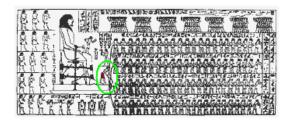
# Competição em diferenstes sistemas físicos

Defesa de produção inteletual

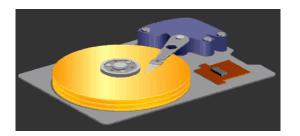
Evy A. Salcedo Torres

27 junho de 2009

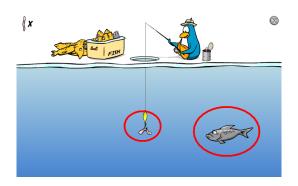
#### **Nanoatrito**



## Nanomagnetismo



## **Agua**

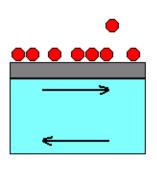


## Competição, o ingrediente comum

É interesante como sistemas físicos aparentemente disconexos entre eles apresentam um ingrediente físico fundamental responsavel pelos seus comportamentos particulares. A competição de grandezas físicas específicas.

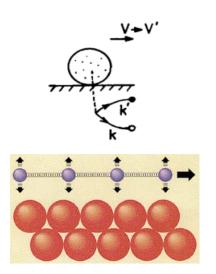
## **Nanoatrito**

### Motivação: A Microbalaça de quartzo



- Adaptada por A.
   Windom e J. Krim
   [PRE 49, 4154, 1994]
   para medir o atrito
   cinético em escala
   átomica.
- O atrito entre sólidos em nivel nanoscópico é viscoso, i.e. F \( \infty \)v

# Motivação: a microbalança de quartzo, resultados



Origem do atrito nanoscópico:

- eletrônica,  $\eta_e$ ,
- **2** fonônica,  $\eta_{ph}$

$$\eta = \eta_e + c u_0^2$$

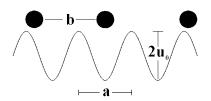
#### **Nanoatrito**

#### **Objetivo**

Caraterizar o atrito nanoscópico unidimensional

- Dependencias
- Causas

#### **Modelo**



$$m\frac{d^{2}x_{i}}{dt^{2}}=-m\eta_{e}\frac{dx_{i}}{dt}-\sum_{i}\frac{\partial V\left(\left|x_{i}-x_{j}\right|\right)}{\partial x_{i}}-\frac{\partial U\left(x_{i}\right)}{\partial x_{i}}+f_{i}+F_{ext},$$

$$V(x) = \varepsilon_0 \left[ \left( \frac{r_0}{x} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{x} \right)^6 \right], \qquad U(x) = u_0 \sin(\frac{2\pi}{a}x),$$

$$\langle \mathbf{f}_i(t) \rangle = 0, \qquad \langle \mathbf{f}_i(t), \mathbf{f}_j(t') \rangle = 2\eta_e k_B T \delta(t - t') \delta(i, j) / m$$



### **Medidas**

#### Comensuração:

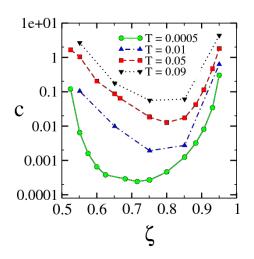
$$\zeta = a/b$$

Coeficiente de atrito:

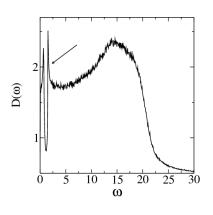
$$\eta_t = rac{ extstyle F_{ extstyle ext}}{ extstyle extstyle extstyle V_{ extstyle cm}}$$

- $\eta_t(\zeta)$
- S(k, t)
- D(ω)

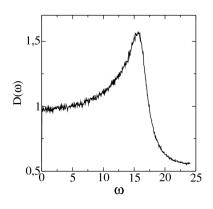
## **Resultado:** $c(\zeta)$ , $\eta_{ph} = c U_0^2$



## Resultado: $D(\omega)$

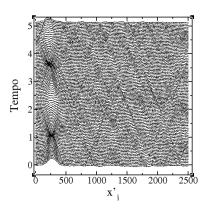


$$\zeta = 0.961, T = 0.05$$

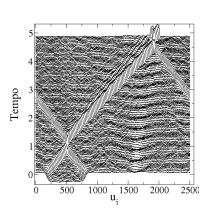


$$\zeta = 0.75, T = 0.05$$

# Deformações da rede $\zeta = 2/3$ , o par *kink*-antikink



Sem força aplicada



Com força aplicada



### **Conclusões**

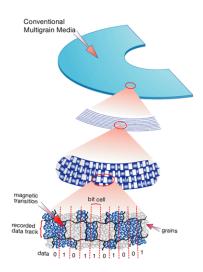
- O atrito fonônico é diretamente proporcional ao quadrado da amplitude de corrugação do substrato.
- As estruturas inibem certos modos de vibração que são excitados ao se aplicar a força sobre a cadeia de adatomos, ativando assim novos canais para a dissipação da energia de translação da cadeia.
- Quando há formação de kinks clássicos ( $\zeta = 2/3$ ) na cadeia de adatomos do atrito total é muito alto (efeito transiente).
- O potencial de interação desempenha um papel fundamental no atrito experimentado pelas partículas (**FK**  $\Rightarrow \eta_{ph} \approx 0$ ).

## **Publicação**

Salcedo E. S., Gonçalves S., Scherrer C. e Kiwi M.
 Nanoscale sliding friction versus commensuration ration:
 Molecular dynamics simulation. Physical Review B, v 73, p. 035434, 2006.

## Nanomagnetismo

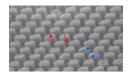
## Motivação: Gravação Magnética



Hitachi Global Storage Technologies

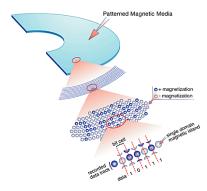
- Constituida por grão individuais que se comportam como magnetos independentes.
- Aumentar a capacidade de armazenamento implica em diminuir os grão.
- O límite superparamagnético permite atingir gãos de ≈ 10 nm, com estabilida témica de 10 anos.

## Motivação: Gravação Magnética



- Arranjos ordenados com anisotropia uniaxial.
- Escolha da orientação do eixo fácil.
- Aumento da capacidade de armazenamento em até 100 vezes.





## Hitachi Global Storage Technologies

## Nanomagnetismo

#### **Objetivo**

Caraterizar as propriedades físicas destes sistemas:

- Estrutura magnética interna
- Mecanismos de reversão

#### **Modelo**

- Arranjos de atomos fomando estrutura cilindrica ou tubular
- Considera-se a interação dipolar (longo alcance) e de "Exhange" (curto alcance)
- Utiliza-se a técnica de "scaling" a fim de reduzir o número de partículas ( $10^9 \rightarrow 10^3$ )
- Utiliza-se simulações de Monte Carlo para estudar a dinâmica

#### **Modelo**

A energia do sistema está dada por

$$E = \sum_{i} \sum_{j>i} E_{ij} - J_{ij} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j + E_a$$

onde  $E_{ij}$  é a energia dipolar

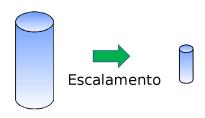
$$E_{ij} = ((\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j) - 3(\vec{m}_i \cdot \hat{n}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \hat{n}_{ij}))/r_{ij}^3$$

com  $r_{ij}$  a separação entre as partículas com momentos magnéticos  $\vec{m}_i$  e  $\vec{m}_i$ .

 $J_{ij} = J$  é o constante de "exchange" entre partículas vizinhas.

 $\vec{E_a} = -\sum_i \vec{m_i} \cdot \vec{H}_a$  é a contribuição do campo magnético externo

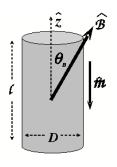
## "Scaling"



No método do scaling as dimensões físicas d, as interações h e a constante de "exchange" J, são reescaladas segundo [PRL 88, 237202, 2002]:

$$d' = d\chi$$
 $d' = h\chi^2$ 
 $d' = J\chi$ 

#### Resultados: Modos de Reversão em nanofios de Ni



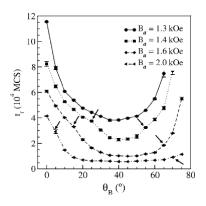
#### Para $\theta_B = 0$

- Para B < B<sub>min</sub> é necessario um pulso intenso para nuclear a parede de dominio.
- Para B<sub>max</sub> > B > B<sub>min</sub> A parede de dominio se desloca com velocidade constante.
- Para B > B<sub>max</sub> Se entra num regimem caotico onde se nucleam multiples paredes de dominio.

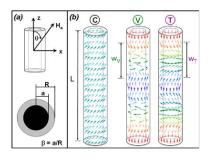
#### Resultados: Modos de Reversão em nanofios de Ni

#### Para $\theta_B \neq 0$

- O tempo de nucleação da parede muda devido à varaição da anisotropia de forma.
- Para 5° > θ<sub>B</sub> > 0° a reversão acontece via o modo do tipo tira-rolha.
- Para 15° > θ<sub>B</sub> > 5° a reversão acontece via o modo do tipo transversal.
- Para 20° > θ<sub>B</sub> > 15° a reversão acontece via o modo do tipo transversal em ambos extremos.
- Para 65° > θ<sub>B</sub> > 20° regimem caôtico, nucleação de multiplas paredes de dominio.



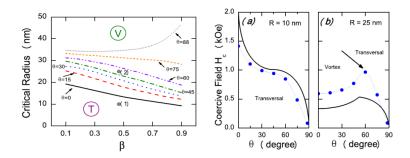
#### Resultados: Modos de Reversão em nanotubos de Ni



#### Para $\theta_B = 0$

- Se  $\beta = R_{int}/R_{ext} \le 1/3$  o modo de reversão é do tipo transversal.
- Se  $\beta = R_{int}/R_{ext} \ge 1/3$  o modo de reversão é do tipo vortice.

#### Resultados: Modos de Reversão em nanotubos de Ni



- A coercividade é maior no caso de tubos revertindo via modo transversal.
- O tipo de modo de reversão depende do raio R<sub>ext</sub>

### **Conclusões**

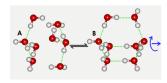
- Diferentes tipos de modos de reversão podem ser encontrados em nanofios e nanotubos.
- O tempo de reversão dimiue sensivelmente se o angulo  $\theta_B \approx 45^{\circ}$ .
- Nanotubos apresenta, um tempo de reversão muito pequeno ao igual que o tempo de nucleação.
- O modo de reversão influencia no valor da coercividade dos nanotubos.

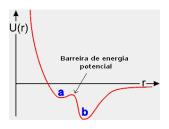
## **Publicações**

- P. Landeros, S, Allende, J. Escrig, E. Salcedo, D. Altbir. E.
   E. Vogel. Reversal modes in magnetic nanotube. Applied Physics Letter, v. 90, pg. 102501, 2007
- S, Allende, J. Escrig, D. Altbir, E. Salcedo, M. Bahiana. Angular dependence of the transverse and vortex modes in magnetic nanotube. The European physical Journal B, V 66, pg 37, 2008.
- S. Allende, D. Altbir, E. Salcedo, M. Bahiana, J. P. Sinnecker. Propagation of tranversal domain walls in homogeneous magnetic nanowires. Journal Applied Physics. v. 104, p. 013907, 2008.
- S. Allende, J. Escrig, D. Altbir, E. Salcedo, M. Bahiana. Magnetic bias in multiolayer nanowires, Submetido

## **Agua**

## Motivação: Anomalias na agua





- Agua é o líquido mais importante da Terra.
- Agua apresenta anomalia termodinâmica, dinâmica e estrutural