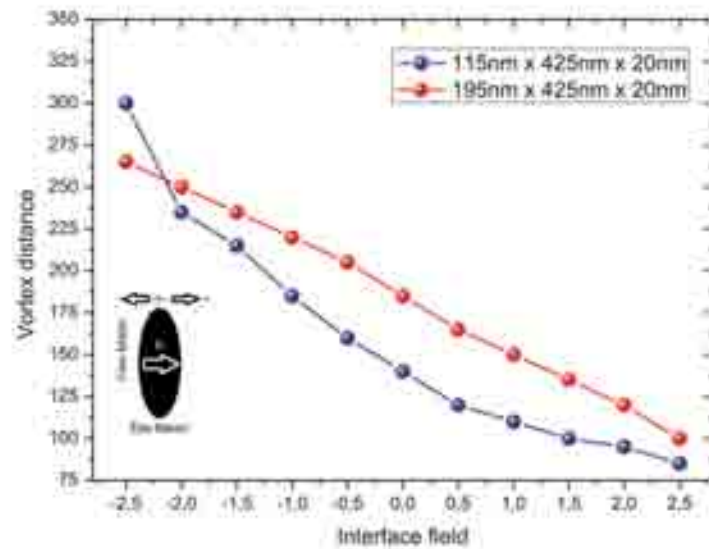


Figura 3.17: Figura referente à variação da distância entre os vórtices na nucleação VDV em nanoelementos (azul)  $115\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$  e (vermelho)  $195\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$ . Os valores das distâncias estão em nanômetros e o campo de interface em  $kOe$ .

elemento de dimensões  $195\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$  com três valores distintos do campo de interface. A partir desta, podemos concluir que mesmo com valores de  $H_{int}$  da ordem do campo externo, a nucleação VDV se mantém estável e mostra grande diferença em suas curvas de magnetização. Outro ponto a se destacar é o fato de que com a diminuição do valor do campo externo, a distância entre os vórtices na nucleação do nano-elemento sem acoplamento varia, desde  $100\text{nm}$  no início de um estado não uniforme (representado pela letra (a)) até  $185\text{nm}$  em remanência (representado pela letra (b)) - isto ocorre devido à diminuição da energia Zeeman, visto que o domínio é na direção oposta do campo externo.

Por fim, na figura 3.19 temos as mínimas (a)(c) e máximas (b)(d) distâncias entre os vórtices para nano-elementos de dimensões  $115\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$  e  $195\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$ , respectivamente. Podemos observar que para o sistema com maior eixo maior a variação desta distância é mais acentuada - varia desde  $80\text{nm}$  até  $320\text{nm}$ .

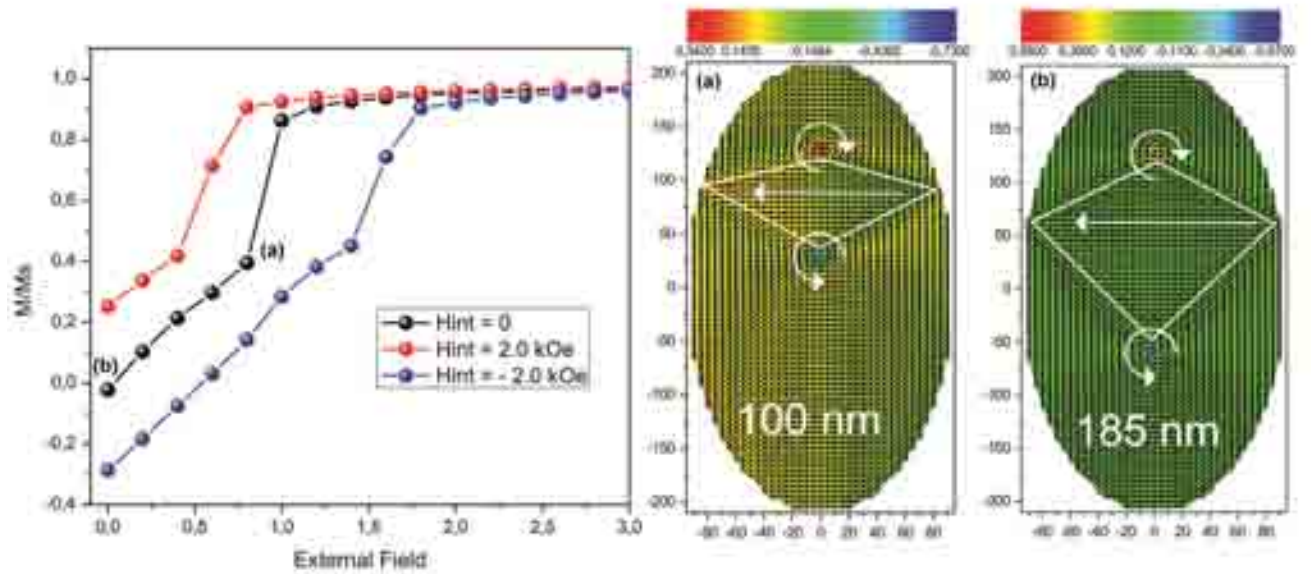


Figura 3.18: Figura referente às curvas de magnetização de um nano-elemento de dimensões  $195\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$ ; em preto temos a curva referente ao sistema sem acoplamento de interface, em vermelho com  $H_{int} = 2.0\text{kOe}$  e em azul com  $H_{int} = -2.0\text{kOe}$ . Ao lado temos (a) o estado de equilíbrio referente ao início da nucleação sem acoplamento e (b) o estado de equilíbrio em remanência. A coloração se refere à magnetização fora do plano e as distâncias se referem às distâncias entre os vórtices em nanômetros.

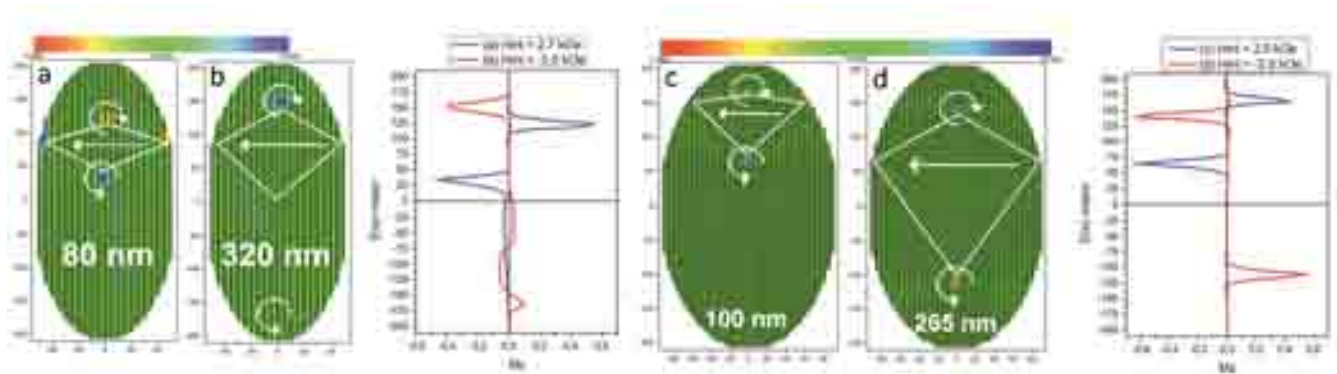


Figura 3.19: Representação das distâncias (a)(c) mínimas e (b)(d) máximas para nanoelementos de dimensões  $115\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$  e  $195\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$ , respectivamente. Em cada mapa temos a distância entre os vórtices escrita em nanômetros. Ao lado, temos um gráfico da magnetização no eixo z (com referência na magnetização de saturação) para os limites do campo de interface (ver coloração).

Devemos enfatizar o fato de que com a troca de sentido do campo de interface há também a inversão da polaridade (veja a coloração na figura 3.19) em ambos os sistemas (veja os gráficos referentes à magnetização no eixo z na mesma figura). Temos, também, um fato importante: que para o nano-elemento  $195\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$  não há mudanças significativas na largura dos núcleos dos vórtices a medida que variamos o campo de interface, enquanto que para o nano-elemento  $115\text{nm} \times 425\text{nm} \times 20\text{nm}$  há uma variação significativa em tal largura. Ainda, podemos perceber que na compressão máxima do sistema VDV para ambas as dimensões, os valores em módulo da magnetização no eixo z para cada vórtice são praticamente os mesmos, enquanto que para o máximo afastamento dos vórtices tais valores são bem distintos.

### 3.3.3 Influência do Campo Dipolar na Configuração de Equilíbrio

Dentre os termos de energia citados e utilizados nas simulações apresentadas neste trabalho, um dos mais intrigantes é o termo de *energia dipolar*, com uma ação de longo alcance; ele é o único cuja influência em determinada célula estudada  $i$  é a soma das influências individuais de todas as outras células de simulação que compõem o sistema  $k$ . Dentre as simulações apresentadas anteriormente neste capítulo, todas possuem o termo de energia dipolar.

Algo que devemos ressaltar é a imprevisibilidade da configuração de equilíbrio estabelecida em um nano-elemento devido, especialmente, ao campo dipolar. Até o momento, não existem relatos e, portanto, não podemos afirmar realmente qual é a tendência que este termo de energia induz na configuração final - por exemplo, em sistemas muito alongados, o campo dipolar induz uma anisotropia de forma e, como consequência, um estado uniforme; já em sistemas circulares, a tendência é a diminuição da carga dipolar de superfície induzida no sistema e, portanto, a nucleação de vórtices. Esta imprevisibilidade nos fornece motivos para tentarmos mostrar que é este termo que praticamente comanda a configuração de equilíbrio em nano-elementos através do comparativo entre o mapa de spins e o mapa do campo dipolar.

#### Mapa do Campo Dipolar - VAV

Nas figuras 3.20 e 3.21 temos as representações (a) dos mapas de spins das configurações de equilíbrio em remanência de nano-elementos com dimensões  $115nm \times 305nm \times 25nm$  e  $145nm \times 455nm \times 25nm$ , respectivamente, e (b) o mapa referente apenas à contribuição do campo dipolar correspondente a cada estado. As colorações nos mapas correspondem (a) à magnetização fora do plano e (b) ao módulo do campo dipolar em unidades de

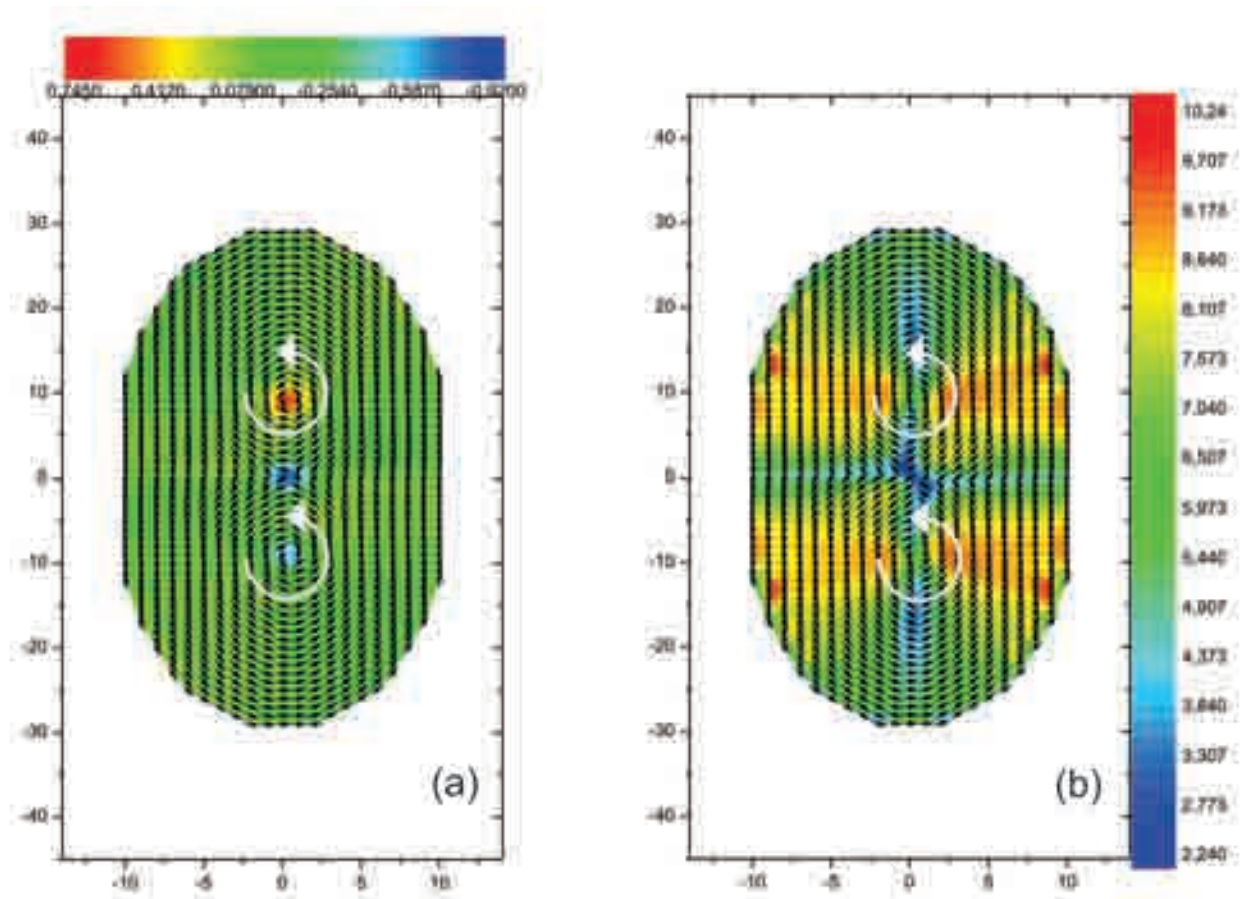


Figura 3.20: Figura referente ao (a) estado de equilíbrio e (b) ao mapa da configuração gerada pelo campo dipolar de um nano-elemento de dimensões  $115nm \times 305nm \times 25nm$ . No primeiro, a coloração se refere à magnetização fora do plano e no segundo se refere ao módulo do campo dipolar em unidades do programa de simulação.

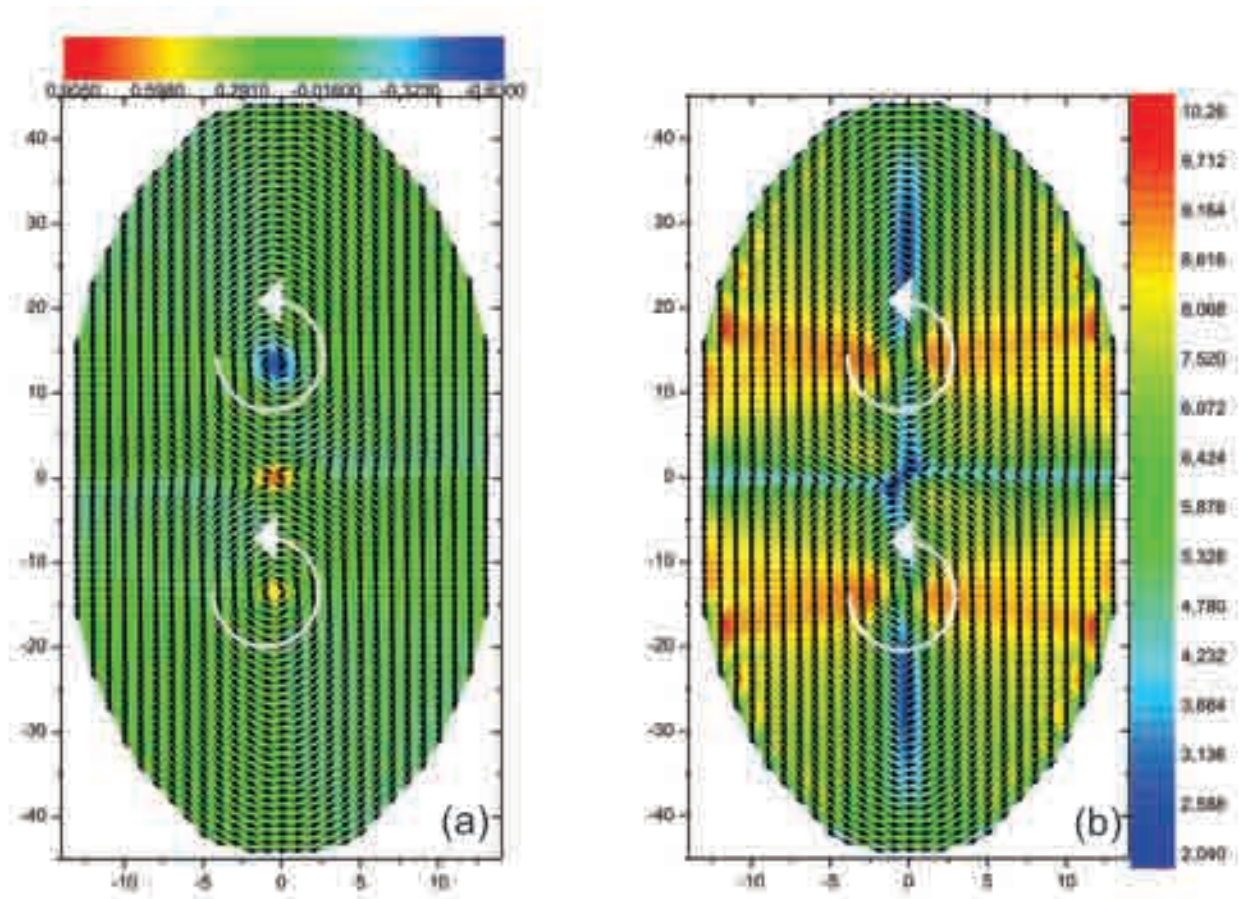


Figura 3.21: Figura referente ao (a) estado de equilíbrio e (b) ao mapa da configuração gerada pelo campo dipolar de um nano-elemento de dimensões  $145nm \times 455nm \times 25nm$ . No primeiro, a coloração se refere à magnetização fora do plano e no segundo se refere ao módulo do campo dipolar em unidades do programa de simulação.

simulação.

A partir destas, podemos perceber, primeiramente, que ambos os mapas em cada figura separadamente (mapa de spin (a) e mapa referente ao campo dipolar (b)) são praticamente iguais - isto quer dizer que a configuração de equilíbrio da magnetização na nucleação VAV em um nano-elemento com formato elíptico é regida basicamente pelo termo de energia dipolar, o qual claramente tem sua influência sobressaída com relação aos outros termos de energia.

Especificamente falando sobre os mapas (b) das figuras 3.20 e 3.21, podemos perceber que na nucleação VAV existe uma região muito intensa do módulo do campo dipolar em torno dos núcleos dos vórtices próximo à região onde temos o anti-vórtice; ainda, na região do anti-vórtice o módulo do campo dipolar é muito baixo, assim como nas regiões em torno dos núcleos dos vórtices afastada do anti-vórtice. Na maioria do sistema temos a coloração esverdeada, o que significa que o módulo do campo dipolar é moderado na maior parte da área do nano-elemento.

### **Mapa do Campo Dipolar - VDV**

Nas figuras 3.22 e 3.23 temos as representações (a) dos mapas de spins das configurações de equilíbrio em remanência de nano-elementos com dimensões  $115nm \times 385nm \times 25nm$  e  $195nm \times 495nm \times 25nm$ , respectivamente, e (b) o mapa referente apenas à contribuição do campo dipolar correspondente a cada estado. As colorações nos mapas correspondem (a) à magnetização fora do plano e (b) ao módulo do campo dipolar em unidades de simulação.

A partir destas, podemos perceber novamente, primeiramente, que ambos os mapas em cada figura separadamente (mapa de spin (a) e mapa referente ao campo dipolar (b)) são praticamente iguais - isto quer dizer que a configuração de equilíbrio da magnetização na nucleação VDV em um nano-elemento com formato elíptico também é regida basicamente

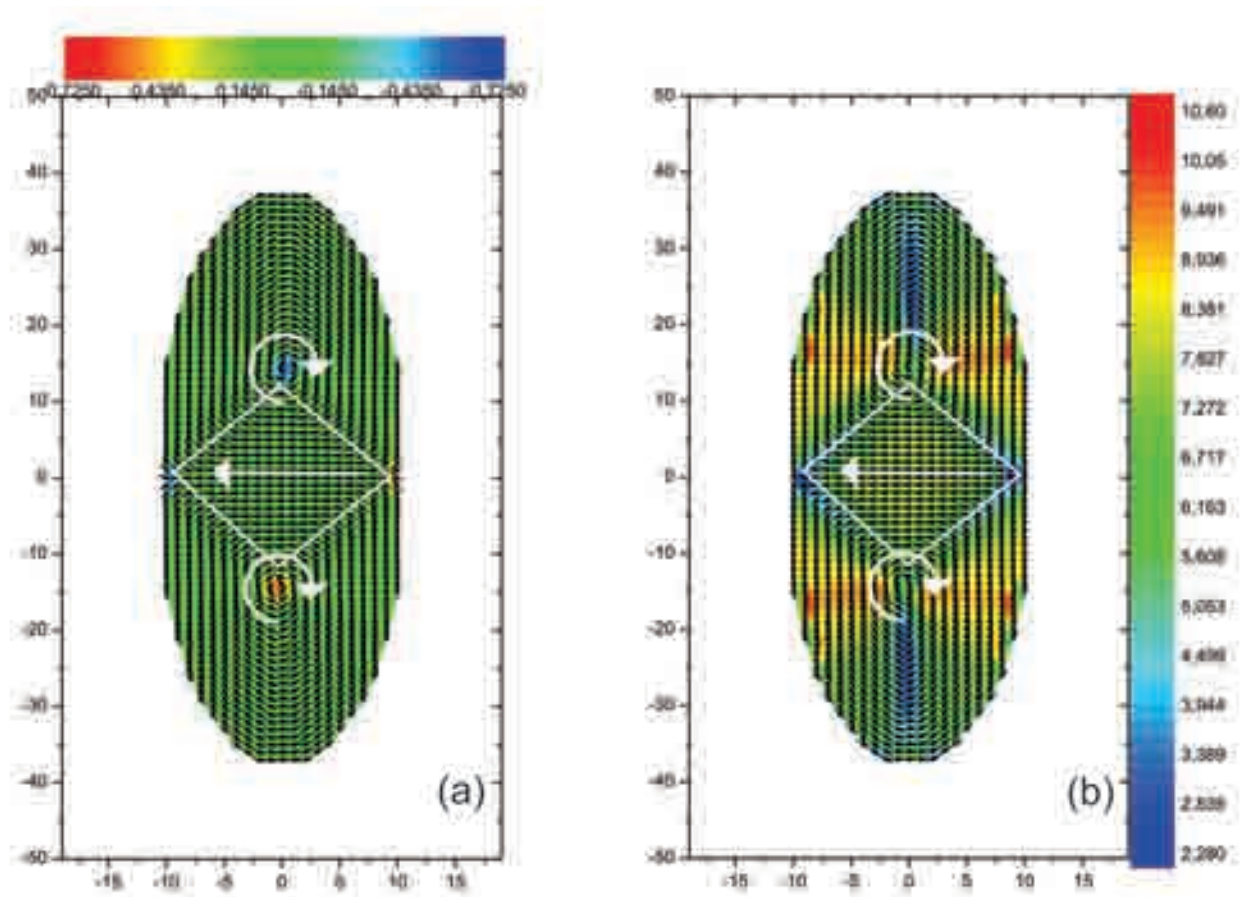


Figura 3.22: Figura referente ao (a) estado de equilíbrio e (b) ao mapa da configuração gerada pelo campo dipolar de um nano-elemento de dimensões  $115nm \times 385nm \times 25nm$ . No primeiro, a coloração se refere à magnetização fora do plano e no segundo se refere ao módulo do campo dipolar em unidades do programa de simulação.



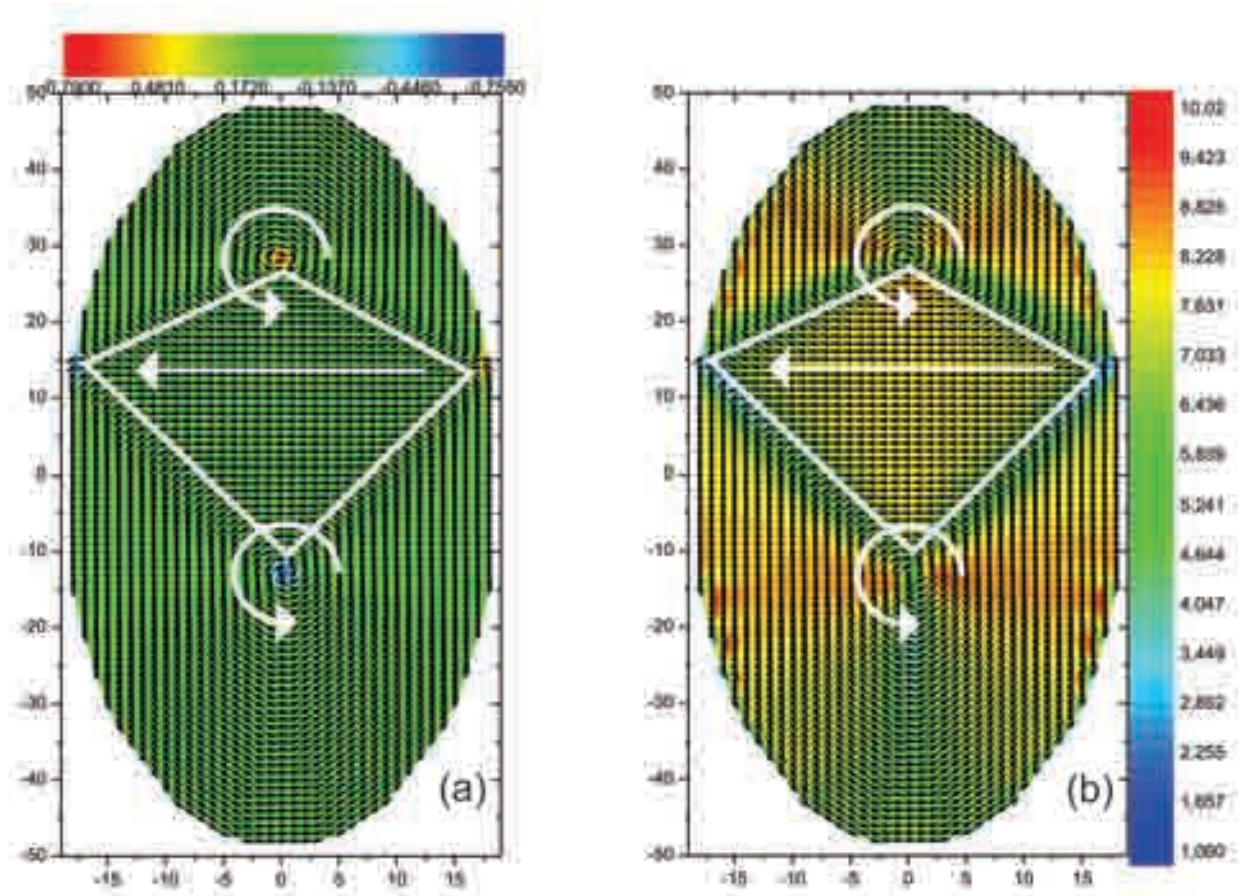


Figura 3.23: Figura referente ao (a) estado de equilíbrio e (b) ao mapa da configuração gerada pelo campo dipolar de um nano-elemento de dimensões  $195nm \times 495nm \times 25nm$ . No primeiro, a coloração se refere à magnetização fora do plano e no segundo se refere ao módulo do campo dipolar em unidades do programa de simulação.

pelo termo de energia dipolar, o qual claramente tem sua influência sobressaída com relação aos outros termos de energia.

Tratando especificamente sobre os mapas (b) das figuras 3.22 e 3.23, podemos perceber que na nucleação VDV existe uma região muito intensa do módulo do campo dipolar em torno dos núcleos dos vórtices próximo ao início do domínio em forma de diamante; ainda, no centro deste domínio, temos uma grande intensidade de campo dipolar. Na maioria do sistema temos a coloração esverdeada, o que significa que o módulo do campo dipolar é moderado na maior parte da área do nano-elemento. Outro resultado a se destacar é o fato de que nas *pontas* do domínio a intensidade do campo dipolar é mínima, de forma a minimizar a carga dipolar em tal região.

Uma diferença entre os mapas VDV das figuras 3.22 e 3.23 é que na primeira o domínio-diamante é centrado em  $y = 0$  e na segunda este é deslocado na região  $y > 0$ . Isto nos fornece uma pequena diferença no mapa dipolar de cada sistema. No primeiro, há uma região com intensidade muito pequena em torno dos núcleos dos vórtices longe do domínio, o que não existe no segundo mapa.

# Capítulo 4

## Conclusão

A partir dos resultados teóricos obtidos através de simulações computacionais com o método descrito neste documento, podemos afirmar que o controle da distância entre dois vórtices nucleados como estado remanente, sejam eles VAV ou VDV, em um nanoelemento elíptico de Ferro é possível através da manipulação das dimensões físicas, a qual nos fornecem padrões de nucleações como mostrado no diagrama 3.9, ou com a variação do valor do campo de acoplamento  $F/AF$ , tanto no tipo VDV quanto sutilmente no tipo VAV.

Gostaríamos de destacar especialmente o controle obtido para a nucleação de VDV, a qual possivelmente apresentará na continuação deste trabalho, ótimos resultados com a dinâmica da magnetização aplicada à simulação computacional no contexto de nano-osciladores.

Ainda, é interessante dizermos que tal controle não foi reportado até o momento, portanto temos grandes expectativas com o impacto deste trabalho na área de simulações micromagnéticas.

Temos também resultados de simulação que mostram a influência massiva do termo de energia dipolar no estado de equilíbrio em nano-elementos de Ferro elípticos, o que também é algo de impacto, pois até o momento tais afirmações não passavam de hipóteses.

# Capítulo 5

## Expectativas Futuras

Neste capítulo iremos abordar a possível continuidade deste trabalho, envolvendo o aprimoramento do algoritmo de simulação baseado em observações experimentais recentes no assunto sobre a natureza do acoplamento entre o F e o AF e finalmente a abordagem da dinâmica dos nano-elementos estudados nesta tese de Mestrado.

### 5.1 Relaxação do Substrato Anti-ferromagnético

Em nosso algoritmo atual, o substrato antiferromagnético é inserido como um termo de energia fixo, sem que seja permitido a relaxação deste. Isso se deve ao fato da rigidez de troca do material antiferromagnético ser muito maior (centenas de vezes) do que a rigidez de troca do material ferromagnético depositado sobre ele.

Um dos objetivos de continuação deste trabalho está baseado no artigo [21], onde há evidências experimentais de que onde há formação de vórtices no material F há também uma configuração-imagem de vórtice correspondente no material AF, o que significa que mesmo com uma rigidez muito superior, o material AF também deve ser relaxado. Para uma melhor visualização, observe a figura 5.1 retirada do artigo citado.

Portanto, o aprimoramento do algoritmo atual se dará de forma a considerar o subs-

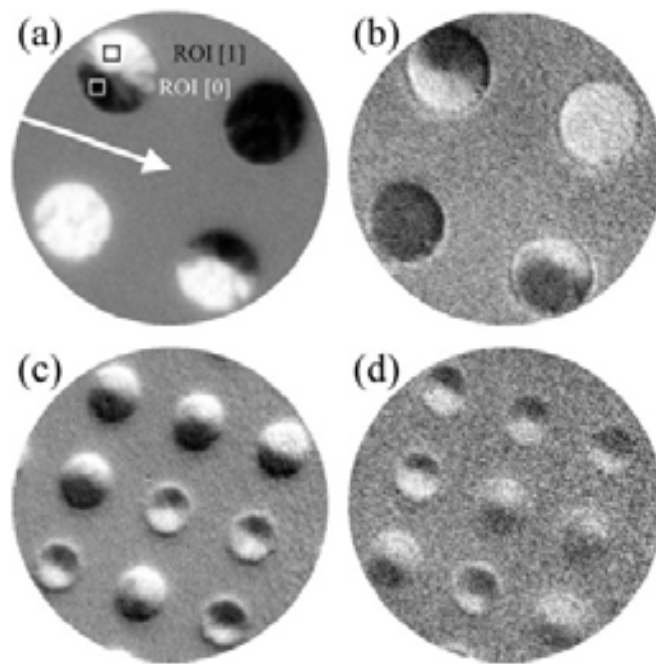


Figura 5.1: Imagens de contraste magnético (ver referência citada) adquiridas do Fe (a) e Mn (b) de energia de ressonância em discos com bicamadas de  $2\mu\text{m}$ . As imagens das bordas do Fe e Mn para discos de  $1\mu\text{m}$  de diâmetro são mostrados em (c) e (d), respectivamente. A seta indica a direção de propagação do feixe de raios-x.

trato AF não mais como um termo fixo, mas sim como uma série de células de simulação com grande rigidez de troca e sem interação dipolar que pode também relaxar sua estrutura de equilíbrio de acordo com a interação F/AF. Sem dúvida, este sistema será ainda mais eficiente na modelagem e simulação de estruturas sub-micromagnéticas e nos fornecerá uma poderosa ferramenta de comparação com os resultados experimentais neste campo de pesquisa.

## 5.2 Dinâmica da Magnetização - Nano-osciladores

Como reportado, o objetivo desta tese é a análise de estados remanentes de equilíbrio em nano-elementos e os possíveis fatores que possam controlá-los, como as dimensões físicas e o acoplamento de interface. A partir destes resultados, utilizaremos a equação *LLG* - *Landau-Lifshitz-Gilbert*, dada por:

$$\frac{dM}{dt} = -\gamma_G [M \times H_{eff}] + \frac{\alpha_G}{M_s} \left[ M \times \frac{dM}{dt} \right] \quad (5.1)$$

onde  $M_s$  é a magnetização de saturação,  $H_{eff}$  é o campo efetivo,  $\alpha_G$  é o parâmetro de amortecimento de Gilbert e  $\gamma_G$  é a média giromagnética, para o cálculo da dinâmica da magnetização.

A partir da incorporação desta equação ao algoritmo, poderemos simular o espectro de emissão e a potência emitida em um nanoelemento que contém vórtices para confirmarmos as hipóteses feitas neste documento e os resultados experimentais já publicados sobre a sincronização da dinâmica de múltiplos vórtices.

# Referências Bibliográficas

- [1] S. Tehrani, B. Engel, J. M. Slaughter, E. Chen, M. DeHerrera, M. Durlam, P. Naji, R. Whig, J. Janesky, and J. Calder *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 36, p. 5, 2000.
- [2] S. S. P. Parkin, K. P. Roche, M. G. Samant, P. M. Rice, and R. B. B. et al. *J.Appl.Phys.*, vol. 85, p. 5828, 1999.
- [3] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. V. Dau, and F. Petroff *Phys. Rev. Lett.*, vol. 61, p. 2472, 1988.
- [4] G. Binasch, P. Grunberg, F. Saurenbach, and W. Zinn *Phys. Rev. B*, vol. 29, p. 4828, 1989.
- [5] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism made simple*. World Scientific, 2006.
- [6] J. B. Porta *Natural Magic, reprinted by Basic Books NY*, 1957.
- [7] G. O. G. Rebouças, *Nucleação de Vórtices e Paredes de Domínio em Nanoestruturas Magnéticas*. Tese de Doutorado apresentada à Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 2010.
- [8] G. Bertotti, *Hysteresis in Magnetism*. Academic Press, 1998.
- [9] A. Morish, *The Physical Principles of Magnetism*. IEEE Press, 1966.

- [10] W. Scholz, *Micromagnetic Simulation of Thermally Activated Switching in Fine Particles*. Tese de Doutorado, Applied and Engineering Physics, Vienna University of Technology, 1999.
- [11] Porrati and M. Huth *Appl. Phys. Lett.*, vol. 85, 2004.
- [12] M. Grimsditch, G. K. Leaf, H. G. Kaper, D. A. Karpeev, and R. E. Camley *Phys. Rev. B*, vol. 69, 2004.
- [13] K. Piao, D. Li, and D. Wei *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 303, 2006.
- [14] O. Fruchart, J.-P. Nozières, W. Wernsdorfer, and D. Givord *Phys. Rev. Lett.*, vol. 82, 1999.
- [15] T. Okuno, K. Mibu, and T. Shinjo *J. Appl. Phys.*, vol. 95, 2004.
- [16] D. D. Tang and Y.-J. Lee, *Magnetic Memory*. Cambridge University Press, 2010.
- [17] J.-G. Zhu, Y. Zheng, and G. A. Prinz *J. Appl. Phys.*, vol. 87, 2000.
- [18] F. G. Aliev, A. A. Awad, D. Dieleman, A. Lara, V. Metlushko, and K. Y. Guslienko *Phys. Rev. B*, vol. 84, 2011.
- [19] K. D. Machado, *Teoria do Eletromagnetismo vol. 02*. Editora UEPG, 2000.
- [20] S. Kaka, M. R. Pufall, W. H. Rippard, T. J. Silva, S. E. Russek, and J. A. Katine *Nature Publishing Group*, vol. 437, p. 389, 2005.
- [21] G. Salazar-Alvarez, J. J. Kavich, J. Sort, A. Mugarza, S. Stepanow, A. Potenza, H. Marchetto, S. S. Dhesi, V. Baltz, B. Dieny, A. Weber, L. J. Heyderman, J. Nogués, and P. Gambardella *Appl. Phys. L.*, vol. 95, 2009.



# Apêndice A

## Produção Bibliográfica

1. Felipe F. Oliveira, Thiago R. S. Moura, A. S. Carriço, Ana L. Dantas, and G. O. G. Rebouças "Controlling the core-to-core distance of vortex pairs in exchange biased iron elliptical nanoelements", J. Appl. Phys., publicado em 10 de fevereiro de 2012  
- ver online: [http : //dx.doi.org/10.1063/1.3670978](http://dx.doi.org/10.1063/1.3670978).

## Controlling the core-to-core distance of vortex pairs in exchange-biased iron elliptical nanoelements

Felipe F. Oliveira,<sup>1</sup> Thiago R. S. Moura,<sup>1</sup> A. S. Carrico,<sup>1,a)</sup> Ana L. Dantas,<sup>2</sup> and G. O. G. Rebouças<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, RN 59072-970, Brasil

<sup>2</sup>Departamento de Física, Universidade do Estado do Rio Grande do Norte, Mossoró, RN 59610-210, Brasil

<sup>3</sup>Departamento de Física, Universidade Federal do Semi-Arido, Angicos, RN 59515-000, Brasil

(Presented 3 November 2011; received 23 September 2011; accepted 14 October 2011; published online 10 February 2012)

We report a theoretical study of vortex pairs in exchange-biased elliptical iron nanoelements. We show that the remanent state may be tailored to fit vortex pairs with opposite chiralities separated by a diamond-like domain. Flat nanoelements with lateral dimensions ranging from  $115 \text{ nm} \times 425 \text{ nm}$  to  $195 \text{ nm} \times 425 \text{ nm}$  have the core-to-core distance tunable by the interface field strength. © 2012 American Institute of Physics. [doi:10.1063/1.3670978]

The remanent state of elliptical nanoelements can be designed to fit a vortex pair along the major axis by tailoring the nanoelement aspect ratio and controlling the nucleation mechanism. Vortex pairs with opposite or with the same chiralities have been reported.<sup>1–5</sup> Controlling the distance between vortex cores may be attractive for the purpose of tailoring the vortex core size and polarity, as well as the vortex pair excitations.<sup>6–8</sup>

We show presently that one may control the vortex pair structure of soft nanoelements by exchange bias.

Nano-patterning soft ferromagnetic materials leads to an enhancement of demagnetizing field effects.<sup>9</sup> Under appropriate size limits, the competition between the dipolar and the intrinsic exchange fields may favor the formation of flux closure states, such as single vortex and double vortex states.<sup>3</sup>

Interface exchange coupling to a large uniaxial anisotropy antiferromagnetic substrate adds an extra means of tailoring the magnetic pattern. Larger areas with interface spins parallel to the interface field are favored. Thus, there are good chances of breaking the balance between dipolar and intrinsic exchange energies and changing the magnetic structure of a vortex pair.

In this paper, we report a theoretical study of vortex pairs in exchange-biased elliptical iron nanoelements. We consider flat iron nanoelements, with height of the order of the iron exchange length, and lateral dimensions ranging from  $115 \text{ nm} \times 425 \text{ nm}$  to  $195 \text{ nm} \times 425 \text{ nm}$ .

Choosing flat nanoelements restricts the possible magnetic states. Only magnetic states uniform along the normal to the surface are allowed. Thus, one may focus on effects of the lateral dimensions.

We show that there is a large impact of the nucleation process and the strength of the interface field in the magnetic pattern of vortex pairs. Furthermore, the modifications induced by interface bias are larger for narrow nanoelements.

The core-to-core distance may be tuned to vary from 50% up to twice the unbiased value for the Fe  $115 \text{ nm} \times 425 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$  nanoelement. For Fe  $195 \text{ nm} \times 425 \text{ nm}$

$\times 20 \text{ nm}$ , the core-to-core distance varies from 56% up to 175% of the unbiased value. As shown in Fig. 1, this corresponds to maximum compression and stretching of the core-to-core distance for these nanoelements.

The uniaxial anisotropy easy axis and the interface field are both in-plane and along the minor axis ( $x$  axis), and the antiferromagnetic substrate is held frozen in the antiferromagnetic order. The major axis is along the  $y$ -axis.

We use cubic simulation cells with edge  $d = 5 \text{ nm}$ , and the energy density is given by

$$E = \frac{A}{d^2} \sum_j \sum_k (1 - \hat{m}_j \cdot \hat{m}_k) - M_S \vec{H}_{int} \cdot \sum_i \hat{m}_i - M_S \vec{H} \cdot \sum_j \hat{m}_j - K \sum_j (m_j^x)^2 + \frac{M_S^2}{2} \sum_j \sum_k \left( \frac{\hat{m}_j \cdot \hat{m}_k}{n_{jk}^3} - \frac{3(\hat{m}_j \cdot \hat{n}_{jk})(\hat{m}_k \cdot \hat{n}_{jk})}{n_{jk}^5} \right), \quad (1)$$

where the first term is the intrinsic exchange energy of nearest-neighbor cells and  $A$  is the exchange stiffness. The second term is the interface exchange energy, restricted to the interface cells. The third and fourth terms are the Zeeman and anisotropy energies, and the last term is the magneto-static energy.  $M_S$  is the saturation magnetization,  $\hat{m}_i$  is the direction of the magnetic moment of the  $i$ -th cell, and  $n_{ij}$  is the distance between the cells  $i$  and  $j$  in units of cell size  $d$ .

For the iron magnetic parameters, we use  $M_S = 1.7 \times 10^6 \text{ A/m}$ ,  $A = 2.5 \times 10^{-11} \text{ J/m}$  and  $K = 4.7 \times 10^{-4} \text{ J/m}^3$ . The effective exchange field, coupling neighboring cells, is  $H_E = A/M_S d^2$ .

For each value of the external field strength, the equilibrium configuration is found by seeking a set of directions of the moments in all cells ( $\hat{m}_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ ), which makes the torque smaller than  $10^{-26} \text{ J}$  in any one of the cells.<sup>3,9</sup>

We have found that unbiased nanoelements display a double vortex pattern consisting of vortex cores with opposite chirality separated by a diamond-like domain (see panels in Fig. 2). The vortex-domain-vortex (VDV) pattern is stable for positive and negative values of the interface exchange field.

<sup>a)</sup>Electronic mail: ascarrico@gmail.com.

07D102-2

Oliveira *et al.*

J. Appl. Phys. **111**, 07D102 (2012)

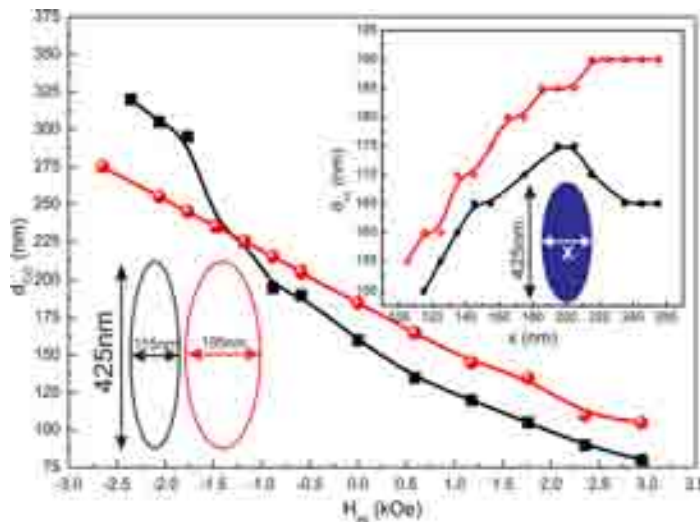


FIG. 1. (Color online) Interface field effect on the core-to-core distance of Fe 115 nm × 425 nm × 20 nm (square symbol curve) and Fe 195 nm × 425 nm × 20 nm (circle symbol curve). In the inset, we show the core-to-core distance of unbiased Fe x(nm) × 425 nm, with height of 15 nm (square symbol curve) and 20 nm (circle symbol curve).

We start from saturation at large values of the external field (6 kOe suffices for all nanoelements in this study), and the equilibrium pattern for a given value of the external field is used as the initialization pattern for the next value of the external field. The remanent state is found by starting from saturation with the external field either parallel or opposite to the interface field direction. Each case corresponds to a nucleation process, leading to either decreasing or increasing the core-to-core distance, as compared with the unbiased value.

As shown in Fig. 2 for an unbiased Fe 195 nm × 425 nm × 20 nm, the nucleation of a non-uniform phase occurs at an external field of 0.7 kOe and corresponds to a curling state.<sup>4</sup> At point A, for an external field value of 0.4 kOe, a VDV state is formed with most of the magnetic moments along the external field direction. The domain between the vortex cores has the magnetization aligned opposite to the external field, and the core-to-core distance is 115 nm (see panel A in Fig. 2).

By further reducing the external field and the Zeeman energy, the central domain and the core-to-core distance get larger, reaching a core-to-core distance of 185 nm at remanence (H = 0).

For an interface field pointing opposite (parallel) to the external field, the separation between vortex cores gets larger (smaller) at remanence. Panel C of Fig. 2 shows the vortex pair for an interface field of 1.7 kOe with a core-to-core distance of 110 nm (60% of the unbiased value –185 nm).

The vortex pair pattern of narrow nanoelements is likely to suffer a larger impact of interface bias. The interface field produces modifications of the balance between dipolar and intrinsic energies, favoring larger areas with spins aligned with the interface field direction. This requires larger changes of the core-to-core distance in the case of narrow nanoelements.

The unbiased Fe 195 nm × 425 nm × 20 nm nanoelement displays a vortex pair with core-to-core distance of 185 nm,

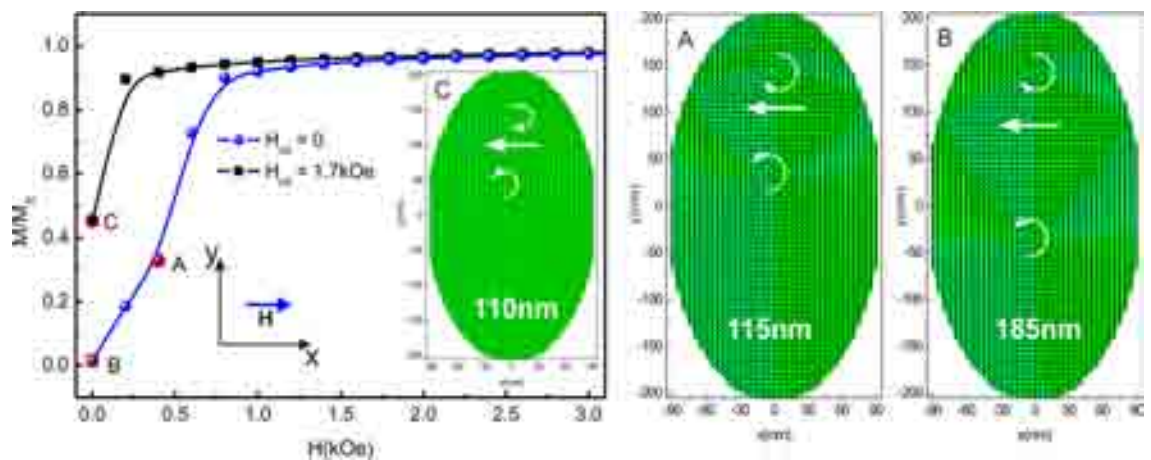


FIG. 2. (Color online) Magnetization of an unbiased (circle symbol curve) and interface biased (square symbol curve) 195 nm × 425 nm × 20 nm iron nanoelement. The panels show the magnetic structure at the vortex nucleation field (A) and at remanence (B) for the unbiased nanoelement. Panel C shows the magnetic pattern of the interface-biased nanoelement for an interface field strength of 1.7 kOe. The number in each panel is the value of the core-to-core distance.

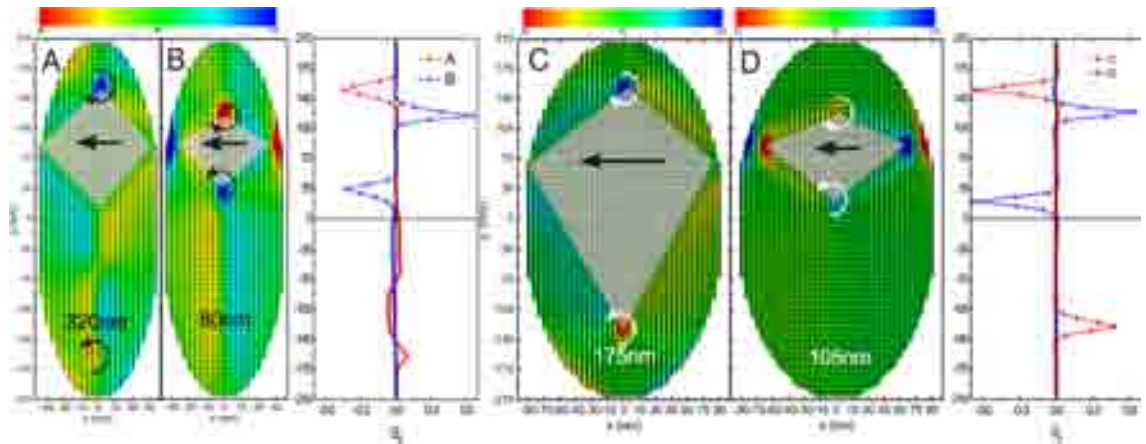


FIG. 3. (Color online) Magnetic phases for maximum stretching and compression of the core-to-core distance of the Fe  $115 \text{ nm} \times 425 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$  nanoelement (panels A and B) and the Fe  $195 \text{ nm} \times 425 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$  nanoelement (panels C and D). We also show the  $z$ -component of the magnetization along the  $y$ -axis. The number in each panel is the value of the core-to-core distance, and the color bar code indicates the values of the angle with the  $z$ -axis.

which is around 45% of the major axis length. Exchange bias produces a large variation of the core-to-core distance, ranging from 105 nm for  $H_{int} = 2.9 \text{ kOe}$ , up to 275 nm (65% of the major axis length) for  $H_{int} = -2.64 \text{ kOe}$  (opposite to the external field).

Exchange bias produces larger effects in the Fe  $115 \text{ nm} \times 425 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$  nanoelement. The core-to-core distance for the unbiased nanoelement is 160 nm (around 38% of the major axis length). In this case, the overall change in the core-to-core distance is from 80 nm up to 320 nm.

In Fig. 3, we also show the polarity of vortex pair cores. As seen in the plots of  $S_z$ , the polarity of vortex cores of Fe  $195 \text{ nm} \times 425 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$  does not vary much with compression or stretching of the core-to-core distance. On the other hand, there is a large variation of  $S_z$  from core to core for the Fe  $115 \text{ nm} \times 425 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$  nanoelement. When the cores are compressed together, the values of  $S_z$  are almost the same for both cores. However, for large stretching, there is a large asymmetry: one of the vortex cores has a negligible  $S_z$ -component and is located at the far end of the nanoelement, away from the diamond domain corner.

In summary, we have shown that the magnetic structure of vortex pairs of Fe nanoelements can be largely influenced by interface exchange biasing. The core-to-core distance may be largely tuned by the interface field in narrow nanoelements.

In the Fe  $115 \text{ nm} \times 425 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$ , the core-to-core distance may be varied from 19% and 75% of the major axis. This also applies to thinner nanoelements ( $h = 15 \text{ nm}$ ), and the inset in Fig. 1 may indicate the range of core-to-core distances one may achieve by interface bias.

We note that the control of the distance between the cores of vortex pairs may be a key issue for the synchronization of vortex pair dynamics. Interface bias may thus be helpful in designing the spectra of tunnel junction nano-oscillators.

The authors acknowledge financial support from CNPq, CAPES, and FAPERJ. The work of A.S.C. was supported by CNPq Grant No. 350773 and the work of A.L.D. was supported by CNPq Grant No. 309676.

<sup>1</sup>T. Okunio, K. Mibu, and T. Shinjo, *J. Appl. Phys.* **95**, 3612 (2004).

<sup>2</sup>K. S. Buchanan *et al.*, *Nature Phys.* **1**, 172 (2005).

<sup>3</sup>A. S. M. Silva, A. L. Dantas, G. O. G. Reboças, and A. S. Carriço, *J. Appl. Phys.* **109**, 07D314 (2011).

<sup>4</sup>N. A. Usov, C. R. Chang, and Z. H. Wei, *Phys. Rev. B* **66**, 184431 (2002).

<sup>5</sup>P. Vavassori, *et al.*, *Phys. Rev. B* **69**, 214404 (2004).

<sup>6</sup>F. B. Mancoff, N. D. Rizzo, B. N. Engel, and S. Tehrani, *Nature Lett.* **437**, 393 (2005).

<sup>7</sup>S. Kaka *et al.*, *Nature Lett.* **437**, 389 (2005).

<sup>8</sup>M. van Kampen, L. Lagae, G. Hrkac, T. Schrefl, J.-V. Kim, T. Devolder, and C. Chappert, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42**, 245001 (2009).

<sup>9</sup>G. O. G. Reboças, A. S. W. T. Silva, A. L. Dantas, R. E. Camley, and A. S. Carriço, *Phys. Rev. B* **79**, 104402 (2009).