



Modelo de Ising para determinação de propriedades magnéticas de materiais ferromagnéticos

**David da Silva Jatobá¹, Diego Souza de Sena¹, Alice Mota Lima², Anne Karollyne Lima Azevedo²,
Diego Oliveira de Jesus², Vagson Luiz de Carvalho Santos³**

¹Estudantes do curso Técnico em Agropecuária do IFBaiano, Campus Senhor do Bonfim – BA. Bolsistas PROPES IFBaiano

²Estudantes do curso Técnico em Agropecuária do IFBaiano, Campus Senhor do Bonfim – BA

³Professor de Física do IF Baiano, Campus Senhor do Bonfim - BA; e-mail: vagson.santos@ufv.br

Resumo: Nanomagnetismo é uma área em constante expansão, em especial, devido aos recentes avanços na fabricação de nanoestruturas, bem como suas potenciais aplicações em armazenamento de dados e terapias anticâncer. Diversos trabalhos têm sido desenvolvidos no intuito de investigar, teórica e experimentalmente, propriedades de partículas magnéticas nanoestruturadas. Apesar dos diversos resultados encontrados, pouca atenção tem sido dada a efeitos de curvatura em tais propriedades. Neste trabalho, propomos a análise do modelo de Ising para materiais magnéticos no intuito de realizar simulações computacionais prevendo propriedades magnéticas de materiais. Pretendemos com isso, compreender teoricamente a fenomenologia por trás do magnetismo e formar futuros pesquisadores na área.

Palavras-chave: Magnetismo, modelo de Ising, nanotecnologia, simulações computacionais.

1. INTRODUÇÃO

O nanomagnetismo vem despertando grande interesse científico e tecnológico nas últimas décadas. Espera-se, dentre outras consequências, inúmeras possibilidades de aplicações utilizando nanoestruturas ferromagnéticas e, do ponto de vista de pesquisa fundamental em Física, uma melhor compreensão das propriedades elementares de materiais magnéticos nessa escala de tamanho. De fato, o avanço na tecnologia de fabricação de estruturas em escala micro e nanométrica abriu a possibilidade de estudar estruturas que se comportam como sistemas magnéticos quase unidimensionais, os quais exibem uma variedade de estados magnéticos interessantes, com possíveis aplicações em elementos eletrônicos. Como exemplo, podemos citar aplicações em memória lógica, armazenamento de dados e sensores de alta sensibilidade [1]. Mais especificamente, a melhoria na performance e capacidade de discos rígidos deverá demandar que sua própria estrutura venha a ser composta por arranjos de nanoelementos magnéticos [2,3], os quais já têm sido considerados como constituintes de memória de computadores [4].

O aumento do interesse em pesquisas nessa área de conhecimento se deve também, à recente proposta de utilizar microdiscos, com vórtices magnéticos, como estado fundamental em terapias anticâncer. Nesta proposta, há a indução de um atrito mecânico devido à oscilação dos microdiscos mediante um campo magnético aplicado com frequência de algumas dezenas de Hertz. Tal procedimento parece ativar certos canais de cálcio intracelular que desencadeia a programação da morte da célula (apoptose). Frequentemente, aplicações tecnológicas de nanomagnetos são baseadas em novos mecanismos magneto-eletrônicos que demandam o controle de estados estáveis de magnetização, como domínios únicos, paredes de domínio, vórtices, etc. Por fim, nanomagnetos são uns excelentes laboratórios experimentais para se estudar teoremas fundamentais em magnetostática e micromagnetismo [5,6,7].

O comportamento dos materiais magnéticos depende não apenas de sua estrutura molecular, mas também da geometria e da competição entre as energias magnetostática, de troca e de anisotropia. Com relação a isso, um dos teoremas mais fundamentais sobre estruturas magnéticas é por conta de Brown [8,9], o qual estabelece que, por causa da competição entre a energia magnetostática e a de troca, a formação de multidomínios deveria ser suprimida para partículas muito pequenas, de forma que nanomagnetos se comportariam como uma estrutura com spin gigante. Nesse contexto, dentre os possíveis estados magnéticos para nanomagnetos circulares, a maioria dos trabalhos dá atenção a três

deles: a configuração vórtice, onde a magnetização forma uma estrutura de circulação de spins, sem polos magnéticos; domínio único, o qual aparece em nanomagnetos alongados ou muito pequenos, sendo que os momentos magnéticos estão completamente alinhados; e o estado cebola, consistindo de um estado de domínio único com uma pequena não uniformidade (momentos magnéticos não são paralelos entre si) na magnetização próxima às bordas do magneto. O fato de essas três configurações serem as mais estudadas teoricamente se deve a importância de sua aplicação tanto em trabalhos experimentais quanto em microssimulação. Tais trabalhos mostram que essas são as configurações que aparecem e se mantêm estáveis em nanomagnetos.

Inúmeros trabalhos têm se dedicado a determinar a configuração da magnetização que minimiza a energia em nanomagnetos. Dentre as diversas geometrias estudadas, as retangulares e cilíndricas são aquelas que têm recebido mais atenção, uma vez que sua simplicidade geométrica as torna de mais fácil fabricação e, eventualmente, permitem uma melhor comparação entre pesquisas teóricas e experimentais. Como exemplo, podemos citar os trabalhos dedicados a estudar nanodiscos [10,11], os quais apontam que a configuração vórtice se torna o estado de menor energia quando o raio do nanomagneto é maior do que um raio crítico R_c (da ordem de 45 nm para o Permalloy). Nos nanodiscos, o vórtice apresenta um núcleo, o qual se forma para evitar um aumento exacerbado da energia de troca. Dessa forma, por causa do alto custo tanto da energia magnetostática devido a cargas magnéticas superficiais quanto da energia de troca associada a tal estrutura, esse vórtice tende a se desestabilizar em nanodiscos com a redução de seu raio ou aumento da espessura [12]. Estudos experimentais mostram que nanodiscos circulares de cobalto (Co) e de Permalloy (Py) (FeNi, na proporção aproximada de 20% de ferro e 80% de níquel), o vórtice é estável para diâmetros >90 nm e espessura <15 nm [12,13]. A instabilidade do vórtice com a redução do raio também é uma característica de nanoanéis, os quais consistem em nanodiscos cilíndricos com um buraco central. Entretanto, a presença desse buraco impede a formação do núcleo, tornando o vórtice uma estrutura mais estável nessa geometria, fazendo com que o diâmetro crítico diminua para valores da ordem de 50 nm, com espessura crítica da ordem de 5-6 nm. Nanoanéis ideais devem ter não somente um raio interno e externo bem definidos, mas também uma espessura pequena o suficiente para tornar a configuração vórtice estável [14], uma vez que, com o aumento da espessura, a configuração ferromagnética na direção do eixo z, apontando perpendicularmente ao plano do anel, torna-se energeticamente favorável.

Do ponto de vista de modelos teóricos para o cálculo da energia total de um magneto, precisa-se determinar, com algumas aproximações, as contribuições da energia de troca e magnetostática para a energia do nanomagneto [4,5,6]. Em geral, a energia magnetostática é mais difícil de ser computada devido às interações entre dipolos, as quais são de longo alcance. Para configurações especiais, como vórtices ou estados alinhados, e/ou geometrias simples, como aquelas sem curvatura, por exemplo, planar ou cilíndrica, sua avaliação é simplificada e, algumas vezes, pode ser computada exatamente. No caso de situações mais gerais, as ferramentas disponíveis nos permitem apenas realizar aproximações, como por exemplo, tomar o magneto como um contínuo (tratamento analítico) e/ou avaliar numericamente para a energia [15]. Para os casos específicos de geometrias cilíndrica e quadrada, uma considerável quantidade de informação está disponível e, os dados teóricos têm um bom acordo com aqueles obtidos experimentalmente. Em outras geometrias, um conhecimento mais detalhado ainda está em desenvolvimento, embora alguns trabalhos explorando outras geometrias já venham sendo realizados com nanoesferas magnéticas [16,17], nanofios [18], nanotubos [19], nanoanéis [20] e nanotoros [21,22].

Nesse contexto, torna-se relevante a determinação da energia de troca em nanomagnetos, sendo os principais modelos conhecidos para isso os modelos de Heisenberg e Ising. O último modelo citado é o objeto de estudo deste trabalho. Uma vez que este consiste em um trabalho de iniciação científica júnior, desejamos determinar propriedades básicas de um material magnético, como a influência da temperatura na magnetização, suscetibilidade magnética e transição de fase de um material magnetizado para um material sem magnetização. Nesse caso, exploramos o algoritmo de Metrópolis, utilizando o método de Monte Carlo no intuito de determinar tais propriedades. Apesar da aplicação

do algoritmo de Metrópolis, no âmbito do modelo de Ising, na simulação do comportamento de materiais magnéticos, ser algo muito bem conhecido e exaustivamente explorado, a conquista chave deste trabalho consiste na formação de futuras gerações de pesquisadores na área de magnetismo de materiais. Nesse contexto, este trabalho tem a função social de incentivar e iniciar os autores a estudar o comportamento de materiais, o que formará o pensamento crítico e os encorajará a continuar com trabalhos de pesquisa durante sua carreira acadêmica ao ingressar numa universidade.

2. MATERIAL E MÉTODOS

Inicialmente, realizamos um levantamento bibliográfico para compreender as propriedades fundamentais de materiais magnéticos, bem como aprender a linguagem de programação Fortran, a qual foi utilizada para implementar o algoritmo de Metrópolis. Além disso, iniciamos um estudo sobre o modelo de Ising para determinação da energia de troca.

Num segundo momento, iniciamos a escrita do algoritmo para determinar as propriedades magnéticas dos materiais. Uma vez que não dispúnhamos de um computador com processamento rápido, realizamos apenas 10000 passos de Monte Carlo para retirar as médias nos valores de magnetização, suscetibilidade e calor específico do material. Contamos como um passo de Monte Carlo a quantidade referente a 400 sorteios na rede construída pelo programa.

Utilizamos uma rede quadrada de 20x20 com condições de contorno periódicas, isto é, o último sítio da rede interage com o primeiro, com o objetivo de simular uma rede infinita de momentos magnéticos (spins). O modelo de Ising estabelece que a energia que faz com que os momentos magnéticos permaneçam alinhados paralelamente, num material ferromagnético vem da interação entre spins vizinhos, na forma $E = -J \sum_i S_i \cdot S_j$, onde J é uma constante de acoplamento, \sum representa a soma entre os sítios vizinhos i e j . S assume os valores $+1$ para o spin apontando para cima e -1 quando ele aponta para baixo.

Finalmente, o algoritmo de Metrópolis consiste no seguinte procedimento: sorteamos um sítio na rede e mudamos seu estado de spin, isto é, se ele for $+1$, alteramos para -1 e se ele for -1 , alteramos para $+1$. Calculamos então a nova energia do sistema. Se for menor do que a anterior, mantemos o sistema no novo estado, caso seja maior, realizamos um sorteio de um número aleatório entre 0 e 1 e comparamos com a probabilidade de mudança de estado $p = \exp[-J/k_B T]$, onde k_B é a constante de Boltzman. Se a probabilidade for menor do que o número aleatório sorteado anteriormente, mudamos o estado, caso contrário, mantemos o estado anterior do sistema. Esse modelo consegue representar as propriedades fundamentais de materiais magnéticos.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após o desenvolvimento do código Fortran, implementamos o algoritmo de Metrópolis, utilizando 10000 passos de Monte Carlo. O tempo de simulação computacional ficou em torno de um dia, devido ao baixo rendimento do processador que tínhamos a disposição para trabalhar. Após compreender o modelo de Ising, estruturamos uma rede 20x20. Na figura 1 representamos alguns desses sítios, cada um com seu momento magnético. O estado de menor energia é aquele no qual os spins estão todos alinhados.

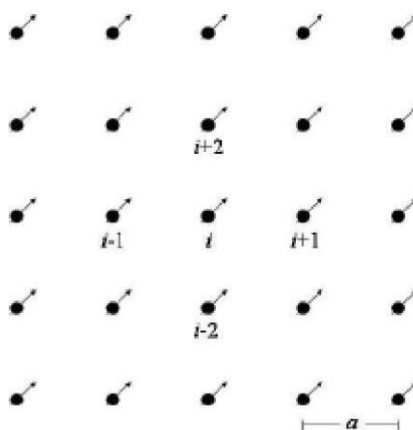


Figura 1

Após as simulações, determinamos o valor da magnetização do sistema em função da temperatura, observando que à medida que a temperatura do magneto aumenta, sua magnetização diminui, havendo uma transição de fase de um sistema magnetizado para um sistema de magnetização nula a uma temperatura de aproximadamente 2.25 unidades de J. Essa temperatura se aproxima daquela prevista pela solução de Onsager para a rede quadrada, que é de 2,269... unidades de J [23]. Podemos observar ainda que na temperatura de transição de fase, o calor específico do sistema possui um pico na temperatura crítica de transição de fase. Para um magneto real, a temperatura de transição de fase é chamada de temperatura de Curie.

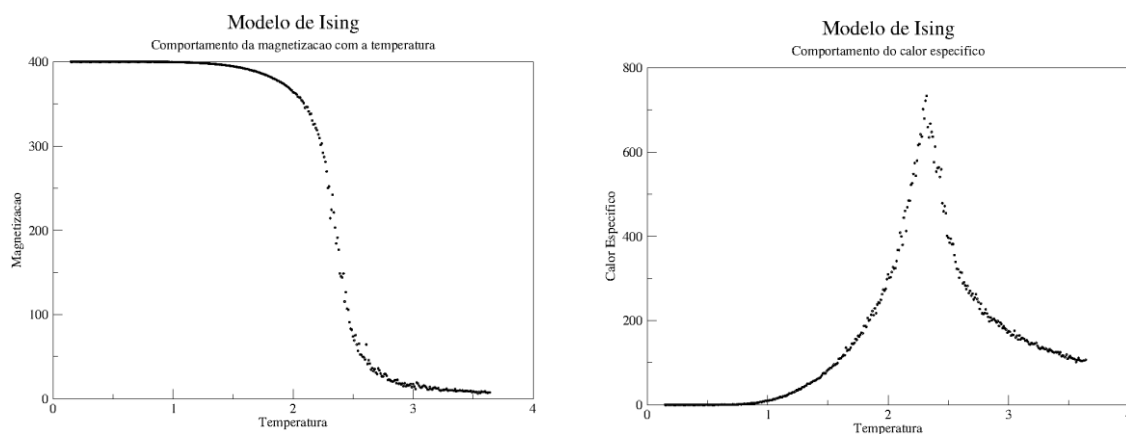


Figura 2: Comportamento da magnetização (esquerda) e do calor específico (direita) em função da temperatura. Observamos uma transição de fases a uma temperatura de aproximadamente 2,25 unidades de J.

Os resultados obtidos são dados preliminares, uma vez que foram realizados poucos passos de Monte Carlo. Uma perspectiva é aumentar o número de passos para refinar os dados no cálculo das médias de magnetização e calor específico, para obter um gráfico mais suave e com menos flutuações. Além disso, o presente trabalho consiste em uma preparação para futuras pesquisas a serem realizadas em nanomagnetismo. Dentre as principais perspectivas de trabalho futuro, encontram-se o desenvolvimento de um algoritmo que descreva os modelos de Ising e Heisenberg em geometrias curvas. Cálculos analíticos também serão pré-formados no intuito de determinar os efeitos de curvatura n , estado fundamental de magnetização em nanomagnetos curvos. Finalmente, pretendemos propor um modelo tipo Ising para estudar gelos de spin artificiais, que tem sido amplamente discutido recentemente.

4. CONCLUSÕES

O modelo de Ising foi estudado numa rede quadrada com condições de contorno periódicas. Utilizando o Método de Monte Carlo e o algoritmo de Metrópolis, determinamos propriedades magnéticas de um material ferromagnético. Dentre os principais resultados, encontramos uma



temperatura crítica de transição de fase e um pico no calor específico do material a essa temperatura. Apesar de ser um trabalho cujos resultados são bem estabelecidos, os resultados aqui apresentados têm o importante papel de inserir jovens de Ensino Médio em pesquisa científica, em especial numa área em constante expansão, a nanotecnologia.

Pretendemos, num futuro próximo, determinar efeitos de curvatura no modelo e propor um modelo tipo Ising para gelos de spin artificiais.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a PROPES do IF Baiano pelo suporte financeiro.

REFERÊNCIAS

- [1] WHITE, R. L., NEW, R. M. H., PEASE, R. F. W., **IEEE Trans. Magn. Vol 33**, p. 990, 1997 .
- [2] COWBURN, R. P., **J. Phys. D: Appl. Phys. Vol 33**, p. R1, 2000.
- [3] COWBURN, R. P., **J. Magn. Mag. Mat. Vol 242-245**, p. 505, 2002.
- [4] AHARONI, A., **Introduction to the theory of ferromagnetism**, Oxford Univ. Press, 1996.
- [5] GUIMARÃES, A. P., **Magnetismo e Ressonância Magnética em Sólidos**, Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009.
- [6] GUIMARÃES, A. P., **Principles of Nanomagnetism**, Springer Verlag, 2009.
- [7] BROWN, W. F., **J. Appl. Phys. Vol 39** p. 993, 1968.
- [8] BERTOTTI, G., **J. Magn. Mag. Mat. Vol 320**, p.2436, 2008.
- [9] ABOLFATH, R. M. , HAWRYLAK, P., **Phys. Rev. B Vol 77**, p. 165430, 2008.
- [10] PEREIRA, A. R. **Phys. Rev. B Vol 71**, p. 224404, 2005.
- [11] COWBURN, R. P., KOLTISOV, D. K., ADEYEYE, A. O., WELLAND, M. E., TRICKER, D. M., **Phys. Rev. Lett. Vol 83**, p. 1042, 1999.
- [12] GUSLIENKO, K. Y., NOVOSAD, V., **J. Appl. Phys. 96**, p.4451, 2004.
- [13] ZHU, F. Q., CHERN, G. W., TCHERNYSHYOV, O., ZHU, X. C., ZHU, J. G., CHIEN, C. L., **Phys. Rev. Lett. Vol 96**, p. 027205, 2006.
- [14] KRAVCHUK, V. P., SHEKA, D. D., GAIDIDEI, Y. B., **J. Appl. Phys. Vol 310**, p. 116, 2007.
- [15] GOLL, D., MACKE, S., BERKOWITZ, A. E., BERTRAM, H. N., **Physica B Vol 372**, p. 282, 2006.



- [16] RUSSIER, V., **J. Appl. Phys. Vol 105**, p. 073915, 2009.
- [17] GETZLAFF, **Fundamentals of Magnetism**, Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [18] LAROSE, D., ESCRIG, J., LANDEROS, P., ALTBIR, D., VÁZQUEZ, M., VARGAS, P., **Nanotechnology Vol 18**, p. 415708, 2007.
- [19] ESCRIG, J., ALLENDE, S., ALTBIR, D., BAHIANA, M., **Appl. Phys. Lett. 93**, p. 023101, 2008.
- [20] KLÄUI, M., VAZ, C. A. F., LOPEZ-DIAZ, L., BLAND, J. A. C., **J. Phys.: Condens. Matter Vol 15**, p. R985, 2003.
- [21] CARVALHO-SANTOS, V. L., MOURA, A. R., MOURA-MELO, W. A., PEREIRA, A. R., **Phys. Rev. B Vol 77**, p. 134450, 2008.
- [22] CARVALHO-SANTOS, V. L., MOURA-MELO, W. A., PEREIRA, A. R., **Journ. Appl. Phys. Vol 108**, p. 094310, 2010.
- [23] SALINAS, S. R. A., **Introdução à Física Estatística**, Edusp, São Paulo, 2005.