

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA**

**Análise micromagnética e desenvolvimento computacional aplicados a sistemas que apresentam
acoplamento de troca**

Rafael Cichelero

Dissertação realizada sob Orientação do Prof. Dr. Julian Penkov Geshev, apresentada ao Instituto de Física da UFRGS, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre
Fevereiro de 2015

Resumo

O presente estudo aborda a evolução temporal de filmes finos compostos por materiais ferro-antiferromagnéticos que apresentam interação de troca, visando a melhor compreensão da origem desse comportamento. Técnicas como a de irradiação iônica e tratamento térmico foram utilizadas para a modificação dos sistemas magnéticos em questão. Após submetidos a essas ferramentas de indução do efeito de *exchange bias* (viés de troca), as amostras foram expostas a campos magnéticos durante determinado intervalo de tempo à temperatura ambiente. Após realizada a exposição, a medida de histerese magnética era feita, seus os campos de interesse foram computados, e os resultados são expostos frente ao tempo de exposição há campo magnético.

As amostras apresentaram comportamentos distintos dependentes das técnicas de indução. Após irradiação iônica, o estado magnético permanece instável, devido a configuração energética imposta pela irradiação; desse modo efeitos térmicos de baixa amplitude podem fornecer energia para que a camada ferromagnética mude as orientações das magnetizações de grãos interfaciais. Por outro lado, o tratamento térmico promoveu ao sistema de interesse uma configuração energeticamente estável, eliminando ou reduzindo os efeitos térmicos induzidos pós-tratamento.

Além disso, o desenvolvimento de uma ferramenta computacional foi necessário na tentativa de obtenção dos resultados obtidos experimentalmente. Este software usa como base a bem conhecida teoria do micromagnetismo a qual, auxiliada pela equação de Landau-Lifshitz-Gilbert, é uma ótima ferramenta tanto para prever como para reproduzir o comportamento de sistemas magnéticos. Todos os procedimentos para o desenvolvimento desse software encontram-se definidos nas seções seguintes, incluindo um método de soma em memória compartilhada, o qual visa melhorar o desempenho computacional para o cálculo dos efeitos provenientes de interações dipolares.

Para finalizar, resultados experimentais e computacionais são expostos, mostrando a meta-instabilidade presente nos sistemas magnéticos abordados.

Abstract

The present study examines the temporal evolution of thin magnetic films composed by ferro and antiferromagnetic materials that present exchange interactions, aiming a better understanding of the origin of their behavior. Techniques such as ion irradiation and magnetic annealing were used for modification of the systems studied. Once used such tools for initialization of the exchange-bias effect, the samples were exposed to magnetic fields during a certain time interval at room temperature. Subsequently, room temperature magnetization hysteresis loops were measured and the corresponding fields of interest were extracted.

Depending on the different exchange-bias induction techniques, the samples showed distinct behaviors. After light ion irradiation, the magnetic state remained unstable, most probably due to thermal fluctuations that can alter the magnetic orientation of interface grains. The annealing, from other side, enabled a favorable energy configuration of the system, eliminating or reducing post-treatment thermally-induced effects in our the systems.

Moreover, the development of a computational tool turned to be necessary when attempting to reproduce the experimental results. This software built is based on the well-established micromagnetic theory which, by additionally utilizing by the Landau-Lifshitz-Gilbert equation, represents a powerful tool used to predict and/or reproduce the behavior of magnetic systems. All procedures for the development of this software are defined in the following sections, including a shared memory programming, developed in order to increase the computational performance when reproducing dipolar interaction effects.

Finally, experimental and simulation results are presented, demonstrating the metastable states of the magnetic systems studied here.

Lista de Abreviações

M Magnetização

FM Ferromagnético/ferromagneto

AFM Antiferromagnético/antiferromagneto

EB *Exchange bias*

M_S Magnetização de saturação

T_C Temperatura de Curie

T_N Temperatura de Néel

H_C Campo coercivo

H_{EB} Campo de *exchange bias*

T_B Temperatura de bloqueio

LLG Landau-Lifshitz-Gilbert

H_{ext} Campo magnético externo

H_{eff} Campo efetivo

H_{Zeeman} Campo de Zeeman

H_{uni} Campo de anisotropia uniaxial

H_{aff} Campo de anisotropia troca antiferromagnética

A_{ex} *Exchange stiffness*

H_{ex} Campo de troca

H_{st} Campo magnetostático

H_{th} Campo térmico

GPU Unidade de processamento gráfica

GM Memória global

SM Memória compartilhada

CM Memória constante

DM Memória de device (GPU)

GF Função global (GPU)

DF Função de device (GPU)

CPC Condições periódicas de contorno

CCD Condições periódicas de Dirichlet

CUDA *Compute Unified Device Architecture*

O Ordem computacional de termos

Unidades e Constantes

Tabela 1: Constantes utilizadas

Quantia	Simbolo	Unidade SI (mksA)
Campo magnético	H	A/m
Magnetização	M	A/m
Densidade de energia	ρ	J/m ³
Energia	E	J
Constante de exchange stiffness	A_{ex}	J/m
Permeabilidade do vácuo	$\mu_o = 4\pi \times 10^{-7}$	V s/(A m)
Susceptibilidade	χ	1
Tensor de desmagnetização	N	1
Magneton de Bohr	$\mu_B = e \hbar/2m_e = 1,1654 \times 10^{-29}$	J/A
Momento magnético	μ	Tm ³
Fator de Landé	$g = 2,003$ para elétrons	1
Fator giromagnético	$\gamma_0 = -g e /(2m_e)$	C/kg
Carga eletrônica	$e = -1,6021 \times 10^{-19}$	C
Massa eletrônica de repouso	$m_e = 9,1093 \times 10^{-31}$	kg
Constante de Planck	$h = -6,6260 \times 10^{-34}$	Js
Constante de Boltzmann	$k_B = -1,3806 \times 10^{-23}$	J/K
Fator de damping	$\alpha = [0,02 : 1]$	1

Conteúdo

Introdução	1
1 Magnetismo na Matéria	3
1.1 Origem do magnetismo e suas manifestações	3
1.1.1 Campo molecular	5
1.1.2 Conceitos microscópicos	6
1.1.3 Ordem magnética	7
1.2 Propriedades Anisotrópicas	8
1.2.1 Anisotropia uniaxial	9
1.2.2 Anisotropia cúbica	9
1.2.3 Outros casos	10
1.3 Exchange Bias	10
2 Técnicas experimentais	13
2.1 Sputtering (desbastamento iônico)	13
2.2 AGFM	14
2.3 Irradiação iônica e tratamento térmico	15
2.4 Amostras utilizadas	15
3 A Teoria Micromagnética	17
3.1 Micromagnetismo	17
3.1.1 Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert	18

3.2	Pré-definições	19
3.2.1	Células magnéticas	19
3.2.2	Processamento em paralelo - CUDA - NVIDIA	20
3.3	Campo Efetivo	23
3.3.1	Energia de Zeeman ou Energia do campo externo	23
3.3.2	Energia de anisotropia	23
3.3.3	Energia de troca	25
3.3.4	Energia magnetoestática	29
3.3.5	Flutuações térmicas	38
3.3.6	Sumário	38
4	Ferramentas para evolução temporal da magnetização	40
4.1	Métodos de Integração	40
4.1.1	Euler	41
4.1.2	Runge-Kutta	41
4.1.3	Bogacki-Shampine	42
4.1.4	Passo de integração (dt)	42
4.2	Rotina de cálculo	43
4.3	Diagrama de Voronoi	45
5	Testes de validação	46
5.1	Estados magnéticos	46
5.1.1	Estado <i>standard</i>	46
5.1.2	Estado <i>S</i>	46
5.1.3	Estado <i>C</i>	47
5.1.4	Estado de quatro domínios em vórtex	48

5.2	Problema <i>Standard II</i>	48
6	Resultados	51
6.1	Detecção experimental	51
6.1.1	Tratamento térmico	53
6.1.2	Irradiação iônica	55
6.2	Desempenho computacional	63
6.3	Análise computacional	65
7	Conclusões	67
8	Perspectivas	69
	Trabalhos publicados com minha participação desenvolvidos no LAM	71
	Bibliografia	72

Introdução

Materiais magnéticos têm sido amplamente estudados ao longo dos últimos séculos, principalmente, por apresentarem diferentes comportamentos como consequência de pequenas variações na sua constituição. A importância da vizinhança (seja devido à fase ou à estequiometria) nestes materiais é fundamental e alterações sutis no conjunto podem levar a resultados totalmente diferenciados. Além disso, tais interações são em geral bastante complexas, de forma a dificultar tanto a descrição quanto as previsões teóricas. Por outro lado, devido a presença de propriedades únicas, esses sistemas são alvos de pesquisas científicas de interesses fundamentais como o conhecimento da matéria e no uso destes para a criação de dispositivos tecnológicos, tais como discos rígidos, memórias não voláteis, sensores de campo magnético, etc.

Como consequência de sua complexidade, esses sistemas necessitam de uma análise extremamente minuciosa. Por outro lado, considerando que o magnetismo é oriundo de propriedades quânticas da matéria, um estudo aprofundado se torna uma tarefa árdua. Técnicas experimentais e modelos teóricos, com base em resultados de laboratórios, vem sendo constantemente desenvolvidos para que se possa compreender de melhor forma os mecanismos microscópicos responsáveis pelo comportamento magnético.

O grande avanço teórico no início do século passado, principalmente nos anos 1960, permitiu o desenvolvimento de um tratamento microscópico para o entendimento dos fenômenos magnéticos, i.e., a teoria micromagnética.¹ Esta trata o comportamento de sistemas magnéticos de forma clássica, assumindo que uma célula magnética pode conter muitos momentos magnéticos fortemente acoplados, sendo tratados como um único sítio magnético. Contudo até então, devido a dificuldades computacionais da época, apenas uma análise de sistemas com poucas partículas podia ser realizada. Dessa forma, os cálculos micromagnéticos foram evoluindo juntamente com a capacidade dos computadores. No início do século XXI, através da utilização de super computadores, ou *clusters* de processadores, o micro-magnetismo se tornou uma ferramenta poderosa, tanto na interpretação de resultados, como na sua previsão.

Entre os diversos temas atuais em pesquisas de sistemas magnéticos está o efeito de *Exchange Bias*²

(EB). O Laboratório de Magnetismo da UFRGS (LAM) tem desenvolvido um vasto estudo sobre o assunto,³⁻⁵ sendo este objeto de várias teses, dissertações e publicações. Entretanto, apesar do grande interesse, não somente do grupo, como também da comunidade científica internacional, muitas questões sobre o EB permanecem sem resposta; entre elas está o tema principal de interesse dessa dissertação: A evolução temporal do campo de *Exchange Bias* em determinados filmes finos. Dentro deste contexto vale salientar que o foco principal dos trabalhos desenvolvidos no LAM é de caráter experimental, carenciado de uma discussão teórica mais aprofundada. Isto é consequência do fato de que o gerador da interação de EB é um material AFM o qual não pode ter seu comportamento magnético diretamente observado usando as técnicas de medidas experimentais presentes no LAM. Estas dificuldades conduziram ao desenvolvimento de um código computacional baseado no micromagnetismo, afim de estruturar uma teoria que conduz a uma melhor entendimento sobre o fenômeno.

A evolução temporal do EB foi reportada por muitos autores em sistemas de bicamadas.⁶⁻⁸ Porém, essa era induzida através de tratamentos térmicos de temperaturas elevadas e mantida durante o procedimento de evolução. Posteriormente Paetzold⁹ reportou que tais bicamadas poderiam apresentar evolução no campo de EB mesmo após o resfriamento, mas essa tendia a cessar após algumas horas. Este trabalho discute outro ponto importante, a evolução do campo de deslocamento, utilizando apenas campo magnético há temperatura ambiente, abordando assim o efeito de meta-instabilidade presente em sistemas FM/AFM.

Em resumo, o objetivo do presente trabalho consiste no estudo de meta-instabilidades presentes em filmes finos que apresentam EB. Tal fenômeno faz parte do magnetismo moderno, e sua origem é fruto da interação interfacial entre materiais FM/AFM, onde a detecção microscópica dessa interação necessita de técnicas avançadas. A utilização de modelos teóricos na tentativa de reconstrução do sistema físico, ou seja, a teoria do micro-magnetismo caso implementada de forma correta, pode ajudar a contornar tal obstáculo experimental.

Além disso, o trabalho também visou o desenvolvimento completo de um *software* intitulado *LLGmag*, o qual usa os fundamentos da teoria micromagnética, e visa a aplicação dessa em sistemas magnéticos que apresentam o fenômeno de *Exchange Bias*. Constatou-se por sua vez que tais sistemas apresentam comportamento instável.

Todo o procedimento de construção está descrito nas próximas seções, bem como o conceito dos campos envolvidos e seus limites de atuação. Além do mais, o *LLGmag* é submetido a testes validação. Por fim, o *software* é utilizado para auxiliar a interpretação de resultados experimentais.

1 *Magnetismo na Matéria*

1.1 Origem do magnetismo e suas manifestações

Pode-se averiguar experimentalmente que todo material, exposto a um campo magnético (\mathbf{H}), adquire momento magnético $\vec{\mu}$ resultante. Sua origem se deve à formação de um dipolo magnético. Associada ao dipolo, pode ser definida a magnetização $\mathbf{M} = \frac{\vec{\mu}}{\Delta V}$ onde ΔV é seu volume. A maioria dos materiais apresenta um comportamento magnético proporcional ao \mathbf{H} . Portanto, a sua magnetização total é expressa pela seguinte equação:

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H}, \quad (1.1)$$

onde χ é conhecida como susceptibilidade magnética.

A resposta ao campo magnético aplicado pode apresentar diferentes comportamentos de acordo com o sinal de χ . Para o caso em que $\chi > 0$, os materiais tendem a se alinhar paralelamente ao \mathbf{H} , e esses são denominados materiais paramagnéticos (PM). Porém, quando o campo se faz ausente, o sistema encontra-se no estado desordenado, resultado em magnetização líquida nula. Entretanto, os momentos podem ser completamente alinhadas através da aplicação de \mathbf{H} intenso, atingindo o estado saturado. Após isso, o aumento do valor do campo \mathbf{H} não resultará, praticamente, no aumento da magnetização, invalidando a equação 1.1. Assim, associado ao estado completamente alinhado, pode ser associada a magnetização de saturação M_s .

Nos materiais com $\chi < 0$, a magnetização tende a se opor ao campo aplicado. Esses são chamados de materiais diamagnéticos, onde os elétrons tendem a agir de maneira contrária ao \mathbf{H} . Em oposição ao caso PM, esses materiais não atingem a saturação e obedecem a equação 1.1. Em ambos casos se constata que $\mathbf{H} = 0$ implica em $\mathbf{M} = 0$, ou seja, as manifestações magnéticas surgem somente sob aplicação de campo externo.

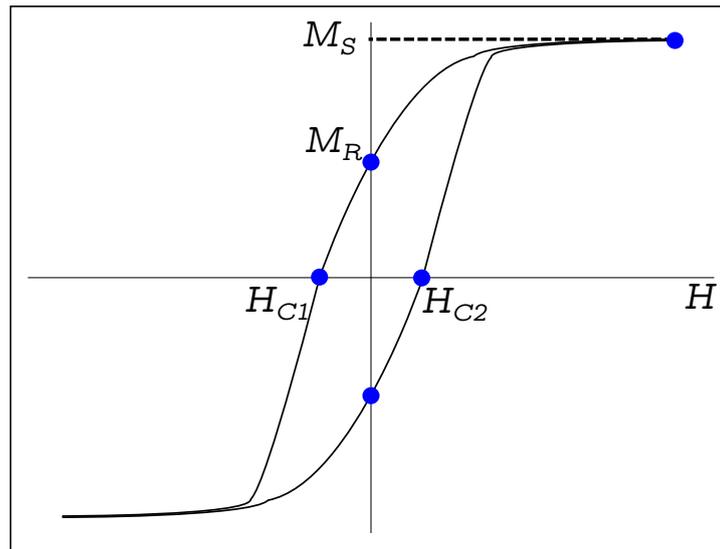


Figura 1.1: Laço de histerese característico de materiais FM no qual seus campos coercivos H_{C1} e H_{C2} , juntamente com sua magnetização de saturação M_s e a remanente M_r são mostrados.

Nem todos os materiais se enquadram nas categorias supracitadas. A existência de rochas que apresentam magnetização intrínseca é conhecida a pelo menos dois milênios. Essas rochas apresentam magnetização mesmo na ausência de campo magnético externo. Materiais que apresentam esse comportamento são denominados ferromagnéticos (FM). Quando expostos a campo $\mathbf{H} \neq 0$, eles apresentarão mudanças na sua magnetização, assim como ocorre para o caso PM. Se tal campo for suficiente para alinhar totalmente o FM, o estado saturado será alcançado e sua magnetização de saturação pode ser obtida. Porém, ao se remover o campo externo, os momentos do FM permanecem parcialmente alinhados e apresentam uma $\mathbf{M} \neq 0$, mesmo para campo nulo. A magnetização residual é intitulada magnetização remanente M_r .

Observações experimentais do início do século XIX mostravam resultados não esperados, como por exemplo que laços de histerese de compostos FM percorriam caminhos irreversíveis, durante o processo de reversão do campo magnético, como pode ser visto na figura 1.1. Os processos irreversíveis geraram o conceito de coercividade, a qual pode ser inicialmente interpretada como uma medida de inércia magnética. Ao se realizar um laço de histerese de um único FM observa-se que ele apresentará dois valores usualmente distintos, H_{C1} e H_{C2} para $M(H) = 0$, para campos não nulos. Através de tais valores se define o campo coercivo H_C , o qual é expresso na seguinte forma:

$$H_C = \frac{H_{C1} - H_{C2}}{2}. \quad (1.2)$$

Agregado a tais medidas de magnetização também era conhecido o comportamento dos materiais FM em função da temperatura, isto é; flutuações térmicas podem influenciar o ferromagnetismo. No

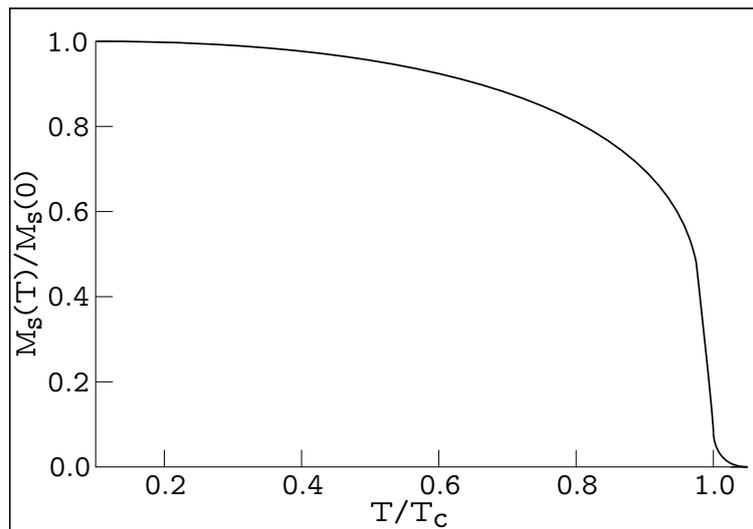


Figura 1.2: Desmagnetização térmica, onde o ordem FM deixa de existir quando a T_C é atingida.

caso limite em que tais flutuações fossem extremamente elevadas, a ordem ferromagnética poderia cessar. Dessa forma, a ordem ferromagnética daria lugar para o estado PM. Essa passagem é considerada uma transição de fase. Assim, em altas temperaturas, o sistema pode se tornar completamente desordenado. A temperatura de transição do estado FM para o estado PM recebe o nome de temperatura de Curie T_C ; tal passagem pode ser vista na figura 1.2. Atualmente se sabe que a transição FM-PM é uma transição de fase de segunda ordem, e pode ser reproduzida através de modelos simplificados como o de campo molecular. É importante salientar que ao se resfriar o material, a ordem local do FM é restaurada, já que houve decréscimo da amplitude das flutuações térmicas; porém, o estado inicial possivelmente não poderá ser recuperado, apresentando uma ordem global diferente.

Contudo, somente manifestações macroscópicas do FM eram observadas até então. A abordagem teórica da época não englobava efeitos térmicos e magnéticos simultaneamente. A primeira tentativa de unir ambas as contribuições se deve a Pierre Weiss. A partir de seu trabalho, outras interações foram agregadas para embasar a origem da ordem FM.

1.1.1 Campo molecular

Com base no conhecimento do século XIX, a existência do ferromagnetismo era intrigante, e o simples fato de que materiais FM pudessem apresentar magnetização espontânea era extraordinário. Porém, o modo que as oscilações térmicas poderiam afetar esse comportamento, gerava dúvida nos físicos da época. Eis que em 1907 Pierre Weiss propôs uma hipótese qualitativa, a qual associava o fenômeno do ferromagnetismo a interações internas. Sua hipótese foi chamada de campo molecular H_M .

Weiss supôs que os materiais eram compostos por domínios, os quais poderiam interagir entre si. Essa interação os manteria alinhados, mesmo na ausência de campo magnético, porém tal interação poderia ser afetada, caso as flutuações térmicas, associadas a um campo térmico H_T , fossem de grande magnitude.

Dessa forma, o estado FM pode ser interpretado como devido à competição de energias, entre H_M e o H_T , no limite em que $H_T < H_M$, e as flutuações térmicas não vencem as forças que mantêm o FM; para o caso contrário, ou seja $H_T > H_M$, o campo molecular não é forte o suficiente para manter o sistema alinhado e as flutuações térmicas dominam.

Entretanto, Weiss não justificou suas hipóteses e não pode explicar a origem do campo molecular e existência de domínios, impossibilitando a realização de estimativas quantitativas. Para aumentar o problema de Weiss, determinados compostos FM atingiam o estado saturado, quando expostos a campos magnéticos da ordem de 1 oesterd (Oe), enquanto compostos necessitam de campos da ordem de 10^6 Oe para a obtenção do estado saturado. A explicação para tais efeitos somente pode ser explicada com o avanço teórico.

1.1.2 Conceitos microscópicos

Um tratamento realístico do ferromagnetismo precisa naturalmente ser baseado em conceitos atômicos. De maneira ideal, o FM deveria ser tratado utilizando métodos rigorosos da Mecânica Quântica. Porém, esse tratamento é praticamente impossível. Assim são utilizados conceitos da Mecânica Quântica, como o de spin \mathbf{S} , o qual será aplicado a aproximações clássicas.

O modelo atômico de Bohr fornece orbitais quantizados, tais que os elétrons apresentaram momento magnético definido por:

$$\vec{\mu}_i = g\mu_B\mathbf{S}_i, \quad (1.3)$$

em que μ_B é o magneton de Bohr e g é o fator de Landé. O momento magnético observado em materiais FM de banda 3d, é inteiramente proporcionado pelo spin eletrônico, quantizado em $\frac{\hbar}{2}$. Dessa forma, se pode assumir que cada átomo do FM deve ser tratado como um momento magnético $\vec{\mu}$.

Além dos tipos de magnetismo apresentados acima, podemos classificar os materiais magnéticos de acordo com a ordem magnética, ou seja, como os momentos magnéticos microscópicos estão configurados no sólido. A seguir serão apresentados algumas destas ordens, as quais são de interesse deste trabalho.

1.1.3 Ordem magnética

Ferromagnetismo

Até então, os fenômenos de paramagnetismo e diamagnetismo eram bem explicados apenas com a utilização de Física Clássica, especialmente através da Mecânica Estatística. Isto é, eles são caracterizados apenas pela interação do campo com os dipolos do material. Devido a hipótese de Weiss surge a ideia de que o FM não só apresenta interações com o campo, mas também interações internas. Tal interação entre momentos não fora prevista pela Física Clássica. Novamente com auxílio da Mecânica Quântica, a interação entre spins vizinhos poderia ser a resposta ao problema do FM.

Em 1927, Heisenberg propôs a sua formulação para o problema, conhecida como interação de troca. O chamado Hamiltoniano de Heisenberg é composto pela soma da interação dos spins com o campo magnético externo com a interação de spins com spins. Para tal modelo, somente são levados em conta os primeiros vizinhos:

$$H = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_i g \mu_B \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}. \quad (1.4)$$

A constante J_{ij} é chamada de integral de troca, e é possível notar que seu sinal terá influência sobre o comportamento dos spins: para o caso $J_{ij} > 0$, o mínimo de energia para o conjunto de spins será atingido se todos permanecerem alinhados paralelamente; se $J_{ij} < 0$, o mínimo de energia será alcançado quando os spins se alinharem antiparalelos. Dessa forma, pode-se pensar que o FM é oriundo do caso em que $J_{ij} > 0$, reforçando a hipótese de Weiss, a qual sugeria que tais domínios permaneceriam alinhados paralelamente. Além de contribuir com a formulação de Weiss, o Hamiltoniano de Heisenberg também gerou uma incógnita: quais materiais poderiam apresentar $J_{ij} < 0$? Esse tópico será abordado na subseção na sequência.

A partir da equação 1.4 se observa que, mesmo na ausência de campo magnético externo, o primeiro termo do Hamiltoniano de Heisenberg é não nulo. Nota-se também que o Hamiltoniano apenas será anulado na ausência de campo e caso o produto escalar entre os spins interagentes seja nulo.

Percebe-se que, ao adicionar um campo térmico ao Hamiltoniano Heisenberg, o sistema retorna à hipótese do campo molecular. Com essa formulação torna-se possível a realização de previsões quantitativas, corroborando com a hipótese de que essa seja a origem da interação ferromagnética.

Antiferromagnetismo

Contrariamente aos materiais ferromagnéticos, os antiferromagnéticos (AFM) não apresentam magnetização líquida, e, mesmo supondo que possam apresentar, a detecção da sua magnetização seria extremamente difícil, especialmente para os equipamentos do início do séc XX. Dessa forma a teoria para esse fenômeno foi apresentada mesmo antes de ser detectada experimentalmente, por L. Néel.¹⁰ Novamente apenas a interação entre primeiros vizinhos pode ser levada em conta.

De forma semelhante ao caso FM, os compostos AFM apresentam a mesma competição com o campo térmico, e podem perder sua ordem magnética caso as flutuações térmicas vençam a interação de troca. Neste caso a ordem AFM se altera para o estado paramagnético. A transição está associada a uma temperatura crítica, a qual recebeu o nome de temperatura de Néel, T_N .

Mesmo atualmente, materiais AFM ainda são pouco estudados, já que apenas técnicas extremamente avançadas podem detectar sua manifestação magnética de maneira adequada. Dentre elas cita-se a difração de nêutrons e ressonância magnética nuclear. Neste trabalho, apenas foi possível a realização de medidas indiretas a partir do AFM, através da observação do comportamento de um FM acoplado ao AFM, o qual será abordado na seção 1.3.

1.2 Propriedades Anisotrópicas

O Hamiltoniano de Heisenberg é completamente isotrópico, isto é, apresenta invariância frente a rotações, já que independe das coordenadas. Nota-se que a aplicação de um campo magnético aos spins equivale a aplicar um campo magnético sobre um gás ideal de elétrons, ou seja, um conjunto de elétrons com spins interagentes. Uma formulação mais rigorosa, que leve em conta a interação coulombiana entre elétrons e prótons, é necessária. Assim, devemos utilizar os fundamentos da teoria de Estado Sólido.

Utilizando a definição de rede cristalina¹¹ é possível realizar uma melhor aproximação de um sólido realístico, localizando os caroços iônicos em posições bem definidas na rede, e seus correspondentes elétrons os orbitando. Além disso, pode-se pensar que a estrutura cristalina de um sistema real apresentará irregularidades, incluindo assimetrias, invalidando a utilização do Hamiltoniano de Heisenberg na forma apresentada.

Portanto, ao estudar materiais FM macroscópicos, é correto pensar que eles apresentem anisotropias devido a presença de defeitos na rede cristalina. Esses defeitos poderão fragmentar o FM caso for energeticamente conveniente. Além disso, a própria interação spin-órbita pode induzir anisotropias.

A princípio, cada um dos fragmentos FM pode ter características próprias, como volume e orientação cristalina, a qual está intimamente ligada ao conceito de eixo de fácil magnetização. Este, pode ser entendido como uma direção preferencial de alinhamento; sendo assim, o sistema deve ser saturado de maneira mais fácil, caso o campo seja aplicado ao longo desse eixo.

Existem diversas manifestações de anisotropias em sistemas magnéticos, sendo a mais comum chamada de anisotropia magneto-cristalina, essa é causada pela interação spin-órbita.

Normalmente a energia magneto-cristalina é menor do que a energia de troca; contudo, o eixo fácil é determinado somente pela anisotropia, já que a interação de troca é isotrópica. Assim, essa interação manterá os spins paralelos uns aos outros, e a anisotropia tentará alinhá-los ao longo de uma determinada direção cristalina.

1.2.1 Anisotropia uniaxial

Muitos cristais apresentam um único eixo de alta simetria, esta propriedade recebe o nome de anisotropia uniaxial. Normalmente materiais com este tipo de anisotropia apresentam grandes valores de anisotropia e são vastamente utilizados na indústria; como apresentam grandes campos coercivos, esses são intitulados de magneticamente 'duros' e podem ser utilizados como ímãs-permanentes. Podemos escrever a densidade de energia anisotrópica como

$$\rho_u = -K_1 \cos^2 \theta + K_2 \cos^4 \theta, \quad (1.5)$$

tal que os coeficientes K_1 e K_2 são constantes. Usualmente $K_1 \gg K_2$; assim, para determinados sistemas, se descarta a constante K_2 . O ângulo θ é o ângulo entre a \mathbf{M} e o eixo fácil. Para o caso em que eles coincidam, a equação 1.5 se reduz à forma simplificada, $\rho = -K_1$. Note que nenhuma restrição é feita para os valores que K_1 pode assumir.

1.2.2 Anisotropia cúbica

Diferentemente do caso uniaxial, a anisotropia cúbica apresenta um número maior de eixos fáceis; para $K_1 > 0$ e $K_2 = 0$, veja a equação 1.6, é possível definir os eixos cartesianos x , y e z como sendo os eixos cristalinos de um cubo. Além disso as componentes da magnetização, juntamente com seu eixo de projeção, mantenham a norma da magnetização, ou seja $m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 = 1$. A densidade de energia anisotrópica nesse caso é dada por:

$$\rho_c = -K_1(m_x^2 m_y^2 + m_y^2 m_z^2 + m_z^2 m_x^2) + K_2 m_x^2 m_y^2 m_z^2; \quad (1.6)$$

Os coeficientes K_1 e K_2 são constantes e para o caso cúbico apresentam certas peculiaridades. Por exemplo: se $K_1 > 0$, reproduzimos o caso do Fe, com eixos fáceis ao longo de $\langle 100 \rangle$. se $K_1 < 0$, obtemos um caso semelhante ao do Ni, em que os eixos fáceis são as diagonais do cubo $\langle 111 \rangle$.

1.2.3 Outros casos

Existem outros casos em que anisotropias são geradas através de efeitos como os de magnetostricção e magnetoelásticos. Entretanto, esses casos não são de fundamental importância para o presente trabalho e não serão abordados. Além dos casos de anisotropia uniaxial e cúbica, também se levará em conta a anisotropia de troca a qual será abordada na seção 3.3.2

1.3 Exchange Bias

A descoberta

O fenômeno de *Exchange Bias* (EB), ou viés de troca, foi observado pela primeira vez no ano de 1956, por Meiklejohn e Bean.² Eles perceberam que a curva de histerese magnética em amostras de Co envolvidas por seu óxido natural CoO apresentam deslocamento em campo. Esses materiais são conhecidos por apresentarem comportamento FM e AFM, respectivamente. Porém, o efeito só acontecia se as amostras fossem previamente resfriadas de 300 até 77 K com campo magnético aplicado. Executado o mesmo procedimento sem a utilização de campo, notava-se que a curva de histerese magnética não apresentava deslocamento; a figura 1.3 mostra o resultado de ambos os procedimentos. Além disso, para temperaturas superiores à T_N do CoO, as partículas se comportavam magneticamente como o Co puro. Concluiu-se, então, que o efeito surgia da interação entre o FM e o AFM; o fenômeno poderia ser descrito como uma anisotropia de troca. Desde então, este foi observado em inúmeros sistemas, como por exemplo em pequenas partículas,^{2,12} filmes finos,^{3,13,14} filmes FM sobre monocristais AFM,^{15,16} e materiais inhomogêneos.^{17,18}

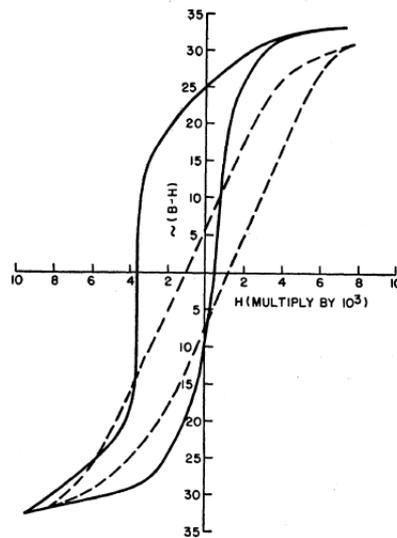


Figura 1.3: Laço de histerese da primeira manifestação da interação FM-AFM detectada por Meiklejohn e Bean,² em amostras de Co-CoO.

Modelo intuitivo

Meiklejohn tentou explicar o fenômeno de EB através de um modelo teórico simples. Porém, o modelo só oferecia uma ideia qualitativa do fenômeno. Desde então, embora muitos avanços foram realizados, ainda existem dúvidas sobre o assunto. A origem física do fenômeno geralmente aceita é a de que existe um acoplamento de troca na interface dos materiais FM e AFM.

Pode-se ativar esse fenômeno de maneira relativamente simples, como visto na figura 1.4. Sabe-se que o material FM possui determinada T_C , e que o material AFM possui determinada T_N . Logo, realizando um tratamento térmico^{4,5} a certa temperatura T , sendo $T_C > T > T_N$, se mantém a ordem do material FM, mas haverá uma mudança de ordem no material AFM quando resfriado. Assim, aplica-se um campo magnético externo suficientemente grande para saturar o material FM. Na interface, o material AFM estará susceptível a interação com o FM e tenderá a se orientar na mesma direção. Conforme se reduz a temperatura, o AFM retorna para a sua ordem magnética com alterações na interface em consequência da interação de troca com o FM. No término do procedimento, obtêm-se amostras com EB. Além disso, pode-se induzir EB através do bombardeamento iônico,^{19–22} também sob a presença de campo aplicado.

A indução do fenômeno de viés de troca não se faz necessária temperaturas da ordem da T_N , sabe-se que para temperaturas inferiores a T_N , já se pode induzir o efeito de EB, nessa temperatura a agitação térmica vence a inércia cristalina dos grãos AFM, e por interação de troca estes grãos tendem a se alinhar com o FM. Essa temperatura é nomeada temperatura de bloqueio T_B .

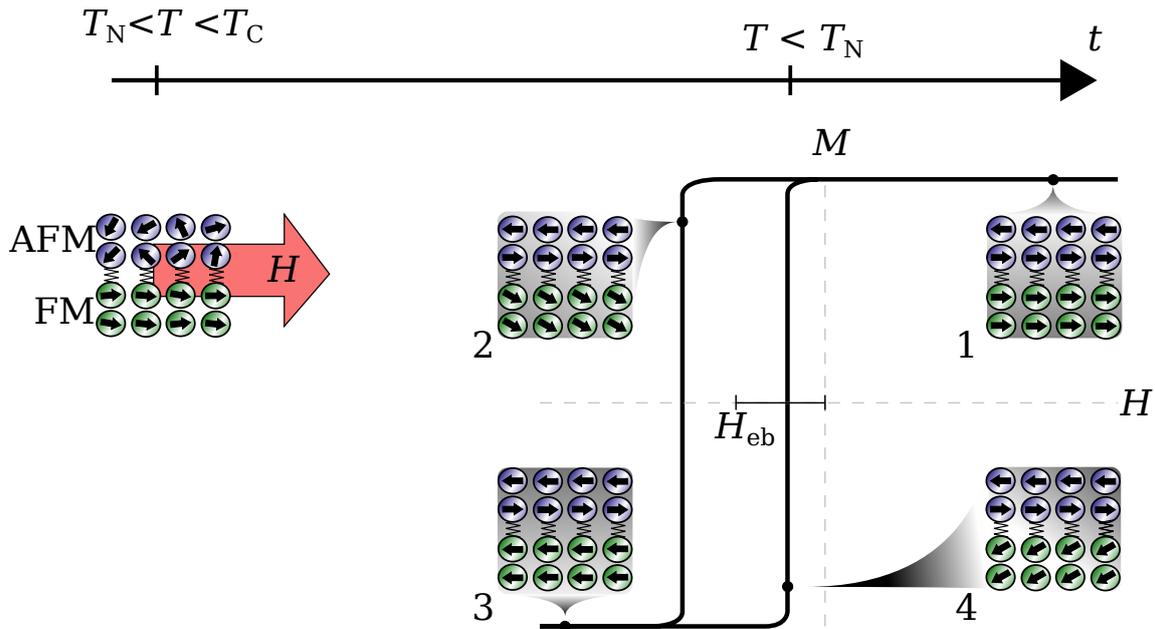


Figura 1.4: Modelo intuitivo do comportamento do AFM em função de estímulos externos. A esquerda, devido a temperaturas maiores do que a de T_N , o AFM se encontra no estado desordenado (PM); caso esse seja resfriado na presença de um campo externo, a anisotropia de troca poderá ser induzida. À temperaturas inferiores a T_N , o estado AFM é retomado; assim, quando o FM for submetido ao ciclo de histerese, estará sob efeito da nova anisotropia induzida oriunda da interação FM/AFM.

De maneira semelhante à determinação do campo coercivo, pode-se determinar o deslocamento em campo utilizando a seguinte expressão:

$$H_{EB} = \frac{H_{C1} + H_{C2}}{2}, \quad (1.7)$$

onde H_{eb} é conhecido como campo de *exchange bias*.

2 *Técnicas experimentais*

Além do desenvolvimento computacional, o trabalho teve como meta o estudo das interações meta-estáveis presentes em interface do tipo FM/AFM, as quais foram detectadas através de técnicas experimentais, via mudanças do campo de acoplamento de troca. Além delas, os processos de fabricação e de manipulação dos filmes finos são descritos abaixo.

2.1 **Sputtering (desbastamento iônico)**

O processo de fabricação de filmes finos pode ser realizado através de diversas técnicas, dentre elas a técnica de *sputtering*. O princípio básico dessa técnica consiste na remoção de partículas de determinado material sólido (alvo). A sua reorganização é realizada sob um anteparo, o qual suporta o substrato onde os átomos ejetados serão depositados.

As partículas do alvo são removidas através de colisões com partículas inertes, normalmente gás nobre como o argônio. Para que o argônio seja acelerado contra o alvo, faz-se necessário um processo de ionização; após tal processo o íon positivo é submetido à uma diferença de potencial, acelerando o Ar contra o alvo.

As colisões entre o íon de Ar acelerado e o alvo ejetam as partículas do material a ser depositado. Para que elas cheguem ao substrato sem colidir com moléculas de ar, todo procedimento é realizado em vácuo a fim de aumentar o livre caminho médio, e por sua vez, a quantidade de material que chegará ao substrato.

A figura 2.1 mostra um esquema qualitativo do processo de deposição.

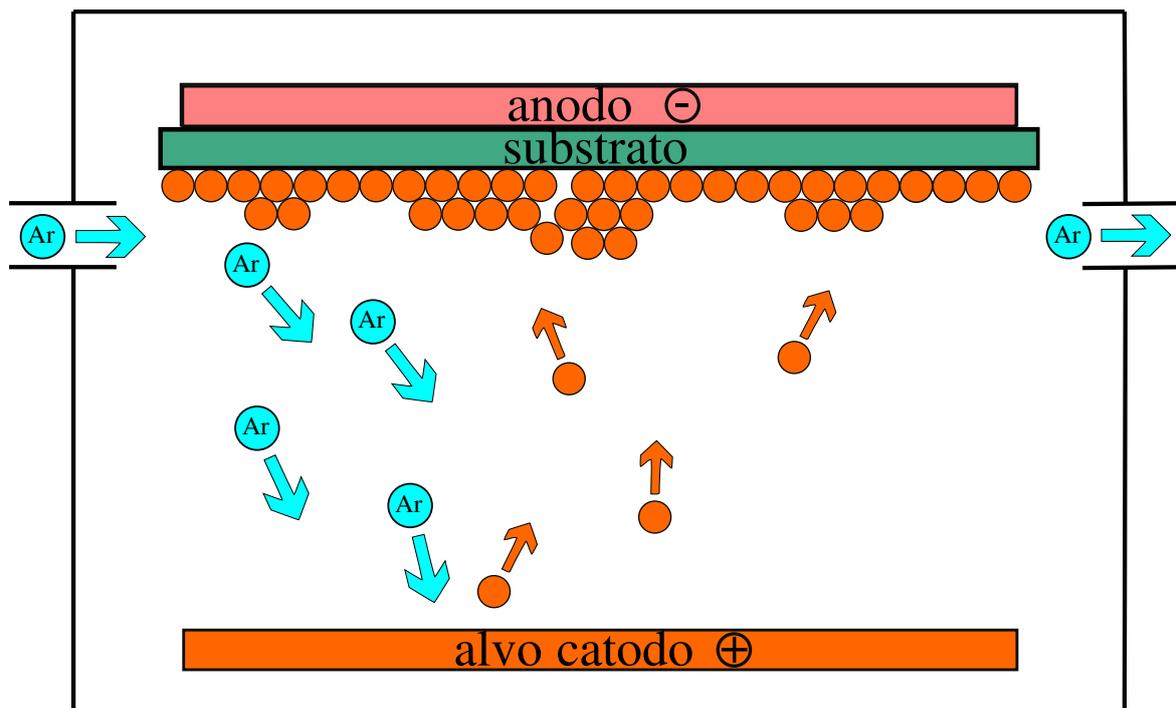


Figura 2.1: Esquema do processo de deposição, onde íons de Ar^+ são acelerados contra o alvo através uma diferença de potencial aplicada entre o alvo e anteparo. Os íons ejetados se reorganizam no anteparo sobre o substrato escolhido para a deposição.

2.2 AGFM

A caracterização magnética foi realizada através da utilização da técnica de AGFM. O *Alternating Gradient Force Magnetometer*,²³ ou Magnetômetro de Gradiente de Força Alternada, é capaz da detecção de momentos magnéticos da ordem de 1 nA m^2 . Seu princípio de funcionamento é baseado na força sofrida por um dipolo magnético quando submetido a um gradiente de campo magnético.

A detecção é realizada através das deflexões de um material piezo-elétrico; este está agregado a uma das extremidades de uma haste de vidro, a qual receberá a amostra em sua extremidade oposta ao piezo-elétrico. A presença da haste de vidro entre o piezo-elétrico e a amostra tem como finalidade amplificar o torque exercido sob o piezo. Dessa forma, quanto mais extensa a haste de vidro maior será o torque. Chama-se o conjunto piezo e haste de vidro de haste de detecção.

A haste de detecção munida da amostra de interesse é imersa entre os polos de um eletroímã, o qual é responsável por gerar o campo magnético sob o comando da fonte de corrente que o alimenta. Além disso, associadas aos polos do eletroímã, estão duas bobinas de excitação, as quais têm o papel de excitar a haste de detecção através da utilização de campo magnético AC com fase oposta entre as bobinas de excitação e frequência bem definida.

A frequência de excitação corresponde à frequência de ressonância da haste de detecção. Assim, existe um aumento expressivo no sinal, facilitando a aquisição de dados. Além disso, o sinal obtido pelo piezo-elétrico é enviado a um amplificador (Lock-in), o qual eliminará as demais frequências, evitando ruído gerado por frequências não desejadas.

2.3 Irradiação iônica e tratamento térmico

Como já mencionado na seção 1.3, o fenômeno de EB pode ser induzido através de irradiação iônica ou tratamento térmico. Para algumas amostras, especialmente para o caso em que essas são depositadas sem a presença de campo magnético, faz-se necessária a indução do efeito.

A técnica de irradiação iônica consiste na passagem de íons com determinada energia através do material. Esses atravessam completamente o filme fino, no caso de nossas amostras, sendo completamente desacelerados no substrato.

O equipamento, utilizado para a realização das irradiações, consiste em um acelerador linear de 500 kV, o qual possui uma câmara especial para a realização de implantações com campo magnético aplicado da ordem de 5,5 kOe. O acelerador faz parte do Laboratório de Implantação Iônica da UFRGS.

A técnica de tratamento térmico é realizada através de um forno resistivo. A temperatura é elevada até que se atinja uma temperatura acima da de bloqueio. Associado ao forno se tem um eletroímã, o qual induzirá a anisotropia unissintetizada sob o filme fino.

Ambas as técnicas de indução do EB são realizadas em alto vácuo para evitar a oxidação.

2.4 Amostras utilizadas

As amostras utilizadas foram depositadas através da técnica de *magnetron sputtering* do Instituto Unité Mixte de Physique CNRS Thales (UMR 137). Neste trabalho apenas três configurações de amostra foram utilizadas, com as suas configurações descritas abaixo:

- I - Si (substrato 3 mm) - SiO (óxido nativo) \ Ru (5 nm) \ Ta (15 nm) \ IrMn (5 nm) \ Co (5 nm) \ Ru (5 nm)
- II - Si (substrato 3 mm) - SiO (óxido nativo) \ Ru (5 nm) \ Ta (15 nm) \ IrMn (7 nm) \ Co (5 nm) \ Ru (5 nm)

III - Si (substrato 3 mm) - SiO (óxido nativo) \ Ru (5 nm) \ Ta (15 nm) \ IrMn (**15** nm) \ Co (5 nm) \ Ru (5 nm)

Diferentes espessuras de IrMn foram utilizadas a fim de verificar se a meta-instabilidade poderia ser resultante apenas da má formação da estrutura do material AFM.

Como já mencionado estas amostras foram depositadas usando a técnica de *magnetron sputtering*, onde a pressão de base utilizada foi da ordem de $5,0 \times 10^{-8}$ mbar, a pressão de Ar foi de $2,5 \times 10^{-3}$ mbar, para todos os materiais depositados, com exceção do IrMn, esse utilizou $1,0 \times 10^{-2}$ mbar. Além disso, os alvos utilizados apresentam pureza superior à 99,999%.

Para verificar a estrutura cristalina após deposição a técnica de raios-x foi utilizada (tal técnica não será descrita no presente trabalho, pois, foi utilizada apenas para a verificação estrutural do material AFM), na qual se verificou a presença da textura cristalina (111), característica de estruturas células cúbicas de face centrada, referente ao material IrMn. A presença de tal textura cristalina favorece a indução do fenômeno de troca entre as camadas FM/AFM.

3 A Teoria Micromagnética

3.1 Micromagnetismo

A teoria do Micromagnetismo é baseada no princípio variacional e foi estabelecida inicialmente por Landau.²⁴ As componentes do vetor de magnetização $\mathbf{m} = \frac{\mathbf{M}}{M_s}$, são escolhidas de maneira que a energia atinja um mínimo, seja este relativo ou absoluto, sobre a condição de vínculo $\mathbf{m}^2 = 1$. Ou seja, o princípio variacional é válido se o módulo de \mathbf{m} for constante e igual a um.

A formulação Micromagnética ganhou força com as contribuições de W.F. Brown Jr, o qual nomeou tal teoria de Micromagnetismo. Brown já desenvolvia inúmeros trabalhos nas áreas referentes a domínios magnéticos, ressonância magnética, etc, quando elaborou a teoria semi-clássica do Micromagnetismo.¹ A teoria teve como grande mérito a unificação da hipótese de Weiss e Landau. Brown mostrou que um conjunto de spins pode se comportar como um unico domínio, e que os spins presentes nas extremidades de um domínio poderiam se comportar de maneira diferenciada devido a ausência de vizinhos próximos, gerando a formação de paredes do domínio.

Além disso, utilizando resultados da Eletrodinâmica Clássica, pode-se escrever o torque gerado por um campo magnético qualquer \mathbf{H} , sobre o momento de dipolo $\vec{\mu}$ como:

$$\vec{\tau} = -\vec{\mu} \times \mathbf{H}. \quad (3.1)$$

Sabe-se que o torque exercido sobre um momento magnético pode ser expresso por:

$$\vec{\tau} = -\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt}, \quad (3.2)$$

onde γ é a constante de giromagnético. Dessa forma, se pode reescrever a equação 3.1 apenas em termo do momento magnético,

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = -\gamma \vec{\mu} \times \mathbf{H}. \quad (3.3)$$

Utilizando a definição de magnetização apresentada na seção 1.1, reescrevemos:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}. \quad (3.4)$$

Essa equação representa a precessão da magnetização em torno do campo aplicado. Nessa formulação, o movimento de precessão não cessaria, o que não condiz com os resultados experimentais, eis então que Landau e Lifshitz²⁴ propuseram a inserção de um termo fenomenológico na equação 3.4, tal qual possuiria um caráter de amortecimento, levando em conta as perdas energéticas durante processos magnéticos.

Somando a equação 3.4 com o termo de dissipação obtêm-se:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H} - \frac{\lambda}{M_s} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{H}). \quad (3.5)$$

A equação 3.5 é conhecida como equação de Landau-Lifshitz e o termo λ é a constante de amortecimento característico do sistema físico em questão.

3.1.1 Equação de Landau-Lifshitz-Gilbert

Como a equação 3.5 possui uma divergência quando λ tende a infinito, Gilbert propôs uma formulação diferente para a equação de Landau-Lifshitz. Gilbert assumiu que a dissipação energética fosse proporcional à derivada temporal da magnetização.²⁵ Dessa maneira a equação 3.5 pôde ser reescrita na seguinte forma:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma' \mathbf{M} \times \mathbf{H} - \frac{\lambda'}{M_s} \mathbf{M} \times \frac{d\mathbf{M}}{dt}. \quad (3.6)$$

A equação 3.6 recebe o nome de Landau-Lifshitz-Gilbert; contudo, essa apresenta comportamento transcendental para a magnetização. Esse comportamento pode ser removido através de operações algébricas através da realização do produto escalar da magnetização com a equação 3.6. Assim se obtém:

$$\mathbf{M} \cdot \frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma' \mathbf{M} \cdot \mathbf{M} \times \mathbf{H} - \frac{\lambda'}{M_s} \mathbf{M} \cdot \mathbf{M} \times \frac{d\mathbf{M}}{dt}, \quad (3.7)$$

a qual temos:

$$\mathbf{M} \cdot \frac{d\mathbf{M}}{dt} = 0 \quad (3.8)$$

devido à propriedades de ortogonalidade entre ambos.

A equação 3.7 não resolve o problema de transcendentalidade mas será utilizada nos seguintes

passos. Ao se realizar o produto vetorial da magnetização com a equação 3.6 se obtêm:

$$\mathbf{M} \times \frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma' \mathbf{M} \times \mathbf{M} \times \mathbf{H} - \frac{\lambda'}{M_s} \mathbf{M} \times \mathbf{M} \times \frac{d\mathbf{M}}{dt}. \quad (3.9)$$

Após a expansão do produto vetorial de 3.9, a utilização da propriedade do produto vetorial triplo e do resultado obtido em 3.8, temos:

$$\mathbf{M} \times \frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma' \mathbf{M} \times \mathbf{M} \times \mathbf{H} - \lambda' M_s \frac{d\mathbf{M}}{dt}. \quad (3.10)$$

Realizando pequenas operações algébricas, retoma-se equação de Landau-Lifshitz na formulação de Gilbert:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\frac{\gamma}{\alpha^2 + 1} \mathbf{M} \times \mathbf{H} - \frac{\gamma\alpha}{(\alpha^2 + 1)M_s} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{H}). \quad (3.11)$$

Para que a equação 3.11 respeite o vínculo imposto pelo princípio variacional, apenas resta a sua normalização por M_s . Finalmente, a equação de Landau Lifshitz na formulação de Gilbert pode ser expressa por:

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\frac{\gamma}{\alpha^2 + 1} \mathbf{m} \times \mathbf{H} - \frac{\gamma\alpha}{\alpha^2 + 1} \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{H}). \quad (3.12)$$

Vale a pena salientar que nenhuma referência foi feita ao campo \mathbf{H} , podendo esse ser qualquer. A sua definição será abordada na seção 3.3.

3.2 Pré-definições

Antes da descrição do campo efetivo, é necessário o conceito de células magnéticas. Elas compõem o sistema físico a ser descrito. As definições podem influenciar na maneira em que os campos serão descritos. Além disso, a definição de processamento em paralelo é necessária para a descrição das rotinas para a implementação dos campos.

3.2.1 Células magnéticas

Aproximação de diferença finita

Para essa aproximação as células magnéticas são descritas como formas retangulares de dimensões h_x , h_y e h_z , e o sistema físico pode ser construído através do empilhamento dessas células. Devido à proposta de Brown, cada uma das células pode ser composta por inúmeros spins, os quais apresentam características e comportamento coletivo. Além disso, usualmente as dimensões das células podem

variar entre 1 e 20 nm, ou de acordo com o sistema físico a ser descrito. Porém, todas as células que compõem um sistema devem possuir as mesmas dimensões.

A aproximação de diferença finita apresenta uma enorme facilidade de localização das células magnéticas, pois além de apresentarem dimensões idênticas, estas são facilmente localizadas devido a sua forma. O grande problema da aproximação de diferença finita surge pela simplicidade das células magnéticas, já que a utilização de paralelepípedos restringe geometricamente a construção do sistema.

Mesmo apresentando essa limitação, tal aproximação é amplamente utilizada e será implementada nesse trabalho.

Aproximação de elementos finitos

A aproximação de elementos finitos²⁶ é capaz de construir formas diversas, pois suas células magnéticas são irregulares. Diferentemente do caso anterior, esse caso molda as células ao sistema físico. Dessa forma a restrição geométrica pode ser contornada. Porém, a irregularidades das células exigirá tratamentos diferentes.

A utilização dessa aproximação é apenas vital caso haja interesse em determinados tipos de sistemas. Alguns *softwares* fazem uso de tal método, especialmente para o desenvolvimento de formas irregulares.

3.2.2 Processamento em paralelo - CUDA - NVIDIA

Cálculos envolvendo a teoria micromagnética têm sido vastamente utilizados, tanto para prever comportamentos de sistemas físicos, como na reprodução de resultados experimentais, visando um melhor entendimento. Rotinas que utilizam o micromagnetismo são caracterizadas pela evolução da magnetização em função do passo de tempo dt escolhido, sendo esse inferior ou da ordem de 100 ps. Portanto, é necessário um grande número de passos até que o sistema magnético atinja ou tenda a um estado de equilíbrio. Além disso, a utilização de um número elevado de células magnéticas, o que por um lado melhora a descrição do sistema real, por outro lado aumenta significativamente o tempo computacional, de forma que tais simulações tendam a durar dias ou meses. Assim o processamento convencional é pouco eficaz e são necessárias outras alternativas de processamento.

O desenvolvimento do processamento em paralelo em placas gráficas (PP-GPU), possibilitou a substituição de supercomputadores por placas gráficas (GPU), as quais podem apresentar o mesmo desempenho com um custo 20 vezes menor. Para se ter uma ideia placas da linha (Geforce) já apre-

sentam cerca de 3200 cuda cores, ou seja 3200 núcleos de processamento, enquanto que as placas desenvolvidas especificamente para desenvolvimento científico (Tesla) apresentam cerca de 2500 cuda cores, com uma enorme velocidade de acesso a sua memória. Além do baixo custo em relação a supercomputadores, a empresa NVIDIA, desenvolvedora da linguagem CUDA e das GPU's, demonstra uma postura animadora, lançando novos pacotes, acrescentando novas funções (cuFFT, cuRAND) conforme a demanda e assim evoluindo cada vez mais suas GPU's.

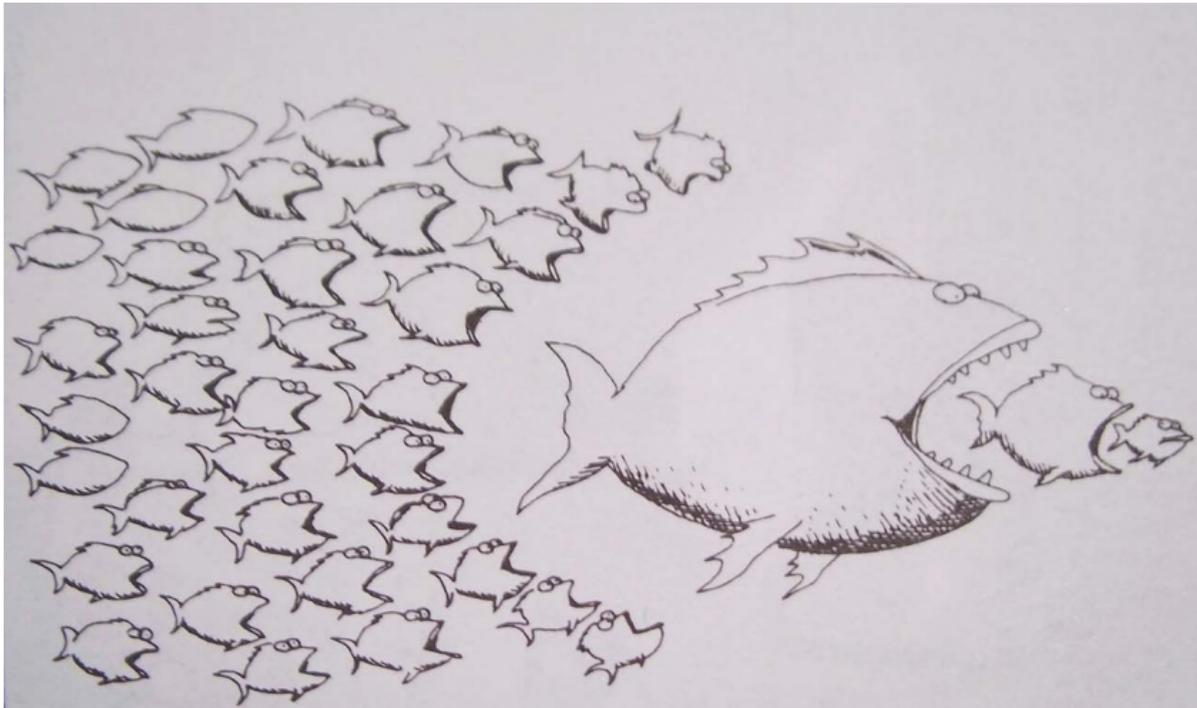


Figura 3.1: Descrição pictórica do funcionamento do processamento convencional vs paralelo, onde para o processamento convencional, o tamanho e a potência são de suma importância; já para o processamento em paralelo, o número de cores e sua velocidade inter-comunicação são as principais virtudes.

A linguagem CUDA trabalha com o conceito de *thread* ou tarefas, o qual pode ser entendido como uma divisão de tarefas, as quais são realizadas simultaneamente; os *thread* são englobados em um *block*, ou seja, um *block* conterá informações de vários *threads*, e será encaminhado para que determinado conjunto de processadores executem as tarefas cabíveis. Algumas limitações são impostas, como por exemplo: um *block* pode conter 1024 *thread*, isto é, a dimensão do *block* não pode exceder 1024 elementos. Felizmente, o usuário pode criar certo número de *blocks*, e esse é apenas limitado pelo número máximo de *threads*, cerca de $2^{31} - 1$.

Tais *blocks* são localizados em um *grid*, o qual conterá todo o conjunto de *blocks*. *Threads*, *blocks* e *grid* podem ser definidos em uma, duas ou três dimensões. As definições de *block* e *grid* são de suma importância para a realização de rotinas na GPU, pois ambas fornecem o número exato e a localização dos elementos (*threads*). As rotinas executadas no kernel da GPU valem todos os *threads* definidos

pelo *grid* em paralelo, sem a necessidade da utilização de laços como *for* ou *while*. Assim, caso o *grid* seja definido de maneira errada, os elementos podem não ser computados ou elementos não definidos podem ser computados.

Além de contar com a estrutura de *grid*, as GPU's apresentam quatro tipos de memória, definidas abaixo:

- I Memória Global (GM) - tem como objetivo guardar todas informações necessárias para as rotinas realizadas na GPU's e realização do vínculo entre CPU e GPU. Os vetores são alocados e transferidos para a GM antes da execução do kernel na GPU. GPU's atuais apresentam memórias entre 2 e 6 GB. Entretanto, o acesso a essa memória pode vir a ser lento, e o número de acessos a memória global torna o cálculo demorado.
- II Memória Compartilhada (SM) - é caracterizada por apresentar grande velocidade de acesso. Em contrapartida, sua memória é extremamente limitada, cerca de 20 kB. Além disso, a SM é apenas acessível para elementos presentes no mesmo *block*, e caso seja necessário a utilização de elementos de *blocks* distintos, uma nova rotina deve ser feita, que passará os dados para a GM, a qual pode ser acessada por qualquer elemento, independente de seu índice de *block*.
- III Memória Constante (CM) - pode ser entendida como um espaço alocado para as constantes de interesse.
- IV Memória de Device (DM) - é utilizada em casos que não há necessidade de comunicação com a CPU. Variáveis auxiliares podem ser definidas apenas na DM.

Também é necessária a distinção de tarefas realizadas na CPU (host) e na GPU (device). Basicamente, o host é utilizado para o controle do device, fornecendo as tarefas e as informações para execução das tarefas. A linguagem *CUDA* oferece os novos tipos de funções listadas abaixo:

- I Função Global (GF) - chamada pelo host para execução de tarefas na GPU. Para ser executada, a função necessita do número total de elementos como salientado acima. GF é a base de todo o processamento em paralelo.
- II Função Device (DF) - apenas pode ser chamada pela GPU, ou seja, será chamada por funções globais. GF são utilizadas para compactação do código ou para a execução de sub rotinas dentro da GF.

As informações listadas aqui apenas servem como base para o entendimento e estão explicadas na referência.²⁷

3.3 Campo Efetivo

O campo efetivo pode ser entendido como a soma de todas as contribuições para a dinâmica de magnetização, sejam oriundas de mecanismos internos, como a interação de troca e anisotropias magnéticas, ou de externas, como campo magnético e o campo térmico. Muitos autores^{28,29} preferem subdividir o campo efetivo em campo local e campo global, separando interações de curto e longo alcance. Para este trabalho, essa divisão não se faz necessária, já que há utilização de apenas uma interação de longo alcance, a interação magnetoestática ou dipolar.

A equação 3.12 será reescrita em termos do campo efetivo \mathbf{H}_{eff} :

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\frac{\gamma}{\alpha^2 + 1} \mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} - \frac{\gamma\alpha}{\alpha^2 + 1} \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}). \quad (3.13)$$

3.3.1 Energia de Zeeman ou Energia do campo externo

A energia de Zeeman consiste na interação do campo externo com o momento magnético $\vec{\mu}$ (para o presente trabalho células magnéticas de dimensões h_x, h_y e h_z), o qual possui volume dV , podendo ser expressa pela seguinte forma:

$$E_{\text{ext}} = -M_s \int \mathbf{H}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{m} dV. \quad (3.14)$$

Para um campo magnético externo uniforme, a energia depende apenas da magnetização e do volume, não sendo afetado pela estrutura de domínios ou pela forma da amostra.

Derivando a expressão 3.14 em relação \mathbf{M} , obtemos sua formulação em campo. Dessa forma o campo Zeeman se reduz de forma trivial,

$$\mathbf{H}_{\text{Zeeman}} = \mathbf{H}_{\text{ext}}. \quad (3.15)$$

3.3.2 Energia de anisotropia

Como já descrito na seção 1.2, a energia de anisotropia de um FM dependerá da direção da magnetização em relação ao eixo estrutural do material. Esta dependência se origina na interação spin-órbita. Além disso, as anisotropias podem ser classificadas de forma distinta: anisotropia cristalina, gerada através de propriedades das estruturas cristalinas não perturbadas, ou anisotropias induzidas, representada por defeitos induzidos ou por desvios na simetria original.

Energia de anisotropia uniaxial

A energia de Anisotropia Uniaxial pode ser expressa pela seguinte equação:

$$E_{uni} = \int_V K_1 [1 - (\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{m})^2] dV; \quad (3.16)$$

derivando a equação 3.16, se obtém o campo uniaxial \mathbf{H}_{uni} ,

$$\mathbf{H}_{uni} = \frac{2K_1}{\mu_0 M_s} (\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{m}) \mathbf{u}_k. \quad (3.17)$$

Energia de anisotropia de troca

Para o caso da anisotropia de troca, avanços na sua formulação foram realizados. Os trabalhos atuais são a chave para melhor compreensão da interação. Uma boa síntese sobre modelos que descrevem essa anisotropia pode ser encontrada no artigo de revisão de Berkowitz e Takano.³⁰ O primeiro modelo assume uma interface ideal, ou seja camadas FM e AFM monocristalinas, com a camada AFM interfacial completamente não compensada. Dessa maneira, o campo de anisotropia de troca $\mathbf{H}_{ex}^{FM/AFM}$ pode ser expresso por:

$$\mathbf{H}_{ex}^{FM/AFM} = \frac{2J_{ex} \mathbf{m}_{AFM}}{a^2 M_s^{FM} t_{FM}}, \quad (3.18)$$

em que J_{ex} é o parâmetro de troca interfacial, \mathbf{m}_{AFM} é a componente das magnetização do material AFM, a^2 é correspondente a área de contato (para nosso caso $h_x \times h_y$), M_s^{FM} é a magnetização de saturação do FM e t_{FM} é a sua espessura.

Entretanto, a aplicação dessa formulação resulta em valores de campo cerca de cem vezes maiores do que os obtidos experimentalmente. Modelos como o de parede de domínio interfacial³¹ e de campo aleatório³² mostravam uma aparente solução para o problema, pois resultavam na redução no campo gerado por essa anisotropia.

Cerca de 10 anos após o desenvolvimento desses modelos, os resultados experimentais obtidos via magnetização termo-remanente,^{33,34} mostraram que apenas 1% dos momentos interfaciais do AFM eram não compensados. Assim, a baixa densidade de momentos não compensados na interface torna consistente o valor de energia obtido para o modelo de interface ideal, em que se assume que todos os momentos da interface do AFM são não compensados.

3.3.3 Energia de troca

Para o caso da Energia de troca é necessário uma abordagem mais cuidadosa, pois o sistema pode ser construído com dimensões finitas mas utilizando condições periódicas de contorno (CPC); com essa condição são criados sistemas que não apresentam bordas reais e a interação de troca não sofrerá mudanças devido às limitações nas bordas. É possível construir sistemas com bordas finitas, tal que os elementos das bordas sofram interações de troca distintas, já que não haverão células magnéticas para que a interação aconteça.

O tratamento da interação de troca para bordas de um sistema finito foi desenvolvido por Donahue e Porter,³⁵ os quais aplicaram condições de contorno sob a formulação da interação de troca desenvolvida por Brown. A formulação de Brown expressa a energia de troca E_{ex} da seguinte maneira:

$$E_{ex} = \int_V A_{ex} (|\nabla m_x|^2 + |\nabla m_y|^2 + |\nabla m_z|^2) dV, \quad (3.19)$$

a qual pode ser reescrita na seguinte formulação:

$$E_{ex} = - \int_V A_{ex} \mathbf{m} \cdot \left(\frac{\partial^2 \mathbf{m}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{m}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{m}}{\partial z^2} \right) dV, \quad (3.20)$$

onde A_{ex} é a constante de acoplamento, mais conhecida como de stiffness.

A partir dela pode ser obtido o campo de troca \mathbf{H}_{ex} através de expansões em séries de Taylor, até segunda ordem para esse caso, resultando em:

$$\mathbf{H}_{ex} = \frac{2A_{ex} \Delta \mathbf{m}}{\mu_0 M_s}, \quad (3.21)$$

tal que o operador Δ atuando sobre \mathbf{m} é expresso da seguinte forma para a componente x :

$$\Delta m_x = \frac{\partial^2 m_x}{\partial x^2}, \quad (3.22)$$

que por sua vez será igual a equação 3.23, caso seja utilizado o método de primeiros vizinhos,

$$\frac{\partial^2 m_x}{\partial x^2} = \frac{m(i-1, j, z) - 2m(i, j, z) + m(i+1, j, z)}{h_x^2}. \quad (3.23)$$

As equações 3.22 e 3.23 também são válidas para as componentes y e z se aplicadas as substituições corretas; a localização dos primeiros vizinhos pode ser melhor compreendida observando a figura 3.2.

Ainda é preciso definir a equação em termos dos coeficientes da esquerda c_e , da direita c_d e da

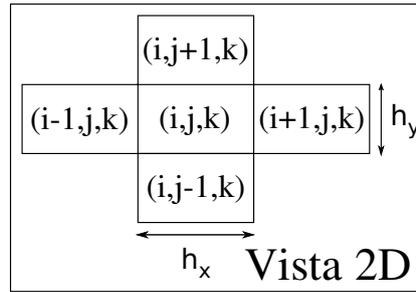


Figura 3.2: Vista 2D dos primeiros vizinhos da célula magnética que sofre interação de primeiros vizinhos.

própria célula magnética c_p . Portanto, a equação 3.23, é reescrita como:

$$\frac{\partial^2 m_x}{\partial x^2} = \frac{c_e m(i-1, j, z) + c_p m(i, j, z) + c_d m(i+1, j, z)}{h_x^2}. \quad (3.24)$$

A formulação mostrada pela equação 3.23 pode ser aplicada a sistemas contínuos, isto é, com CPC. Quando há interesse de levar em conta os efeitos de sistemas finitos, dois métodos podem ser considerados. Um desses usa condições de contorno de Dirichlet (CCD) e o outro usa condições de contorno de Neumann. As condições de contorno do tipo de Dirichlet apresentam erros inferiores no cálculo do campo de troca e portanto esse método será utilizado.

O erro citado é intrínseco da formulação de Brown devido à expansão em séries de Taylor e, quando o ângulo entre dois momentos tender a 90° , o erro será não desprezível. Todavia, realizando as correções citadas acima, os erros obtidos são inferiores a 0,1%.

O trabalho de Donahue e Porter³⁵ oferece métodos para 6, 12, e 26 vizinhos, além de apontar o método de CCD para 12 vizinhos como o mais bem sucedido. Mostrando passo a passo o cálculo dos coeficientes de interação. Neste trabalho tanto o métodos de 6, quanto o de 12 vizinhos utilizando CCD foram implementados, mas a maioria dos testes foi realizada utilizando o método de 12 vizinhos.

CCD - 6 vizinhos

Levando em conta a interação apenas entre os seis primeiros vizinhos, os termos a serem corrigidos pela presença da borda real serão aqueles que estiverem na borda ou que sejam primeiros vizinhos que fazem parte da borda. Novamente, as operações realizadas são válidas para as componentes cartesianas. Por simplicidade, apenas a componente x será escrita.

Retomando a equação 3.23, necessitamos agora aplicar tratamentos diferenciados para os termos que são influenciados pela existência da borda. Os coeficientes podem ser visualizados na figura 3.3, sendo que a região escura corresponde à célula magnética que fará a interação com os demais vizinhos,

a qual será ponderada pelos coeficientes c_e , c_p , c_d . Percebe-se que as células magnéticas que não interagem com vizinhos da borda apresentam os mesmos coeficientes mostrados na equação 3.23: $c_e = 1$, $c_p = -2$ e $c_d = 1$.

-7/6	+7/6				
+7/6	-13/6	+1			
	+1	-2	+1		
		+1	-2	+1	
			+1	-13/6	+7/6
CCD - 6 vizinhos				+7/6	-7/6

Figura 3.3: Coeficientes de interação para o método CCD - 6 vizinhos.

CCD - 12 vizinhos

Abordando o tratamento do campo de troca através da interação até segundos vizinhos, obtêm-se, via expansão de Taylor até sexta ordem, a seguinte expressão:

$$\frac{\partial^2 m_x}{\partial x^2} = \frac{-m(i-2, j, z) + 16m(i-1, j, z) - 30m(i, j, z) + 16m(i+1, j, z) - m(i+2, j, z)}{12h_x^2}. \quad (3.25)$$

Novamente apenas as componente referentes a contribuição do campo de troca em x serão descritas. A equação 3.25 pode ser reescrita em termos dos coeficientes, como na caso anterior. Porém, agora a interação acontecerá com dois elementos, da esquerda e da direita, e será descrita pelos seguintes coeficientes: c_{2e} , c_{1e} , c_p , c_{1d} e c_{2d} , obedecendo a ordem da esquerda para a direita.

$$\frac{\partial^2 m_x}{\partial x^2} = \frac{c_{2e}m(i-2, j, z) + c_{1e}m(i-1, j, z) + c_p m(i, j, z) + c_{1d}m(i+1, j, z) + c_{2d}m(i+2, j, z)}{12h_x^2}. \quad (3.26)$$

Seguindo arranjo de coeficientes, da mesma maneira da descrita anteriormente, basta localizar a área sombreada na figura 3.4. Os coeficientes de interação são baseados na localização de cada vizinho. Além disso, pode ser notado que para o método CCD com 12 vizinhos existem pequenas correções mesmo para células que não possuem contato direto com células presentes a borda.

O método de CCD para 26 vizinhos apresenta erros para o calculo do campo maiores do que o esperado. Esses são maiores do que para o método simplório CCD para 6 vizinhos e, portanto, não há necessidade de abordá-lo.

A utilização do método CCD para 6 vizinhos apresenta a vantagem de facilidade na implementação

-11.0	12.2	-1.2								
12.2	-29.6	18.8	-1.4							
-1.2	18.8	-33.0	16.3	-1.4						
	-1.4	16.3	-30.0	16.0	-1.0					
		-1.0	16.0	-30.0	16.0	-1.0				
			-1.0	16.0	-30.0	16.0	-1.0			
				-1.0	16.0	-30.0	16.3	-1.4		
					-1.4	16.3	-33.0	18.8	-1.2	
						-1.4	18.8	-29.6	12.2	
							-1.2	12.2	-11.0	

CCD - 12 vizinhos

Figura 3.4: Coeficientes de interação para o método CCD - 12 vizinhos.

do código. Ele pode ser útil para simulações não estáticas, em que apenas a magnetização total interessa, ou para casos nos quais a interação magnetoestática é desprezada e se queira realizar testes rápidos sobre o sistema físico de interesse. Para simulações mais robustas e confiáveis devemos utilizar do método CCD para 12 vizinhos. Vale salientar que o tempo necessário para a realização do cálculo da interação magnetoestática é pelo menos vezes N (número de células magnéticas) maior do que o tempo para o cálculo da interação de troca.

Para que o tópico energia de troca possa ser finalizado, resta a inclusão do termo que conecta materiais com diferentes propriedades, como por exemplo a interação entre dois materiais magnéticos distintos.

Acoplamento interfacial via troca

Se um FM está em contato com outro material (caso geral para filmes finos compostos por multicamadas), a interação de troca irá acoplar estas camadas. Normalmente a força da interação interfacial pode ser muito pequena se comparada ao acoplamento originado pelo bulk. Além disso ela não pode ser obtida a partir das propriedades volumétricas dos materiais envolvidos. Sua primeira observação foi realizada em sistemas compostos por camadas de Fe separadas por finas camadas de Cr.³⁶

A energia de troca interfacial pode ser fenomenologicamente deduzida como:

$$E_{exi} = \int_S [C_{bl} (1 - \mathbf{m}_a \cdot \mathbf{m}_b) + C_{bq} (1 - (\mathbf{m}_a \cdot \mathbf{m}_b)^2)] dS, \quad (3.27)$$

em que \mathbf{m}_a e \mathbf{m}_b são as magnetizações dos momentos interagentes na interface, e C_{bl} e C_{bq} são as constantes de acoplamentos bilinear e biquadrática, respectivamente. De mesma forma que para o

caso da interação de troca de Heisenberg, o sinal da constante influenciará se a interação é do tipo FM (momentos paralelos), ou tipo AFM (momentos antiparalelos). De acordo com o conhecimento atual, o termo bilinear está relacionado ao acoplamento apresentado na seção 3.3.3, já o termo biquadrático está associado com propriedades extrínsecas do sistema, como por exemplo flutuações espaciais e defeitos interfaciais.³⁷

Esse acoplamento interfacial pode ser desprezado caso as dimensões da células magnéticas h_x , h_y e h_z sejam superiores a 2 nm.

3.3.4 Energia magnetoestática

A energia magnetoestática é considerada o grande obstáculo para rotinas que utilizam o formalismo micromagnético. Sendo essa uma interação de longo alcance, é necessário o seu cálculo para todas as células do sistema físico. Assim, cada célula interagirá com as demais. Os termos a serem computados serão da ordem $O(N^2)$, tornando a rotina numérica extremamente lenta, já que, para cada ciclo realizado, a interação magnetoestática será recalculada. Esse problema tem sido abordado ao longo das últimas três décadas e muitas metodologias para acelerar a obtenção dessa energia foram desenvolvidas, sendo algumas delas:

- I Interação Dípolo-Dípolo - Utilizada de maneira clássica, a interação necessita ser calculada com termos da ordem $O(N^2)$.
- II Fast Multipole Method³⁸ (FMM) - Considerado um dos grandes algoritmos do séc XX, esse método pode reduzir a ordem de interações para $O(N \log N)$. Entretanto, ele foi originalmente desenvolvido para cargas elétricas e não para momentos magnéticos. Muitos dos trabalhos que o aplicam utilizam uma linguagem confusa impossibilitando a implementação do algoritmo de forma adequada. Portanto, ele não foi utilizado neste trabalho.
- III Fast Fourier Transform³⁹ (FFT) - Possivelmente, esse é o mais consolidado e bem aceito entre as ferramentas de cálculo da interação dipolar. Também é possível reduzir a ordem das interações para $O(N \ln N)$ e apresentar erros da ordem da precisão numérica da linguagem utilizada. Caso sejam considerados algumas propriedades de simetrias, o número de interações pode decrescer para a ordem $O(N)$. A sua desvantagem é a utilização de memória, a qual será abordada com mais detalhes no tópico Cálculo via Fast Fourier Transform.
- IV TensorGrid⁴⁰ - (TG) - Por ser um método recente e ainda não completamente explorado, esse será apenas citado. Resultados disponíveis hoje indicam que o TG supera os demais por ser mais

rápido, utilizar menos memória e possuir erros de cálculo pouco expressivos. Possivelmente, esse será o método utilizado nas simulações micromagnéticas em um futuro próximo.

Neste trabalho, somente os itens I e III foram implementados. Suas descrições detalhadas estão logo abaixo.

Interação Dipolo-Dipolo

Utilizando como base a Eletrodinâmica Clássica,⁴¹ pode-se mostrar que o potencial vetor gerado por um dipolo magnético é ser escrito da seguinte forma:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{r}}{r^3} = \frac{\mu_0 V}{4\pi M_s} \frac{\mathbf{m} \times \mathbf{r}}{r^3}, \quad (3.28)$$

onde \mathbf{r} é a distancia entre o momento e a localização onde se deseja calcular sua influência e V é o volume do momento magnético. Para a obtenção do campo magnetoestático, basta realizar a seguinte operação:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{B}(\mathbf{r})}{\mu_0} = \frac{\nabla \times \mathbf{A}}{\mu_0}. \quad (3.29)$$

Substituindo o potencial vetor da equação 3.28 em 3.29, e aplicando o rotacional, obtemos:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{V}{4\pi M_s} \left(\frac{(\mathbf{m} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}}{r^5} - \frac{\mathbf{m}}{r^3} \right); \quad (3.30)$$

a equação 3.30 ainda pode ser simplificada substituindo o módulo de \mathbf{r} pelo seu versor. Assim, o campo magnetostático poderá ser calculado pela seguinte expressão:

$$\mathbf{H}_{st} = \frac{V}{4\pi M_s} \left(\frac{(\mathbf{m} \cdot \hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{m}}{r^3} \right). \quad (3.31)$$

Como já mencionado, o método clássico requer o cálculo do número de interações de ordem $O(N^2)$ já que, para cada célula magnética, é necessária a soma das interações com as demais. Portanto, escrevemos o campo magnetoestático exercido sob a célula magnética i como:

$$\mathbf{H}_{st}^i = \sum_{j, j \neq i} \mathbf{H}_{st}^j. \quad (3.32)$$

Este procedimento é repetido N vezes, tornando o calculo demorado. Além do mais, os resultados obtidos pela equação 3.31 apenas são válidos se a distância entre os dipolos for muito maior do que o tamanho dos dipolos, o que torna a utilização de tal método inválida para sistemas FM contínuos.

Tensor de Desmagnetização

O método de tensor de desmagnetização é uma alternativa para o cálculo do campo dipolar. O campo magnetoestático de um corpo uniformemente magnetizado pode ser escrito em termos do tensor de desmagnetização \mathbf{N} :

$$\mathbf{H}_{\text{st}} = -\mathbf{N} \cdot \mathbf{M}, \quad (3.33)$$

em que \mathbf{N} é definido como:

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_{xx} & N_{xy} & N_{xz} \\ N_{yx} & N_{yy} & N_{yz} \\ N_{zx} & N_{zy} & N_{zz} \end{bmatrix}.$$

Voltando à teoria micromagnética, torna-se possível reescrever o campo magnetoestático para corpos não uniformemente magnetizados, se o tensor de desmagnetização possuir dependência espacial. Assim, o campo exercido sob o elemento i será:

$$\mathbf{H}_{\text{st}} = -\sum_j \mathbf{N}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{M}_j = -M_s \sum_j \mathbf{N}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{m}_j, \quad (3.34)$$

sendo:

$$\mathbf{N}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{1}{4\pi r_i} \int_{S_j} dS \int_{S_j^!} \frac{dS'}{|r - r'|}, \quad (3.35)$$

em que S representa a superfície das células magnéticas.

A aplicação do tensor de desmagnetização em células retangulares foi realizada por Newell⁴² e consiste em integrais de superfície sob todas as faces da célula. O cálculo é realizado entre duas células localizadas nas posições (x, y, z) e (x', y', z') , sendo as coordenadas referentes ao canto mais próximo da origem do sistema de coordenadas, assim as posições relativas entre células interagentes serão (r_x, r_y, r_z) , de forma que $(r_x = x - x', r_y = y - y', r_z = z - z')$.

Obtendo N_{xx}

Utilizando essas definições, a componente do tensor de desmagnetização N_{xx} pode ser expressa por:

$$N_{xx} = \frac{1}{4\pi r} [2F(r_x, r_y, r_z) - F(r_x + h_x, r_y, r_z) - F(r_x - h_x, r_y, r_z)]. \quad (3.36)$$

Lembrando que h_x, h_y, h_z são as dimensões da célula magnética e F é a integral nas faces $y, z, y + h_y$ e $z + h_z$, sendo F uma integral definida, podemos escreve-la em termos do resultado de sua integral $F1$

que por sua vez também poderá ser escrita em termo de F_2 , que por fim, é escrita em termos de f , uma integral indefinida. Portanto, a obtenção de F é feita de forma recorrente, seguindo os seguintes passos:

$$F(r_x, r_y, r_z) = F_1(r_x, r_y, r_z) - F_1(r_x, r_y + h_y, r_z) - F_1(r_x, r_y, r_z + h_z) + F_1(r_x, r_y + h_y, r_z + h_z), \quad (3.37)$$

em que F_1 será:

$$F_1(r_x, r_y, r_z) = F_2(r_x, r_y, r_z) - F_2(r_x, r_y - h_y, r_z) - F_2(r_x, r_y, r_z - h_z) + F_2(r_x, r_y - h_y, r_z - h_z), \quad (3.38)$$

para finalizar:

$$F_2(r_x, r_y, r_z) = f(r_x, r_y, r_z) - f(r_x, 0, r_z) - f(r_x, r_y, 0) + f(r_x, 0, 0); \quad (3.39)$$

onde f é expresso por:

$$\begin{aligned} f(r_x, r_y, r_z) = & \frac{r_y}{2} (r_z^2 - r_y^2) \sinh^{-1} \left(\frac{r_y}{\sqrt{r_x^2 + r_z^2}} \right) + \\ & \frac{r_z}{2} (r_y^2 - r_x^2) \sinh^{-1} \left(\frac{r_z}{\sqrt{r_x^2 + r_y^2}} \right) - \\ & r_x r_y r_z \tan^{-1} \left(\frac{r_y r_z}{r_x R} \right) + \frac{1}{6} (2r_x^2 - r_y^2 - r_z^2) R, \end{aligned} \quad (3.40)$$

onde $R = \sqrt{r_x^2 + r_y^2 + r_z^2}$.

Obtendo N_{xy}

De maneira análoga, o processo para computar N_{xy} é realizado:

$$N_{xy} = \frac{1}{4\pi r} [G(r_x, r_y, r_z) - G(r_x - h_x, r_y, r_z) - G(r_x, r_y + h_y, r_z) + G(r_x - h_x, r_y + h_y, r_z)], \quad (3.41)$$

onde

$$G(r_x, r_y, r_z) = G1(r_x, r_y, r_z) - G1(r_x, r_y - h_y, r_z) - G1(r_x, r_y, r_z - h_z) + G1(r_x, r_y - h_y, r_z - h_z); \quad (3.42)$$

mas,

$$G1(r_x, r_y, r_z) = G2(r_x, r_y, r_z) - G2(r_x + h_x, r_y, r_z) - G2(r_x, r_y, r_z + h_z) + G2(r_x + h_x, r_y, r_z + h_z), \quad (3.43)$$

em que,

$$G2(r_x, r_y, r_z) = g(r_x, r_y, r_z) - g(r_x, r_y, 0), \quad (3.44)$$

sendo g :

$$\begin{aligned} g(r_x, r_y, r_z) = & (r_x r_y r_z) \sinh^{-1} \left(\frac{r_z}{\sqrt{r_x^2 + r_y^2}} \right) \\ & + \frac{r_y}{6} (3r_z^2 - r_y^2) \sinh^{-1} \left(\frac{r_x}{\sqrt{r_y^2 + r_z^2}} \right) \\ & + \frac{r_x}{6} (3r_z^2 - r_x^2) \sinh^{-1} \left(\frac{r_y}{\sqrt{r_x^2 + r_z^2}} \right) \\ & - \frac{r_z^3}{6} \tan^{-1} \left(\frac{r_x r_y}{r_z R} \right) - \frac{r_x r_y^2}{2} \tan^{-1} \left(\frac{r_x r_z}{r_y R} \right) \\ & - \frac{r_z r_x^2}{2} \tan^{-1} \left(\frac{r_y r_z}{r_x R} \right) - \frac{r_x r_y R}{3}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

As demais componentes do tensor de desmagnetização podem ser obtidas por permutações entre as variáveis, como por exemplo: se $N_{xx}(r_x, r_y, r_z, h_x, h_y, h_z)$ é tal que, $N_{yy} = N_{xx}(r_y, r_x, r_z, h_y, h_x, h_z)$, nota-se que apenas substituímos as componentes r_x e r_y e seus respectivos tamanhos. O mesmo será válido para as demais componentes.

O procedimento de obtenção do tensor de desmagnetização parece exaustivo, mas essa rotina é utilizada uma única vez, quando começam os procedimentos de cálculo. Ainda basta que o tensor de desmagnetização seja calculado para a primeira célula magnética, ou para qualquer célula localizada nos cantos do retângulo, e está recebe o nome de célula primordial. Os demais tensores podem ser montados com base nas componentes do tensor para célula primordial.

A figura 3.5 (a) apresenta um exemplo para um caso bidimensional composto por 16 células, justapostas para a formação de um quadrado. A célula primordial se localiza no canto superior esquerdo e é identificada pela região pintada em azul. Cada célula está acompanhada por uma letra tal que corresponda a sua respectiva componente do tensor.

O processo de construção dos demais tensores necessita a localização da célula magnética i que sofrerá interação com os demais vizinhos. Aplicamos os resultados para a célula primordial, como pode ser observado na figura 3.5 (b), em que a célula i se localizada no bloco em vermelho, juntamente com as respectivas contribuições do tensor de desmagnetização em função da simetria do sistema.

Para finalizar, devemos analisar a ocorrência de trocas de sinal nas componentes do tensor de

(a)	a	b	c	d	(b)	f	e	f	g
	e	f	g	h		b	a	b	c
	i	j	k	l		f	e	f	g
	m	n	o	p		j	i	j	k

Figura 3.5: Em (I) é criado o mapa de rastreamento das posições do tensor de desmagnetização, para a partícula localizada na posição indicada pelo quadrado azul. A partir desse, podemos reconstruir o tensor para todas as células magnéticas como mostrado em (II), sendo que a célula magnética está localizada no quadrado vermelho.

desmagnetização ao montá-lo através da célula primitiva. A paridade dependerá do comportamento das funções 3.40 e 3.45 as quais são, respectivamente, par e ímpar. Assim, os valores de 3.40 independem do sinal das componentes r_x, r_y, r_z . Já a equação 3.45 apresentará alterações baseadas nos sinais de r_x, r_y, r_z , tal que as componentes do tensor de desmagnetização que não fazem parte da diagonal principal sofreram as seguintes alterações:

$$\begin{aligned}
 N_{xy} &= -N_{xy}, \text{ para } r_x < 0 \text{ ou } r_y < 0, \\
 N_{yx} &= -N_{yx}, \text{ para } r_x < 0 \text{ ou } r_y < 0, \\
 N_{xz} &= -N_{xz}, \text{ para } r_x < 0 \text{ ou } r_z < 0, \\
 N_{zx} &= -N_{zx}, \text{ para } r_x < 0 \text{ ou } r_z < 0, \\
 N_{yz} &= -N_{yz}, \text{ para } r_y < 0 \text{ ou } r_z < 0, \\
 N_{zy} &= -N_{zy}, \text{ para } r_y < 0 \text{ ou } r_z < 0.
 \end{aligned} \tag{3.46}$$

Posteriormente a tal montagem, devemos determinar o campo magnetostático segundo a equação 3.34. Esse procedimento foi realizado de duas maneiras: através do método de soma via memória compartilhada ou via Fast Fourier Transform.

Método de soma em memória compartilhada

Utilizando os recursos da programação em paralelo nas placas gráficas, podemos tentar aplicar rotinas eficazes para o cálculo e a soma dos campos magnetoestáticos.

A ideia para acelerar o procedimento é composta por 3 etapas, ou seja, 3 funções globais, uma para

cada célula magnética. Abaixo segue a descrição do método para o campo exercido sobre a partícula i :

I Cálculo do campo magnetoestático - A influência dos demais elementos sob o elemento i é calculada utilizando a equação 3.34. Essa rotina necessita de N interações.

II Primeira soma em memória compartilhada - Os valores obtidos no passo I são transferidos para a memória compartilhada e um algoritmo de soma em paralelo é realizado. Esse algoritmo será descrito em dois passos: os N elementos correspondentes aos valores calculados em I encontram-se subdivididos em 4 *blocks* como mostrado será mostrado na figura 3.6 (a). Para facilitar a demonstração, assumimos que $N = 64$ e apenas o *block* com $id = 0$ será mostrado 3.6 (b). A lógica consiste em dobrar o vetor composto pelos *threads* do *block* $id = 0$ ao meio. Assim, as partes são sobrepostas e somadas até que não se possa mais subdividir o vetor, isto é, quando toda a soma estiver em um único elemento. Após somados, o número de componentes é reduzido de $O(N)$ para o número de *blocks*, e os valores resultantes são enviados para a memória global. A rotina necessita de $4N$ interações.

a,

$thread\ id = 0, 1, \dots, N/4 - 1$ $block\ id = 0$	$thread\ id = N/4, N/4 + 1, \dots, N/2 - 1$ $block\ id = 1$
$thread\ id = N/2, N/2 + 1, \dots, 3N/4 - 1$ $block\ id = 2$	$thread\ id = 3N/4, 3N/4 + 1, \dots, N - 1$ $block\ id = 3$

b,

$thread\ id = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15$	$block\ id = 0$
$(0 + 8), (1 + 9), (2 + 10), (3 + 11), (4 + 12), (5 + 13), (6 + 14), (7 + 15)$	sobreposição 1
$(0 + 8 + 4 + 12), (1 + 9 + 5 + 13), (2 + 10 + 6 + 14), (3 + 11 + 7 + 15)$	sobreposição 2
$(0 + 8 + 4 + 12 + 2 + 10 + 6 + 14), (1 + 9 + 5 + 13 + 3 + 11 + 7 + 15)$	sobreposição 3
$(0 + 8 + 4 + 12 + 2 + 10 + 6 + 14 + 1 + 9 + 5 + 13 + 3 + 11 + 7 + 15)$	sobreposição 4

Figura 3.6: Estrutura de dobras de vetor, utilizada para a soma em memória compartilhada.

III Segunda soma em memória compartilhada - Resta agora somar as componentes referentes ao número de *blocks*, utilizando o mesmo algoritmo do caso anterior. Assim, o campo magnetoestático para partícula i está pronto para ser utilizado no campo efetivo. Essa rotina necessita de N interações.

Logo, o conjunto de rotinas é executado para cada elemento, necessitando, então, de operações da ordem de $O(3 - 6N)$, dependendo apenas do número de elementos presentes.

O resultado da soma para cada uma das componentes da equação 3.34 é o campo dipolar, exercido sob a partícula i .

Uma alternativa para o cálculo do campo dipolar consiste em métodos FFT.

Cálculo via Fast Fourier Transform e operações no espaço de Fourier

Realizada a construção do tensor de desmagnetização, podemos dar início à redução do número de operações. Esta redução será da ordem $O(N^2)$ para $O(N \ln N)$ e é devida à convolução da equação 3.33. Para sua realização é necessária a passagem das componentes do vetor magnetização e do tensor de desmagnetização para o espaço de Fourier. Se tratando de uma Transformada de Fourier Discreta (DFT)⁴³ e tridimensional, essa passagem requer certas precauções para manter a integridade das componentes do problema e, para isso, usamos a técnica de *zero-padding*.⁴³

O princípio de utilização da técnica de *zero-padding* consiste em estender o sistema físico e preencher os novos espaços com valores nulos. Logo, se o sistema possuir dimensões (n_x, n_y, n_z) , o novo sistema deve conter pelo menos $(2n_x, 2n_y, 2n_z)$ elementos. Na figura 3.7 uma esquematização da aplicação da técnica de *zero-padding* para um sistema bidimensional pode ser observada.

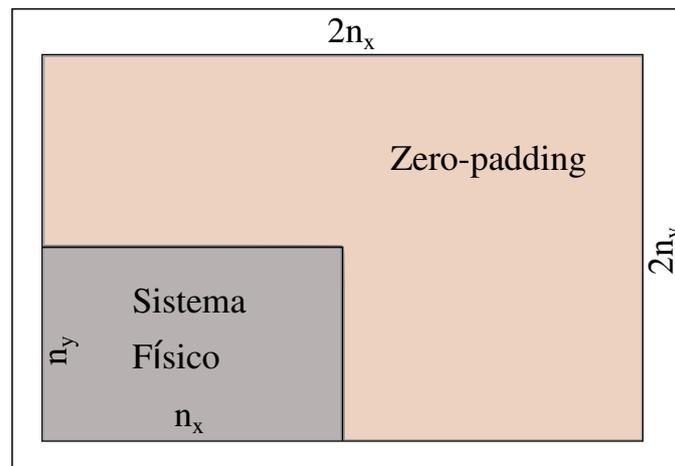


Figura 3.7: Visão 2D do conjunto de células, após a aplicação da técnica de *zero-padding*, a qual é necessária caso o sistema não apresente CCP; o espaço gerado pela técnica tem a finalidade de preservar a integridade do sistema físico durante a passagem desse para o espaço complexo.

Após a aplicação do *zero-padding*, as componentes do tensor de desmagnetização e do vetor magnetização são passadas para o espaço complexo por meio da rotina já fornecida nomeada de *cuFFT*. Nesse ponto, o espaço complexo tridimensional é gerado e deve respeitar as dimensões do sistema pós *zero-padding*.

Posteriormente (as componentes no espaço complexo são referenciadas pela notação \tilde{x}) a convolução

pode ser realizada:

$$\tilde{\mathbf{H}}_{st} = M_s \mathfrak{F}(\mathbf{N} \cdot \mathbf{m}) = M_s \tilde{\mathbf{N}} * \tilde{\mathbf{m}}. \quad (3.47)$$

Ela pode ser decomposta em termos da componentes cartesianas:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{st}^x &= M_s (\tilde{N}_{xx} * \tilde{m}_x + \tilde{N}_{xy} * \tilde{m}_y + \tilde{N}_{xz} * \tilde{m}_z), \\ \tilde{H}_{st}^y &= M_s (\tilde{N}_{yx} * \tilde{m}_x + \tilde{N}_{yy} * \tilde{m}_y + \tilde{N}_{yz} * \tilde{m}_z), \\ \tilde{H}_{st}^z &= M_s (\tilde{N}_{zx} * \tilde{m}_x + \tilde{N}_{zy} * \tilde{m}_y + \tilde{N}_{zz} * \tilde{m}_z). \end{aligned} \quad (3.48)$$

Lembramos que, ao passarmos as componentes para o espaço de Fourier, as variáveis reais \mathbb{R} se tornam complexas \mathbb{C} , e os produtos realizados na equação 3.48 são equivalentes a:

$$\mathbb{R}(\tilde{N}_{xx})\mathbb{R}(\tilde{m}_x) - \mathbb{I}(\tilde{N}_{xx})\mathbb{I}(\tilde{m}_x). \quad (3.49)$$

Resta agora a realização da transformada de Fourier inversa que atuará sobre as componentes do vetor do campo magnetoestático transformado $\mathbf{H}_{st} = \mathfrak{F}^{-1}(\tilde{\mathbf{H}}_{st})$. Basta adicionar o campo magnetoestático que atua sob a célula i ao campo efetivo.

A rotina de FFT pode ser resumida pelos seguintes passos:

- I Calculo do tensor de desmagnetização - cálculo e armazenamento das componentes do tensor de desmagnetização. Nove componentes são necessárias. Contudo, utilizando o método da célula primordial, o tensor é calculado apenas para uma célula.
- II *Zero – padding* - A garantia da integridade da informação requer a expansão do sistema, e o espaço expandido é preenchido com valores nulos. Esse processo é aplicado nas componentes do vetor magnetização e nas componentes do tensor de inércia.
- III Transformação de Fourier - As componentes são enviadas separadamente ao espaço complexo de forma que são necessárias 3 vetores auxiliares complexos para a magnetização e 9 vetores auxiliares complexos para o tensor de desmagnetização. Felizmente, durante o cálculo apenas as componentes da magnetização precisam ser atualizados, visto que o tensor de desmagnetização permanecera idêntico, e depende somente da simetria do sistema.
- IV Convolução - Deve seguir a ordem mostrada na equação 3.48.
- V Transformada inversa de Fourier - Revertendo a transformada de Fourier, o calculo do campo magnetoestático está realizado.

Seria possível aprimorar esse método explorando as simetrias do tensor de desmagnetização,⁴⁴ mas isso não foi necessário, visto que o cálculo via método memória compartilhada foi mais eficaz. Além disso, o cálculo via SM não requer processos intermediários como o de *zero – padding*, sendo que esse também apresenta uma redução na memória necessária para alocar os valores do tensor de desmagnetização. Comparações entre o tempo consumido por ambos os métodos serão mostradas na seção de resultados.

3.3.5 Flutuações térmicas

Mesmo antes de realizar a formulação micromagnética, Brown já havia antecipado o modo como as flutuações térmicas modificam um sistema de momentos,⁴⁵ sendo o campo térmico escrito da seguinte maneira:

$$\mathbf{H}_{\text{th}} = \vec{\omega}(t) \sqrt{\frac{2\alpha k_B T}{\gamma\mu_0 M_s V \delta t}}. \quad (3.50)$$

Aqui $\vec{\omega}(t)$ é uma variável estocástica e pode assumir valores no intervalo $[-1 : 1]$, sendo que a probabilidade é ponderada por uma função gaussiana centrada em 0 com $\sigma = 0,6$.

A linguagem CUDA oferece uma biblioteca cuRAND para a utilização de variáveis aleatórias em paralelo; trata-se de uma sub rotina que acelera o processo de criação de números aleatórios de forma a utilizar todos os processadores da GPU. Uma descrição mais detalhada pode ser encontrada no trabalho de Januszewski e Kostur.⁴⁶

3.3.6 Sumário

Para as simulações fornecerem informações mais próximas da realidade, a utilização dos campos descritos é imprescindível. Portanto, se a análise for feita sem o uso de algum deles, a descrição do sistema físico não será correta. Assim, o campo efetivo deve conter pelo menos as seguintes contribuições:

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H}_{\text{Zeeman}} + \mathbf{H}_{\text{uni}} + \mathbf{H}_{\text{ex}} + \mathbf{H}_{\text{st}}. \quad (3.51)$$

A magnitude desses campos está associada a suas constantes, que podem ser visualizadas na tabela 3.1.

Tabela 3.1: Ordem de grandeza média dos campos principais utilizados.

Termo de energia	Coefficiente	Definição	Faixa
Energia de troca	A_{ex}	Constante do material	$10^{-12} - 1 \times 10^{-11} \text{ J/m}$
Energia de anisotropia	$K_u, K_c \dots$	Constante do material	$(\pm 10^2 - 2 \times 10^7) \text{ J/m}^3$
Energia do campo externo	H_{ext}	Parâmetro externo	Amplitude do campo
Energia magnetostática	K_{st}	$K_{st} = M_s^2 / 2\mu_0$	$0 - 3 \times 10^6 \text{ J/m}^3$

4 *Ferramentas para evolução temporal da magnetização*

Esta seção tem como objetivo elucidar os métodos de integração implementados no *software* construído, além de explicar as rotinas para a evolução temporal, já que possuem diferentes critérios de estabilidade.

4.1 Métodos de Integração

Existem diferentes métodos de integração que poderiam ser utilizados, como é possível verificar na literatura. Diferentes grupos fazem o uso de diferentes técnicas para a evolução temporal da LLG. Alguns autores sugerem a utilização de métodos mais simplórios e velozes, como por exemplo o método de Euler; outros indicam o uso de métodos sofisticados como Runge-Kutta de 4ª ordem.

Além desses procedimentos, a equação de Landau-Lifshitz-Gilbert também pode ser integrada por métodos semi-analíticos, como é mostrado no trabalho de Ben Van de Wiele.⁴⁷ Além disso, esse trabalho apresenta que, para passos de integração (dt) da ordem de 1×10^{-13} a 7×10^{-11} s, todos os métodos citados possuem erros intrínsecos pequenos e consistentes entre si. Contudo, para o caso em que $dt > 7 \times 10^{-11}$ s, o método de Euler possui erros significativos, sendo aconselhado a utilização de métodos de Runge-Kutta.

Para a realização dos cálculos de dinâmica de magnetização, é necessário que os passos de integração sejam ainda menores, isto é, da ordem de 1×10^{-15} s a 3×10^{-14} s. Portanto, a implementação de métodos mais sofisticados que incluam técnicas de passo adaptativo faz-se necessária; logo o método de Bogacki-Shampine,⁴⁸ o qual é baseado no método de Runge-Kutta de terceira ordem, surge como alternativa.

As ferramentas de integração podem ser descritas de forma genérica, onde que as seguintes trocas

de variáveis são realizadas:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_t &= \mathbf{y}_n; \quad \mathbf{m}_{t+dt} = \mathbf{y}_{n+1}, \\ \frac{d\mathbf{m}}{dt} &= \mathbf{y}'; \quad h_n = t_{n+1} - t_n = dt. \end{aligned} \quad (4.1)$$

4.1.1 Euler

Sendo este o método mais simples e de fácil implementação, é recomendada sua utilização para aquisição de resultados preliminares.

O método de Euler, aplicado para a evolução da magnetização, pode ser descrito pela seguinte equação:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{y}'. \quad (4.2)$$

Pode-se observar que, através do método de Euler, o resultado da equação 3.13 é diretamente utilizado.

4.1.2 Runge-Kutta

Métodos de Runge-Kutta (RK) requerem fragmentações no intervalo de tempo dt para serem implementados. Assim, a utilização de tais métodos acaba tornando a rotina de cálculo pesada. Porém, é possível a utilização de dt maiores, compensando a demora. O método de RK de segunda ordem encontra-se descrito abaixo:

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \frac{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2}{2}, \\ \text{com } \mathbf{k}_1 \text{ e } \mathbf{k}_2, &\text{ são respectivamente} \\ \mathbf{k}_1 &= \mathbf{y}'(t_n, \mathbf{y}_n) h, \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{y}'\left(t_n + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_n + \frac{h}{2} \mathbf{k}_1\right) h. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Nota-se que a rotina de RK de segunda ordem estima duas inclinações e faz a sua média, obtendo assim uma melhor estimativa da evolução da magnetização do sistema de interesse. As rotinas de RK de ordem superior também podem ser implementadas, mas o método de integração deve ser escolhido baseado no sistema físico a ser estudado.

Dessa forma, neste trabalho o método de Runge-Kutta de segunda ordem oferece erros de cálculo pequenos, caso o passo de integração seja maior do que 1×10^{-13} s.

4.1.3 Bogacki-Shampine

Sendo um método mais rigoroso existe a impressão de que o número de operações sofrerá um aumento; porém, o passo adaptativo pode aliviar o aumento através da utilização de passos de integração maiores. Entretanto, seu uso é necessário para a observação de comportamentos de dinâmica de magnetização, como por exemplo a formação de vórtices, de parede de domínio e quando se utiliza campos magnéticos AC de alta frequência.

O método pode ser descrito pelos seguintes passos básicos:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{2\mathbf{k}_1 + 3\mathbf{k}_2 + 4\mathbf{k}_3}{9},$$

com \mathbf{k}_1 e \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 são respectivamente

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{y}'(t_n, y_n) h_n, \quad (4.4)$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{y}'\left(t_n + \frac{h_n}{2}, y_n + \frac{h_n}{2} k_1\right) h_n,$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{y}'\left(t_n + \frac{3h_n}{4}, y_n + \frac{3h_n}{4} k_2\right) h_n.$$

O método foi desenvolvido por Ralston. Através de \mathbf{y}_{n+1} é possível realizar o procedimento para a aplicação do passo adaptativo, de forma que o novo passo possa ser expresso por:

$$h_{n+1} = |\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{z}_{n+1}|, \quad (4.5)$$

onde \mathbf{z}_{n+1} pode é dado por:

$$z_{n+1} = \mathbf{y}_n + \frac{7\mathbf{k}_1 + 6\mathbf{k}_2 + 8\mathbf{k}_3 + 1\mathbf{k}_4}{24}, \quad (4.6)$$

e $\mathbf{k}_4 = \mathbf{y}'(t_n + h_n, y_{n+1})$.

Assim, se reduz o número de execuções da rotina de calculo do campo efetivo.

4.1.4 Passo de integração (dt)

A escolha do passo de integração pode ser uma tarefa extremamente árdua, já que a maioria dos métodos possui falhas para dt superior a 1×10^{-11} s. O passo tem a finalidade de amenizar o termo $\frac{d\mathbf{m}}{dt}$ caso ele seja grande; assim a escolha apropriada é importante. Além do mais, o dt é associado a magnitude de *damping* α , o qual influenciará a convergência e, portanto, à estabilidade do estado calculado.

A escolha do dt está associada à magnitude do termo de *damping* α , o qual influenciará na convergência e, por consequência, na estabilidade do estado obtido.

Foi possível verificar que passos de integração no intervalo $[1 \times 10^{-11}; 1 \times 10^{-15}]$ segundos são apropriados para o método RK de 2ª ordem.

4.2 Rotina de cálculo

Definido o valor do passo, é possível então, estruturar a rotina de cálculo.

- I Definindo o Sistema Físico - construção do sistema físico de interesse, no qual suas características serão descritas. Nesse ponto torna-se necessária a definição de sua geometria e dos parâmetros do material, bem como as condições iniciais.
- II Caracterização do Estado Magnético - Obtida através do cálculos do campos internos e externos que atuam sobre o sistema, ou seja, o campo efetivo.
- III Integração temporal da LLG - Campo efetivo é incluso na equação de LLG, submetido ao método de integração e após normalizado. Por meio desse passo se garante que a magnetização manterá sua unitariedade.
- IV Critérios de Equilíbrio - Devemos verificar se o estado atingido pelo sistema no término da evolução é estável. A verificação pode ser feita de diferentes maneiras, como, por exemplo, permitir que o sistema evolua por tempo determinado até um certo limite temporal ou utilizar um critério mais rigoroso, o qual verifica o torque atuando sobre o cada célula magnética. Esse é definido por:

$$\left| \frac{\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}}{M_s} \right| \leq \text{err}, \quad (4.7)$$
 em que err deve assumir valores entre $[0,001 : 0,00001]$.
- V Estado estável - Caso o item IV seja satisfeito, o estado atingido é tratado como estável e a evolução temporal não é mais necessária. Para finalizar, é realizada a média da magnetização de cada uma das células magnéticas que compõe o sistema.

A sequência pode ser esquematizada da seguinte forma: 4.1:

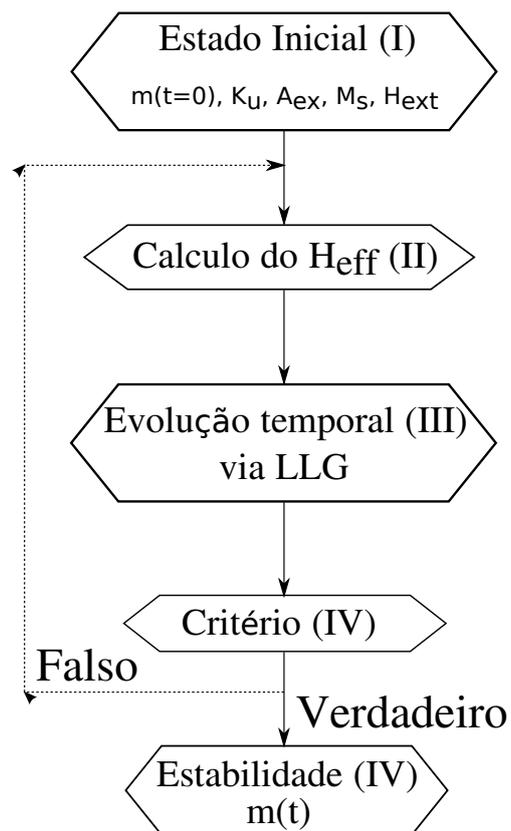


Figura 4.1: Esquema de evolução temporal para equação de LLG, na qual, os passos I, II e III são repetidos até que o estado de equilíbrio seja alcançado.

4.3 Diagrama de Voronoi

Conhecido por gerar formas aleatórias, o diagrama de Voronoi pode ser utilizado na representação de sistemas policristalinos com diferentes tamanhos e orientações. Esse diagrama pode ser construído através da distribuição de pontos aleatórios em um determinado espaço; como pode ser observado na figura 4.2 (a), o espaço deve possuir as mesmas dimensões do sistema formado pelas células magnéticas, podendo, assim, associar células magnéticas próximas a determinado ponto. Sendo assim, conjuntos de células próximas a um determinado ponto formarão grãos, as quais apresentarão propriedades cristalinas semelhantes, como pode ser visto na figura 4.2 (b).

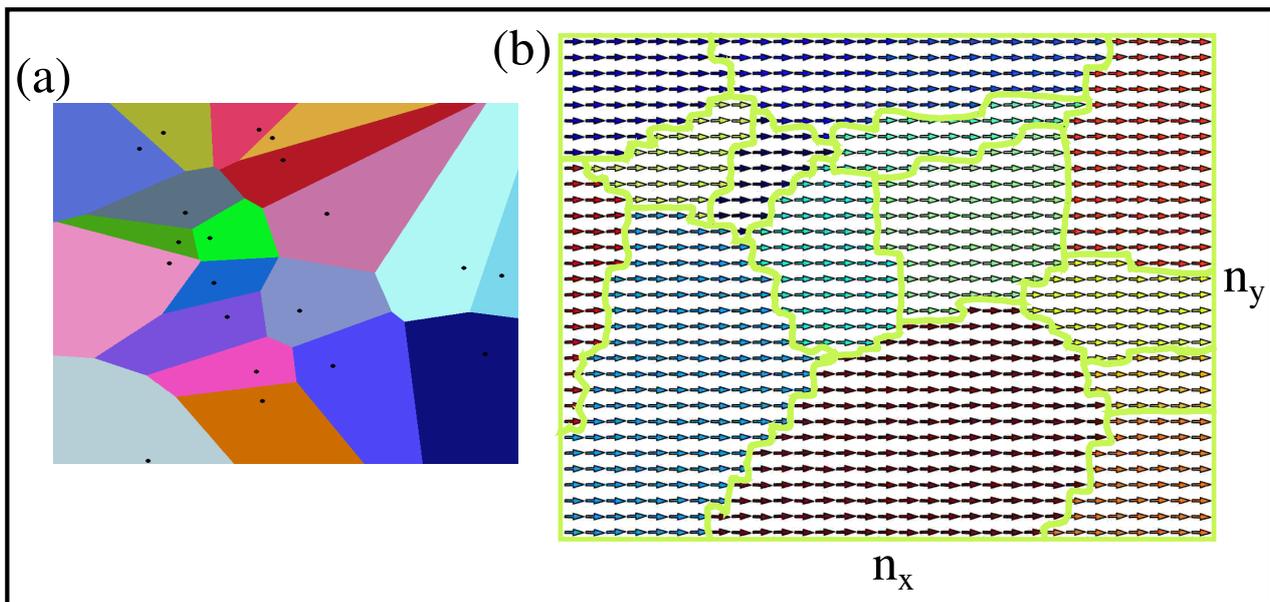


Figura 4.2: O diagrama de Voronoi pode fornecer uma estrutura mais realista para a mimetização de filmes finos policristalinos, sendo esse diagrama gerado através de uma distribuição aleatória de pontos. Esses por sua vez agregam as células magnéticas mais próximas a eles, tal conjunto de células forma um grão, tais células apresentam propriedades cristalinas idênticas, em (a), pode-se encontra-se um exemplo do diagrama de Voronoi aplicado a sistemas descritos por números reais, apresentando uma tendência contínua entre as linhas, em (b) o diagrama aplicado a um sistema real discretizado pelas células magnéticas que o compõe

O diagrama de Voronoi também é utilizado para a reprodução de sistemas policristalinos, onde os diferentes grãos assumirão constantes e orientações cristalinas diferenciadas.

5 *Testes de validação*

Realizada a construção do programa, é imprescindível a realização de testes padrões. Esses testes foram desenvolvidos por especialistas em micromagnetismo e podem ser encontrados no site grupo do NIST.⁴⁹ O problema II acabou sendo escolhido para habilitar o *software LLGmag*, para a realização de cálculos estacionários. Os testes standards (IV, V) fogem da meta do presente trabalho, possivelmente poderão ser realizados num futuro próximo.

Alguns estados são esperados, pois estão sujeitos a determinadas condições iniciais ou a diferentes formas.

5.1 Estados magnéticos

5.1.1 Estado *standard*

O estado *standard* leva o nome devido a ser a manifestação mais comum da interação magneto-estática. Ele pode ser obtido quando o sistema é saturado na direção do eixo de fácil magnetização. Neste caso, as células localizadas nas proximidades das bordas apresentam uma tendência de fechamento das linhas de campo, como pode ser observado na figura 5.1. Esse estado pode ser atingido somente por materiais magnéticos de média ou baixa coercividade.

5.1.2 Estado *S*

O estado *S* pode ser facilmente induzido em sistemas magnéticos de dimensões retangulares sem anisotropia. Para que essa indução seja promovida, é necessária a aplicação de um campo magnético suficientemente alto para a saturação na direção $[1,1,1]$ do retângulo (esse estado ocorre apenas para formas retangulares). Após saturado o sistema, o campo deve decrescer lentamente até ser completamente extinto. No final desse processo o estado *S* está formado. Um esboço de sua configuração pode ser visto na figura 5.2.

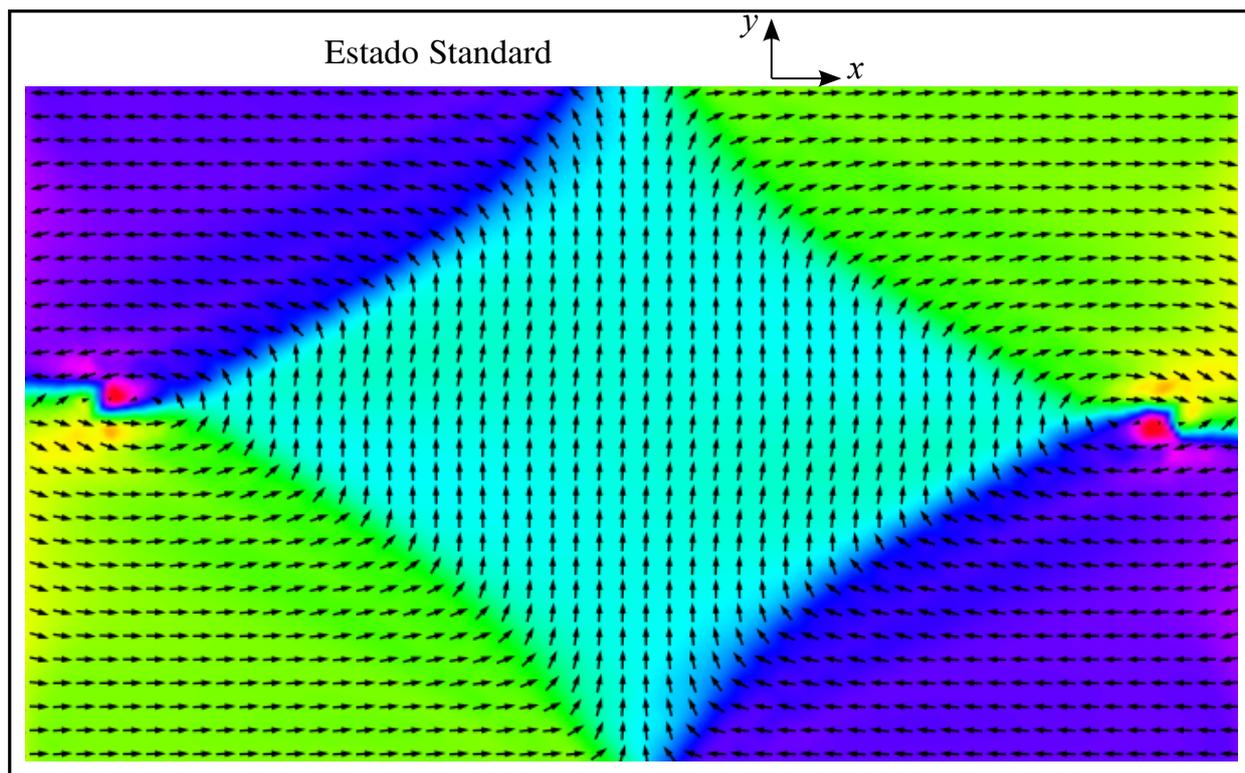


Figura 5.1: Estado *standard*, demonstrando o fechamento das linhas de campo ao longo da direção y .

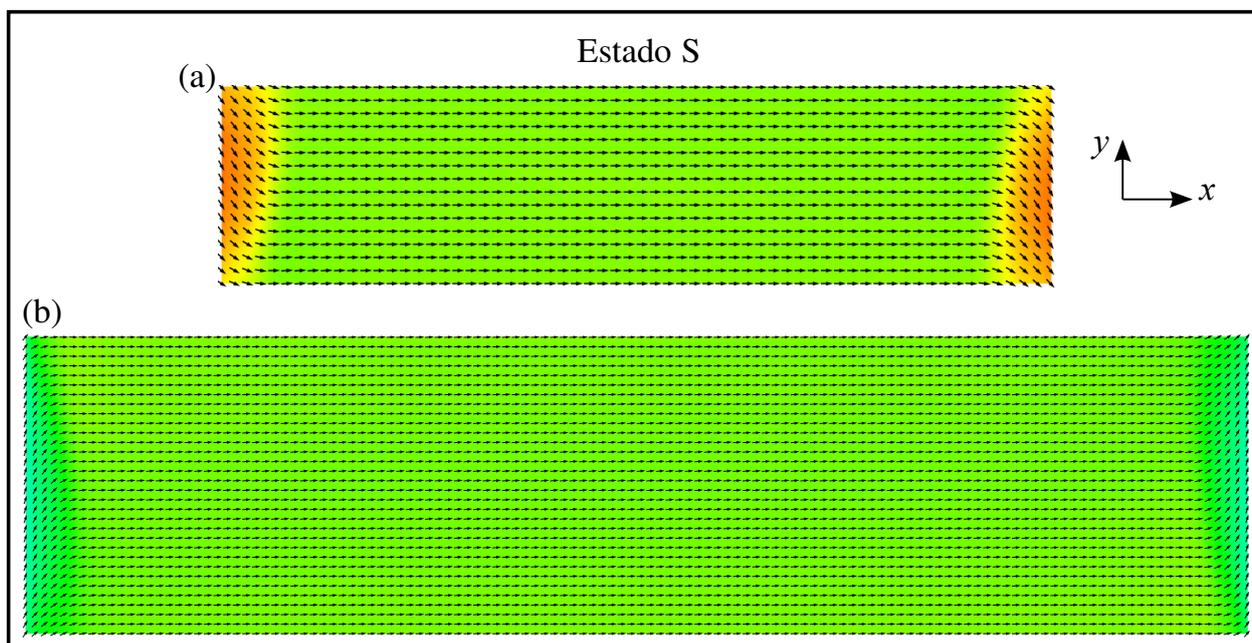


Figura 5.2: O estado *S* é característico de sistema retangulares expostos a campos magnéticos direcionados ao longo de sua diagonal principal. Em (a), o sistema é composto por 1024 células magnéticas; já o sistema em (b), por 4096. Nota-se que este efeito ocorre especialmente para as bordas.

5.1.3 Estado *C*

O estado *C* pode ser obtido através da aplicação de campo externo, de baixa amplitude, ao longo da direção $-\hat{y}$ com eixo de anisotropia uniaxial paralelo a $-\hat{x}$. Dessa forma, as interações dipolares e

de troca formaram o estado *C*, o qual pode ser observado na figura 5.3.

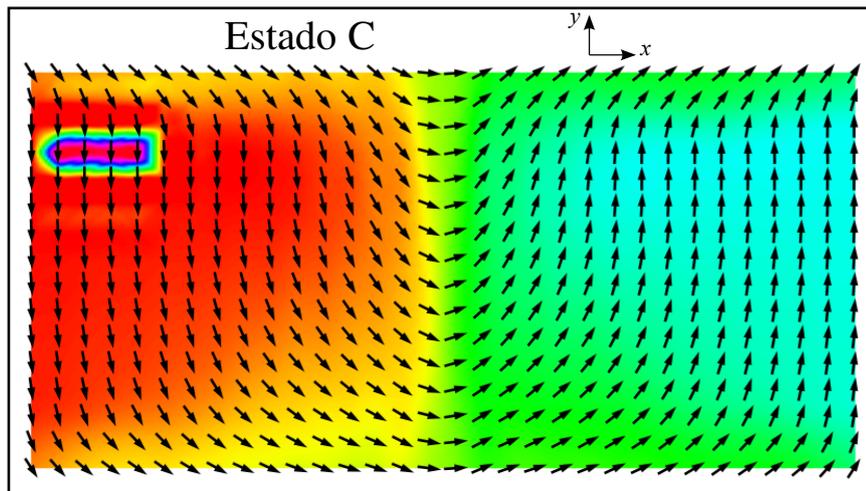


Figura 5.3: Também característico de sistema retangulares, o estado *C*, é mais um estado magnético a ser obtido; ele também só pode ser obtido se as dimensões do sistema extrapolarem as dimensões da estabilidade de mono-domínio, pois caso as dimensões fossem pequenas, apenas 2 mono-domínios estariam presentes.

5.1.4 Estado de quatro domínios em vórtex

O estado de quatro domínios em vórtex pode ser visto em materiais magnéticos macios, como por exemplo, o Permalloy (Py). Isso por que sua anisotropia uniaxial não é forte o suficiente para manter o FM alinhado, e o estado de menor energia resulta no fechamento das linhas de campo; sua manifestação pode ser vista na figura 5.4.

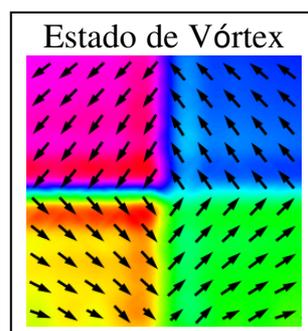


Figura 5.4: Estado de quatro domínios em vórtex.

5.2 Problema Standard II

O problema *standard II* é uma ótima ferramenta para a verificar a implementação da rotina micromagnética; esse é especialmente voltado para análises estacionárias. O problema tem como ob-

jetivo mostrar o comportamento do sistema magnético com relação a seu tamanho. Para o conjunto de células magnéticas com dimensões reduzidas, espera-se que elas se comportem como um monodomínio. Porém, ao se aumentar suas dimensões, o sistema não consegue manter esse estado e o estado S se torna o mais provável estado de equilíbrio.

A geometria do problema *standard II* obedece os seguintes pré-requisitos, com base na figura 5.5:

- I Comprimento a - deve ser cinco vezes maior do que b .
- II Espessura c - deve ser 10 vezes menor do que b .
- III Largura b - deve ser idêntica ao comprimento de troca magnetoestático l_{ex} . Assim, podemos aumentar o tamanho do sistema magnético multiplicando o comprimento de troca por um inteiro i tal que a dimensão do conjunto de células será baseada em il_{ex} , sendo $l_{ex} = \sqrt{\frac{2A_{ex}}{\mu_0 M_s^2}}$.

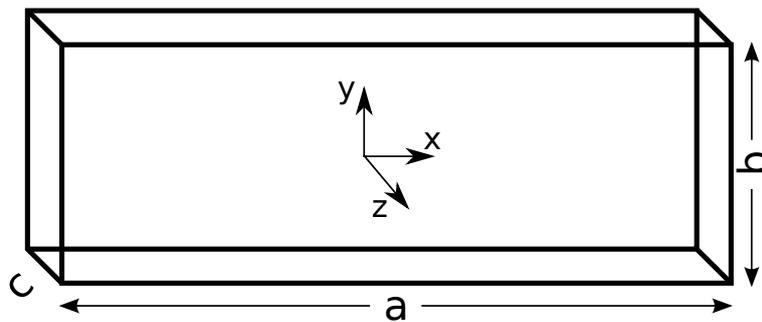


Figura 5.5: Descrição geométrica do problema *standard II*.

Os parâmetros que caracterizam o estado são equivalentes aos de um material FM, como o Py, mas sem energia magneto-cristalina. Eles são descritos abaixo:

- I Magnetização de saturação - $M_s = 8,0 \times 10^5$ A/m.
- II *Exchange Stiffness* - $A_{ex} = 1,1 \times 10^{-11}$ J/m.
Utilizando esses valores, obtemos $l_{ex} \approx 5$ nm.
- III *Damping* - os valores de amortecimento podem ser da ordem de [0.3:1.0] para simulações estacionárias.
- IV dt - o passo de integração utilizado para o método de Runge-Kutta de 2º ordem foi da ordem de 30 fs

Deste modo as dimensões do sistema serão: $a = i25$ nm, $b = i5$ nm, $c = i0,5$ nm. Agora devemos descrever o conjunto de células magnéticas para representar a situação.

Devido à simetria retangular do problema, o arranjo de células magnéticas foi montado com 16 células ao longo da direção x , 4 células ao longo da direção y e 1 célula em z , de modo que cada células apresentem dimensões $h_x = i1,6$ nm, $h_y = i1,25$ nm e $h_z = i0,5$ nm.

Com o esquema completamente caracterizado, devemos definir a rotina de teste necessária para a verificação. Ela consiste em saturar o arranjo na direção $[1,1,1]$, eliminando qualquer tipo de assimetria indesejada. Após saturado, o sistema deve atingir o estado de equilíbrio, o qual apresentará dependência em função de seu tamanho. Quando atingido o estado estável, são obtidas as projeções da magnetização nas direções x e y , em função do índice i . O comportamento previsto pelo grupo do NIST, e também verificado com o programa desenvolvido, podem ser visualizados na figura 5.6.

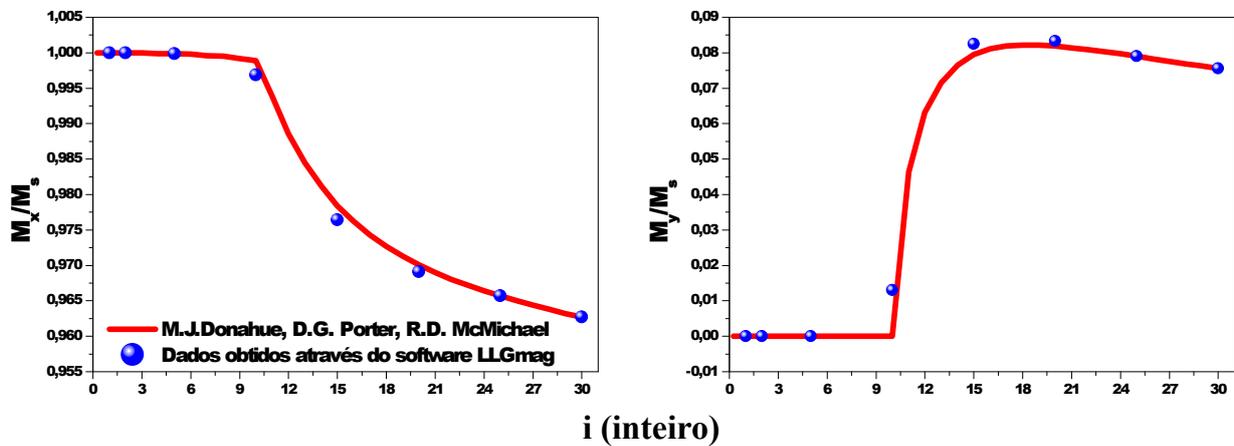


Figura 5.6: Resultados para o problema *standard II*, no qual as componentes m_x e m_y , divididas pela magnetização de saturação.

A partir desses resultados, o *LLGmag* é validado para execução de rotinas estacionárias.

6 *Resultados*

A seção de resultados encontra-se subdividida em 3 partes. A primeira delas é referente ao trabalho experimental, em que foi feita a detecção de meta-instabilidade em filmes finos; a segunda expõe o ganho computacional obtido através da rotina desenvolvida de cálculo do campo dipolar; por fim, na terceira, será feita uma análise computacional através de modelos que evidenciam comportamentos instáveis na interface FM/AFM.

6.1 *Detecção experimental*

A meta-instabilidade (MI) de filmes finos pode se manifestar de diferentes formas, muitas vezes ocasionando mudanças dramáticas no sistema. Neste trabalho, a MI é fruto da interação de troca, oriunda dos os grãos da interfaciais dos materiais AFM e FM. A sua detecção é feita através das modificações na curva de histerese, devido a mudanças do H_{EB} e H_C .

Recentemente foi descoberto que filmes compostos por AFM/FM irradiados apresentavam uma evolução do H_{EB} em função do tempo.⁵⁰ Devido à interação de troca, os filmes mantêm uma magnetização remanente alta, ou seja, o sistema se encontra num estado praticamente saturado. Foi verificado que essa evolução temporal era impulsionada pela temperatura. Portanto, os sistemas expostos a temperaturas maiores do que a ambiente, tendem a evoluir de maneira mais rápida, já que a agitação térmica favorece a MI.

A indução das modificações sobre os filmes finos pode ser realizada por um procedimento extremamente simples. O filme fino é exposto há um campo magnético suficiente para saturar o FM por um determinado tempo é aplicado, e posteriormente é medido seu laço de histerese para que se computar os campos de H_{EB} e H_C . O primeiro processo de exposição a campo magnético consiste na aplicação de campo magnético externo no sentido contrario ao induzido durante o procedimento de tratamento térmico ou irradiação iônica.

Uma ideia qualitativa do método utilizado e do comportamento dos grãos interfaciais é adquirida

através da observação da figura 6.1. Na parte superior esquerda encontramos o sistema no estado inicial, após submetido a determinada técnica de indução do efeito de EB (ou para a própria amostra virgem). A amostra é então sujeita a um campo magnético de sentido oposto ao presente durante o procedimento de indução do efeito; o comportamento resultante é visto na parte superior esquerda. Magnetizações de alguns grãos da interface podem acompanhar a do grão FM, ao qual ele está acoplado. Essa mudança será possível caso a energia térmica e_T seja superior (e_1), ou de mesma ordem da energia $e_1 < e_T - eh_{ex}$. Contudo, caso a energia térmica e_T seja inferior à e_0 , os grãos permanecerão estáveis.

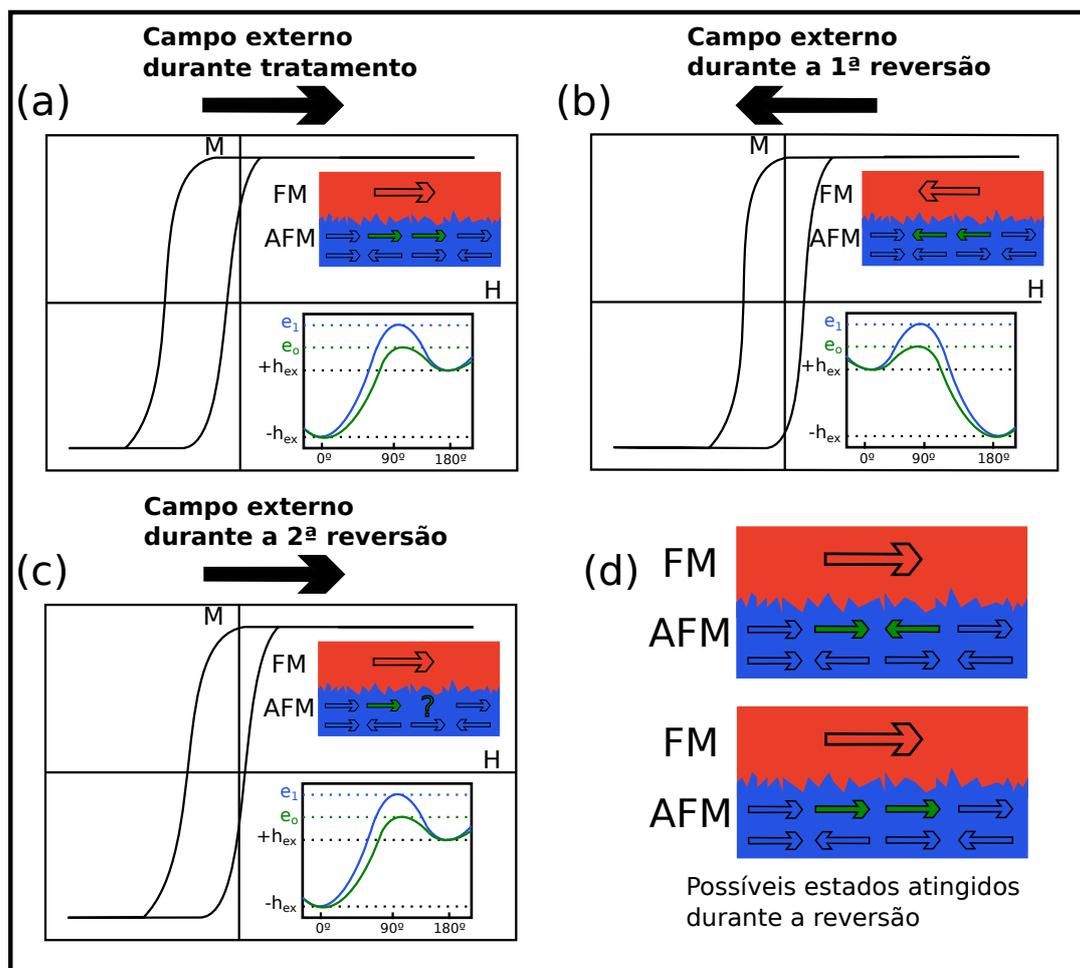


Figura 6.1: Visão esquemática do processo de reversão dos grãos interfaciais, onde em (a) o sistema encontra-se no estado induzido, por determinada técnica. Nesse estado todos os grãos da interface FM/AFM, encontram-se alinhados, e além disso, os grãos distintos em cores apresentam diferentes energias. Quando a primeira reversão é realizada, o sistema passa para o estado representando em (b), no qual a redução do H_{EB} se deve a mudança de sentido da magnetização de alguns grãos interfaciais; quando uma nova reversão é provida (c), alguns grãos podem encontrar o equilíbrio estável, deixando de contribuir para a magnetização macroscópica. Os possíveis estados pós reversão podem ser visualizados em (d).

Podemos pensar, de maneira simplificada, que cada grão possui um aprisionamento energético diferenciado devido a distintas características cristalinas; esse, agregado a interação FM/AFM, induz a

formação de poços de energia assimétricos, como pode ser observado no esquema montando na figura 6.1, caracterizando assim a existência de mínimos locais e globais de energia. Caso o grão se encontre no estado de mínimo local, seu comportamento pode ser alterado apenas devido a flutuações térmicas de baixa amplitude (à temperatura ambiente); para o caso de mínimos globais, apenas flutuações de alta amplitude devem ser suficientes para remover o sistema desse estado de mínima energia.

Então uma nova reversão de campo é realizada, a qual pode ser vista na parte inferior esquerda da figura 6.1. Durante essa reversão, alguns dos grãos da interface AFM/FM podem ter atingido um estado energético estável, tornando sua projeção para a direção do estado inicial improvável à temperatura ambiente. Esse estado pode ser atingido devido à interação com os demais grãos presentes na interface ou no próprio material AFM. Portanto, após realizada uma reversão, se caracteriza o estado magnético posteriormente à reversão como reversível ou irreversível, caso seja possível ou não a recuperação desses grãos na interface.

Os resultados serão expostos em ordem cronológica, já que até então se pensava que a existência do comportamento instável era um efeito exclusivo da irradiação. Dessa maneira, o primeiro passo consistiu na busca da MI induzida via tratamentos térmicos. Posteriormente, sua indução foi realizada através do procedimento de irradiação iônica, em que o comportamento instável foi detectado em amostras irradiadas a 5 anos. Para essas técnicas, a amostra I foi utilizada. Finalmente, será discutida a descoberta de que a MI é intrínseca das amostras II e III.

6.1.1 Tratamento térmico

A amostra I descrita na sessão 2.4 foi submetida a tratamentos térmicos com temperatura aproximadamente de 473 K, essa temperatura é da ordem da T_B do material IrMn, sob a presença ou não de campo magnético.

Os resultados aferidos em amostras tratadas sob a presença de campo já foram esperados, isto é, o sistema não apresentava indícios de MI. Esse mostrava um laço de histerese bem definido e com alto deslocamento; assim, esse tratamento tornou o sistema estável, possivelmente promovendo os grãos interfaciais para o estado magnético de menor energia. Porém, realizando um procedimento diferenciado, no qual as amostras foram submetidas a campos magnéticos apenas durante os momentos iniciais do tratamento (durante o aumento de temperatura) e resfriadas sem a utilização de campo magnético. Foi possível a detecção de MI posteriormente, como pode ser visto na figura 6.2.

Constatou-se que a MI cessou ao final de 200 horas, devido às limitações do equipamento de medida ou à completa supressão do estado instável.

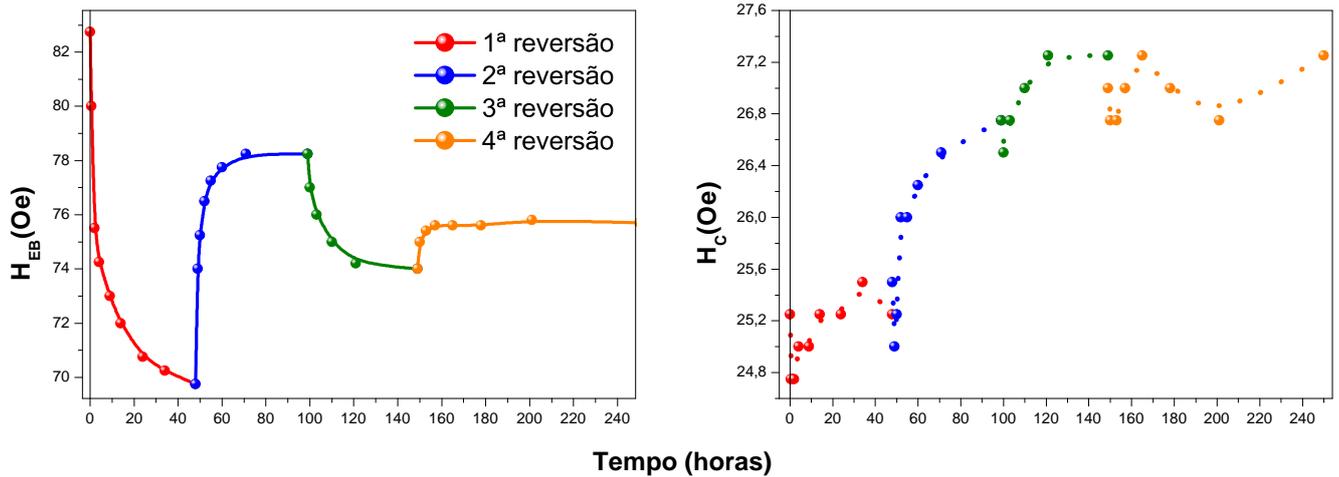


Figura 6.2: Evolução temporal a temperatura ambiente do H_{EB} e H_C , após tratamento térmico realizado a 473 K.

É possível concluir que o efeito do tratamento térmico sob a amostra pode aniquilar completamente os efeitos MI, resultando na formação de um estado magnético estável, o qual não pode ser alterado em temperatura ambiente devido a possível localização energética dos grãos. Se o mesmo experimento fosse repetido em temperaturas superiores, provavelmente o estado instável poderia ser novamente atingido devido ao aumento da energia térmica, vencendo o mínimo global de energia.

A figura 6.3 mostra a variação do H_{EB} (ΔH_{EB}) em função do tempo, abdicando do sentido do campo externo aplicado. O ΔH_{EB} pode ser entendido como a variação máxima do H_{EB} , sendo definido por:

$$\Delta H_{EB}(t = [\text{intermediário} - \text{inicial}]) = |H_{EB}(t = \text{inicial}) - H_{EB}(t = \text{intermediário})|, \quad (6.1)$$

onde $H_{EB}(t = \text{inicial})$, é o ponto inicial referente a cada um dos processos de reversão, já $H_{EB}(t = \text{intermediário})$ é composto pelos pontos onde os laços de histerese magnética realizados durante o mesmo processo de reversão. Dessa maneira, a escala temporal será normalizada, acarretando em intervalos de tempo começando em zero e terminando no tempo o qual a amostras foi submetida a determinado processo de reversão.

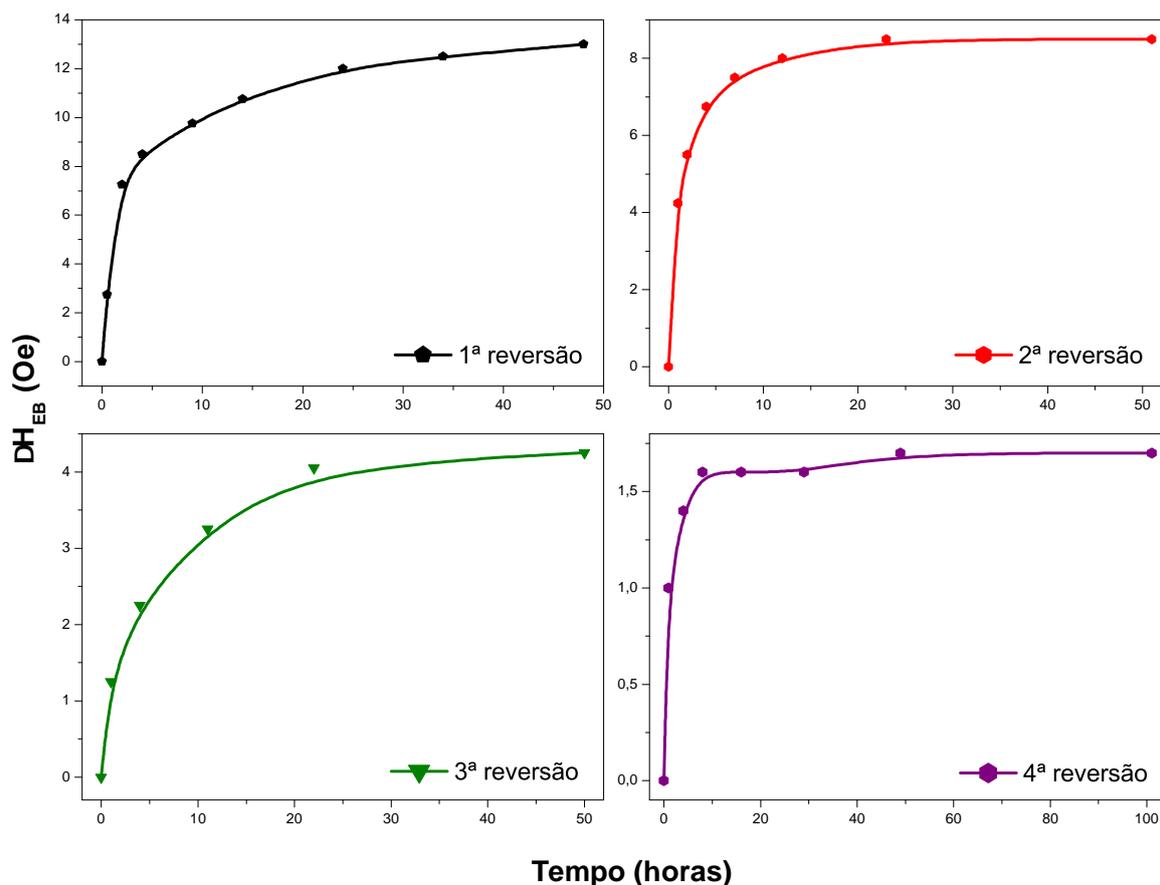


Figura 6.3: Conjunto de variações do $\Delta H_{EB}(t)$ em função do número de reversões.

6.1.2 Irradiação iônica

Nesse caso, as amostras da série I foram submetidas a irradiação iônica de baixa energia e fluência. Essas foram bombardeadas com íons de hélio com energia de 40 keV, e simultaneamente submetidas a um campo magnético de 5,5 kOe. Duas diferentes doses foram analisadas; a primeira delas foi extremamente baixa, contendo 3×10^{13} íons/cm², já segunda contendo 1×10^{14} íons/cm².

A irradiação preservou a MI, mas a modificou de maneira distinta para as diferentes doses.

Dose 3×10^{13} íons/cm²

Para o caso de menor dose 3×10^{13} íons/cm², os resultados foram um tanto inesperados, como podem ser observado na figura 6.4. Nota-se que o estado inicial pode ser restaurado no mesmo intervalo de tempo. É importante salientar que os valores de H_C praticamente não se alteram (dentro do erro experimental de 0,5 Oe), mesmo após a reversão completa.

Para averiguar essa reversibilidade, a amostra foi conduzida a um novo ciclo de reversão. Quando

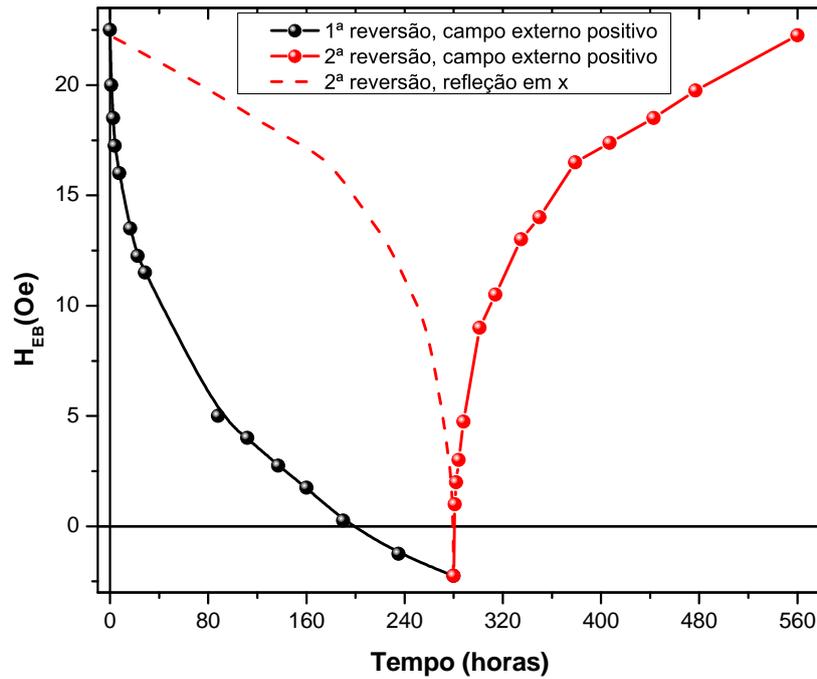


Figura 6.4: Processo de reversão temporal para à irradiação de dose 3×10^{13} íons/cm², o qual sugere a presença de mecanismos reversíveis. Os valores das variações do H_C não foram mostrados, pois encontram-se dentro do erro experimental de medida.

atingiu a primeira reversão, a amostra foi removida e permaneceu durante 720 horas sem exposição a campos magnéticos externos, com exceção ao da Terra. Novamente foi realizada a reversão final, em que se obteve estado idêntico ao inicial, como pode ser observado na figura 6.5. Esse experimento mostra que a irradiação promoveu o sistema a um estado magnético completamente reversível.

Portanto, essa irradiação alterou o sistema de forma única, onde todos os grãos em seus mínimos locais de energia transitam para outros estados de mínimo local, porém aparentemente não atingindo um mínimo global.

Essa amostra foi ainda rotacionada em 90 graus, em direção ao seu eixo duro de magnetização, e submetida ao mesmo procedimento de evolução temporal. Os resultados seguem as mesmas tendências para o caso no qual o procedimento de evolução for aplicado a direção paralela ao eixo fácil. Entretanto, as amplitudes do H_{EB} são reduzidas drasticamente, evidenciando uma provável projeção preferencial destes grãos na direção do campo aplicado durante o procedimento de irradiação.

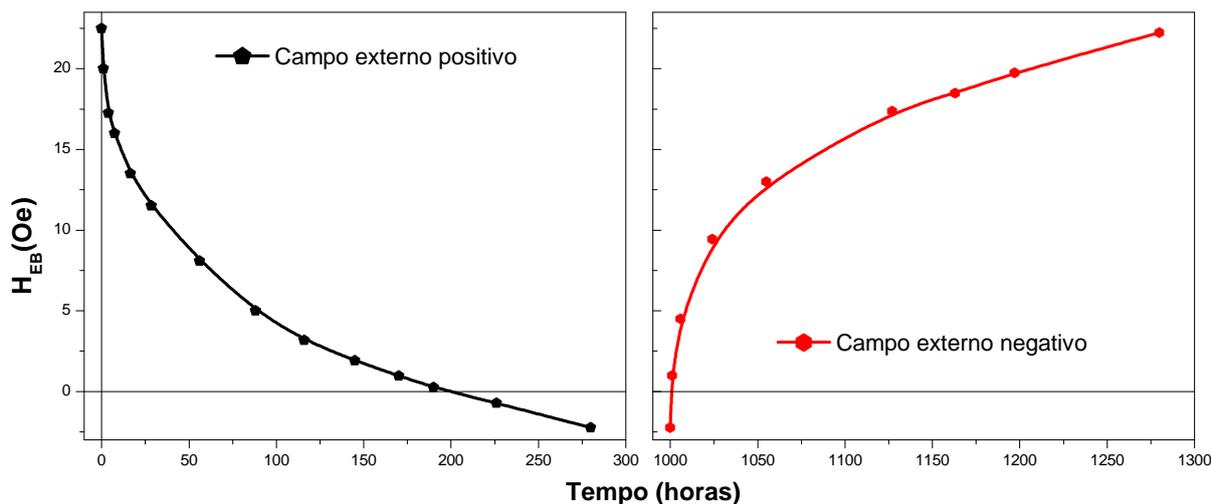


Figura 6.5: Verificação do processo reversível onde, mesmo após um mês no mesmo estado magnético, o sistema pode retornar completamente ao estado inicial, evidenciando a ausência de processos de relaxação.

Dose 1×10^{14} íons/cm²

A amostra irradiada com a dose de 1×10^{14} íons/cm²; apresentou uma certa dependência em função do número de inversões do campo magnético, como pode ser observado na figura 6.6. Claramente, o mesmo valor de H_{EB} pode ser obtido após algumas reversões. Entretanto, o estado magnético obtido pode ser diferente do inicial, já que devido ao aumento do tempo necessário para reversão, não se pode afirmar se ela acontece nos mesmos grãos pois, devido a características cristalinas distintas, as magnetizações destes grãos devem possuir também tempos de reversão distintos, além de diferentes estados de energia.

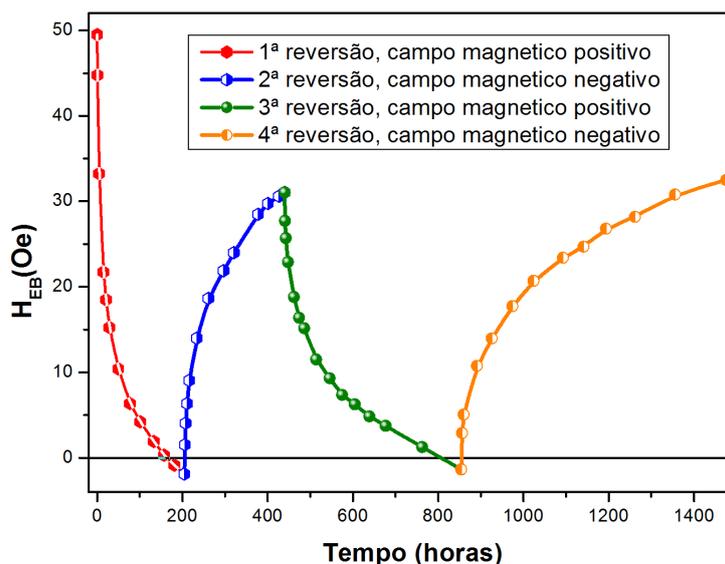


Figura 6.6: Evolução temporal do H_{EB} para a amostras I submetida a dose 1×10^{14} íons/cm², na qual se constatou a existência de processos irreversíveis devido ao aumento do tempo necessário para a promoção da reversão da magnetização.

As variações do H_{EB} em função do tempo podem ser observadas de forma adequada na figura 6.7. A segunda, terceira e quarta reversão possuem amplitude semelhantes de ΔH_{EB} , porém diferem na escala de tempo.

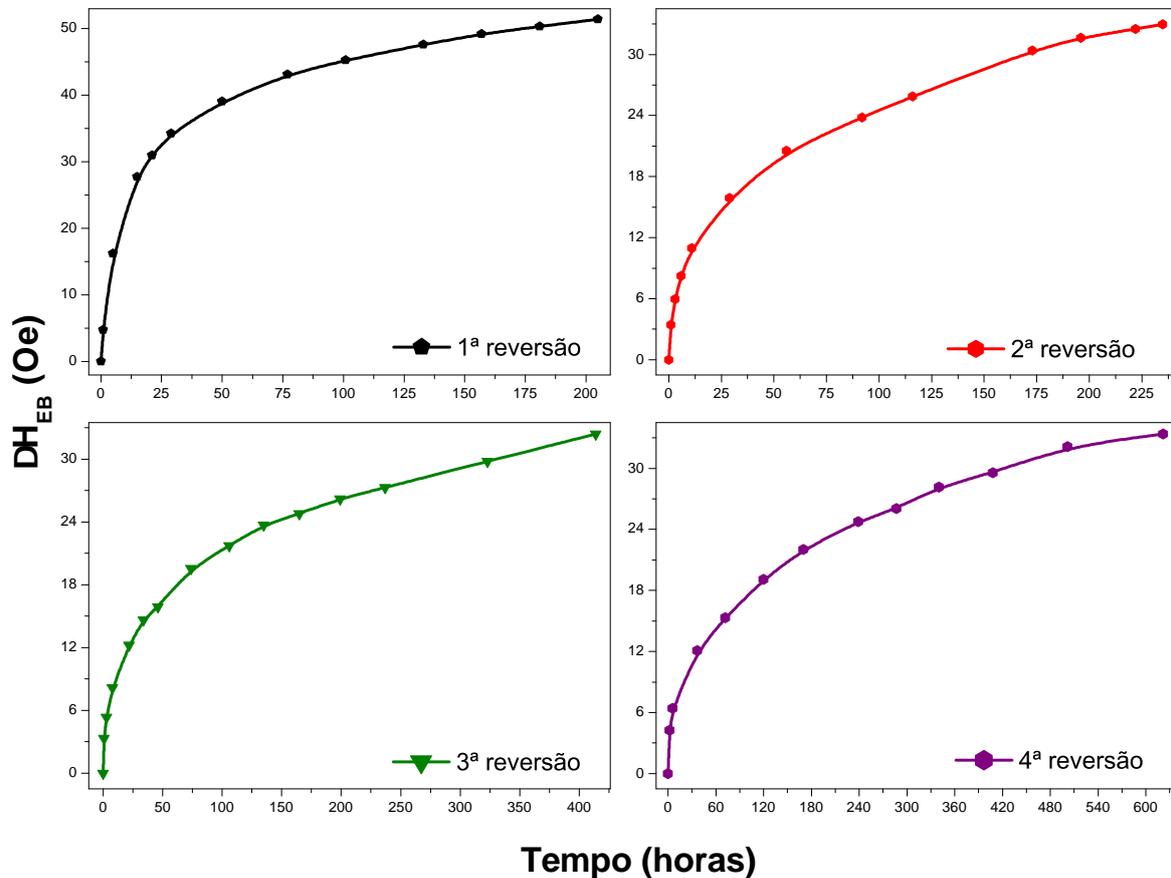


Figura 6.7: Conjunto de variações do ΔH_{EB} em função do número de reversões. Observa-se que o estado inicial dificilmente poderia ser obtido em tempo hábil; dessa forma as outras reversões foram realizados em estados intermediários. Mesmo assim, nota-se um aumento temporal significativo para que a mesma variação de $\Delta H_{EB}(t)$, seja obtida.

Os laços de histerese referentes aos pontos de reversão de magnetização podem ser observados na figura 6.8, em que se visualiza claramente a mudança no deslocamento da curva.

Porém, para o caso dessa irradiação, um efeito não esperado ocorreu na medida da coercividade da amostra: o H_C não acompanhou as tendências do H_{EB} , como pode ser visualizado na figura 6.9. O H_C apresenta um tendência decrescente, independentemente da direção do campo aplicado e do tempo de exposição. Esse comportamento pode evidenciar a perda de grãos interfaciais, os quais poderiam ter encontrado um configuração estável durante os processos de reversão. Essa situação pode ser fruto da estrutura do material AFM, em que o grão, agora estável, possivelmente está aprisionado na rede do AFM, a qual é energeticamente favorável, a temperatura ambiente.

Provavelmente apenas flutuações térmicas com maior amplitude conseguem vencer tal aprisiona-

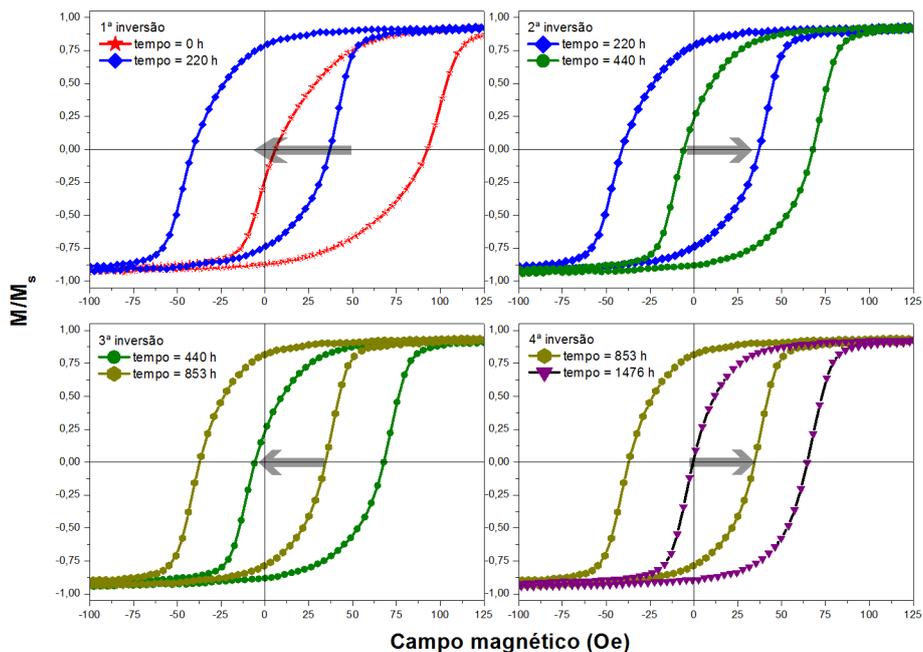


Figura 6.8: Laços de histereses referentes aos pontos de início e término das respectivas reversões mostradas nas figuras posteriores.

mento e, assim, promover os grãos estáveis ao comportamento meta-instável novamente.

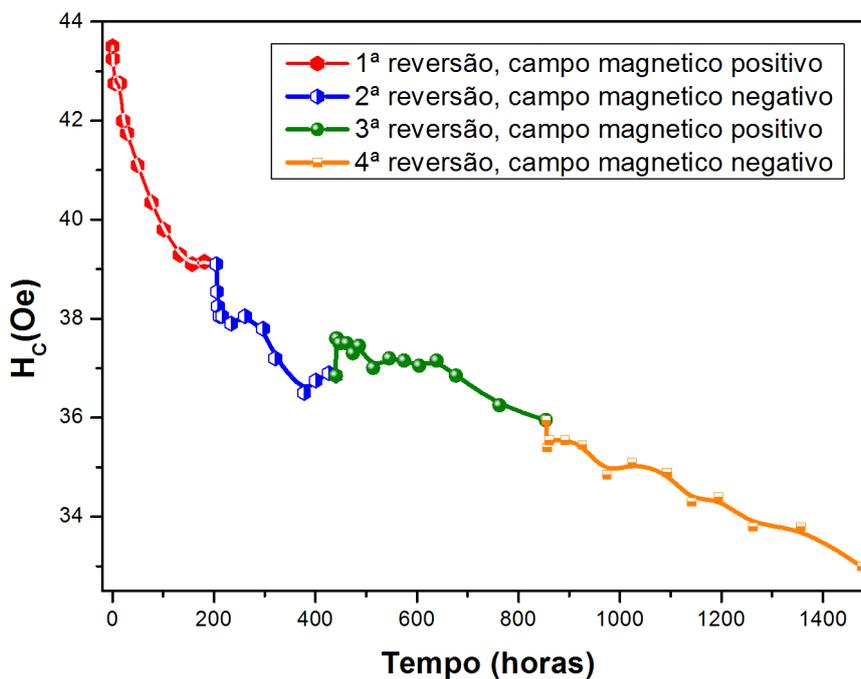


Figura 6.9: Evolução temporal do H_C para a amostras I submetida a dose 1×10^{14} íons/cm². Nota-se que o comportamento do H_C não apresenta reversibilidade, sendo esse decrescente praticamente ao longo de toda exposição a campos magnéticos.

Irradiações realizadas há 5 anos

Além da constatação da meta-instabilidade em filmes finos pós-irradiados, foi verificado se o comportamento cessaria após um grande intervalo de tempo. Selecionamos amostras irradiadas no ano de 2009, quando estas foram submetidas a doses semelhantes as do presente trabalho 5×10^{13} íons/cm², e as expusemos ao mesmo procedimento de reversão.

Mesmo após 5 anos, essas amostras permanecem com o comportamento MI, de acordo com a na figura 6.10.

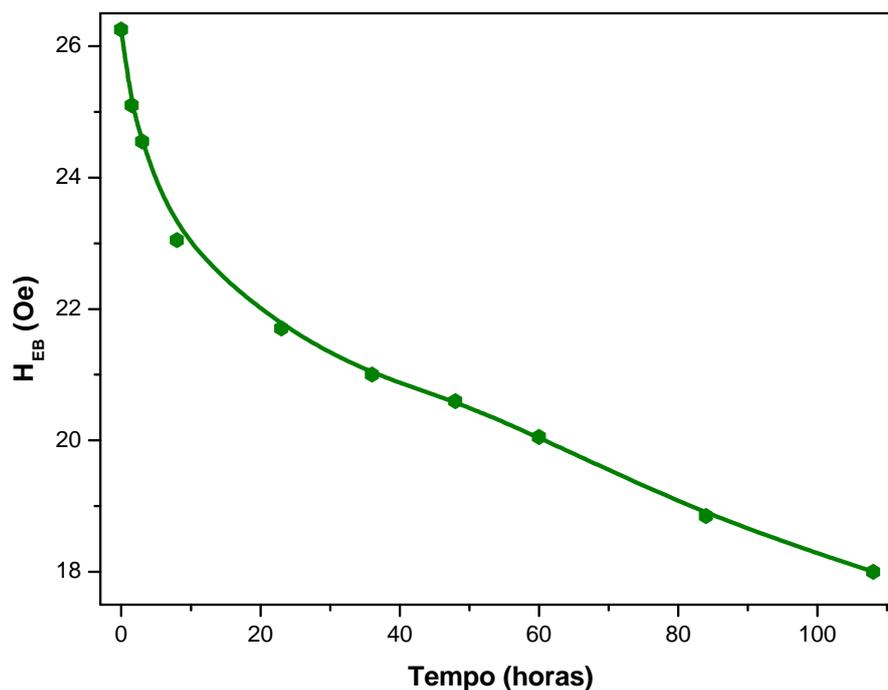


Figura 6.10: Evolução do H_{EB} , da amostras IV mesmo após 5 anos passados, os efeitos de MI continuam presentes, tornando o sistema instável a campos magnéticos.

O comportamento das amostras irradiadas pode apresentar efeitos indesejados, como as mudanças induzidas apenas com a aplicação de campo magnético, caso o seu sentido seja oposto ao do campo magnético durante a irradiação. Além disso, tal comportamento é influenciado pela temperatura.

Podemos pensar que a irradiação é uma forma de induzir ou inicializar os efeitos da interação de troca entre as camadas FM/AFM. Entretanto, ela pode apresentar efeitos adversos, como conservar a meta instabilidade do filme fino.

Meta-instabilidade em amostras como-feitas

Na maioria das pesquisas (especialmente nas realizadas por membros no LAM) pouca importância foi dada para as amostras como-feitas, pois, usualmente se induz o fenômeno de *Exchange Bias* através de diferentes procedimentos. Contudo, recentemente ao realizarmos algumas medidas sobre determinadas amostras como-feitas. Os resultados encontrados não correspondiam as esperados, pois estas já apresentavam comportamentos meta-instáveis.

De maneira análoga aos casos anteriores, essas amostras foram submetidas ao mesmo procedimento, e o resultado foi admirável, pois a MI já estava presente, já que os laços de histerese apresentavam mudanças significativas.

Esse conjunto de dados pode ser observado na figura 6.11. O H_{EB} e H_C seguem as mesmas tendências para o caso da irradiação, mas as amostras virgens se encontram num estado magnético inicial indefinido, já que esse não fora previamente induzido. A primeira reversão apresenta comportamento estranho e a segunda mostra uma reversão quase completa, semelhante ao comportamento obtido para a irradiação de dose mais baixa.

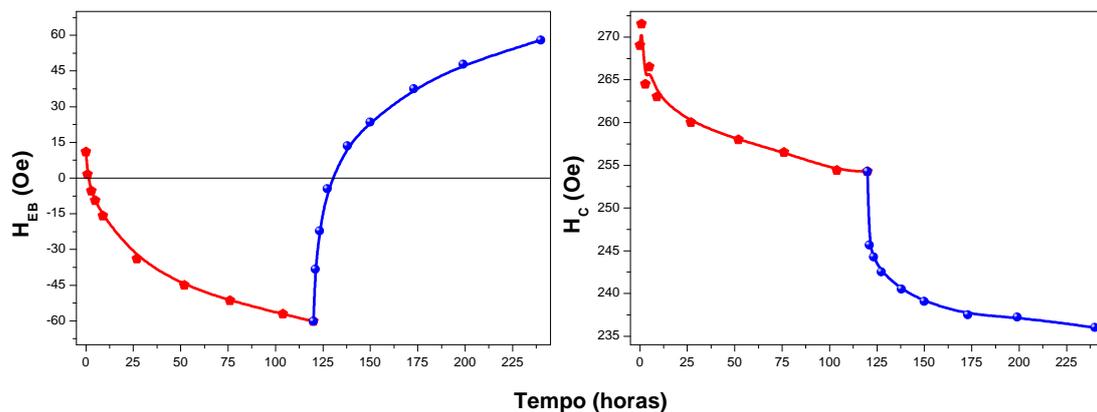


Figura 6.11: Manifestação da meta-instabilidade em amostras virgens. Nota-se que o sistema apresentou um comportamento praticamente reversível para o H_{EB} , porém, para o H_C , apresenta tendência é decrescente, onde as diferentes cores apresentadas nos gráficos se referem a diferentes processos de reversão.

Contudo, diferentemente do caso com irradiação de dose 3×10^{13} íons/cm², o comportamento do H_C é decrescente em função do tempo, característico de estados irreversíveis. Os laços de histerese referentes aos pontos inicial e final de cada uma das reversões podem ser observados na figura 6.12.

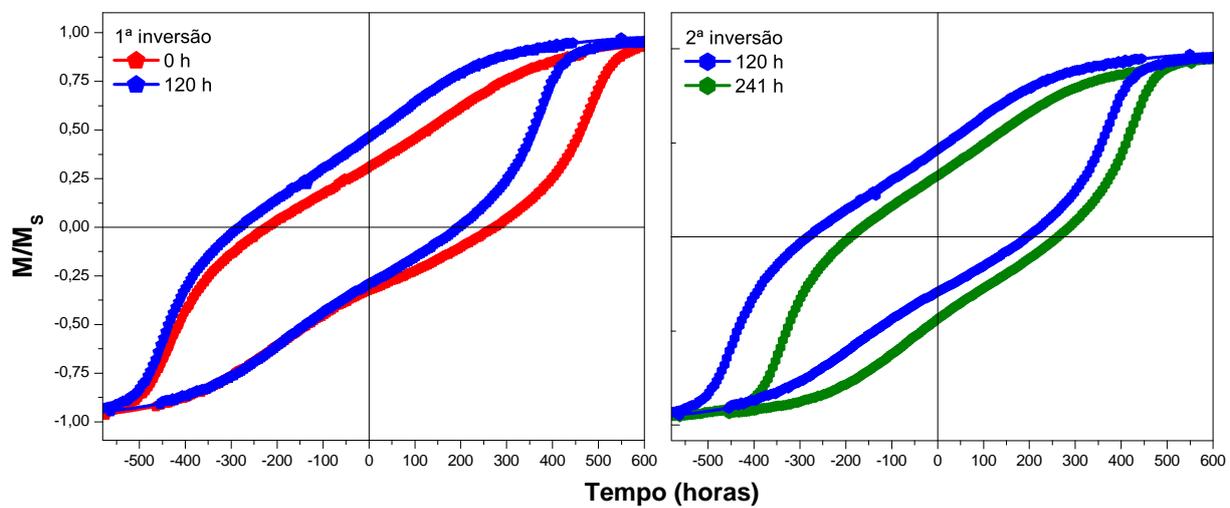


Figura 6.12: Laços de histerese referentes aos pontos de início e término das respectivas reversões mostradas as figuras posteriores.

6.2 Desempenho computacional

Como já mencionado na seção 3.3.2, uma maneira alternativa de contagem dos campos de interação dipolar foi desenvolvida com o objetivo de aumentar a performance computacional. Para isso, substituímos o método de FFT, com tempo computacional proporcional a $O(N \ln N_{pad})$, pelo método de soma em memória compartilhada SM, lembrando que $O(N_{pad})$ é o número total de células magnéticas e células de *zero – padding*.

O método de soma em SM apresentou melhora significativa na velocidade do cálculo. Neste caso, o tempo acaba se reduzindo ao número de dobras necessárias multiplicado pelo número de partículas. Além disso, não há necessidade da existência das células de *zero – padding*.

Supondo $N = 1024$, o método de soma em SM pode ser otimizado para 4 dobras, se utilizados 16 *blocks*. Assim, o tempo computacional será proporcional a N^6 . Além disso, o método é mais eficaz devido à redução do número operações, como as de passagem para o espaço de Hilbert e a cópia das informações para a placa de vídeo. O desempenho esperado pode ser visualizado na figura 6.13, bem como o tempo necessário para a realização de determinado número de ciclos.

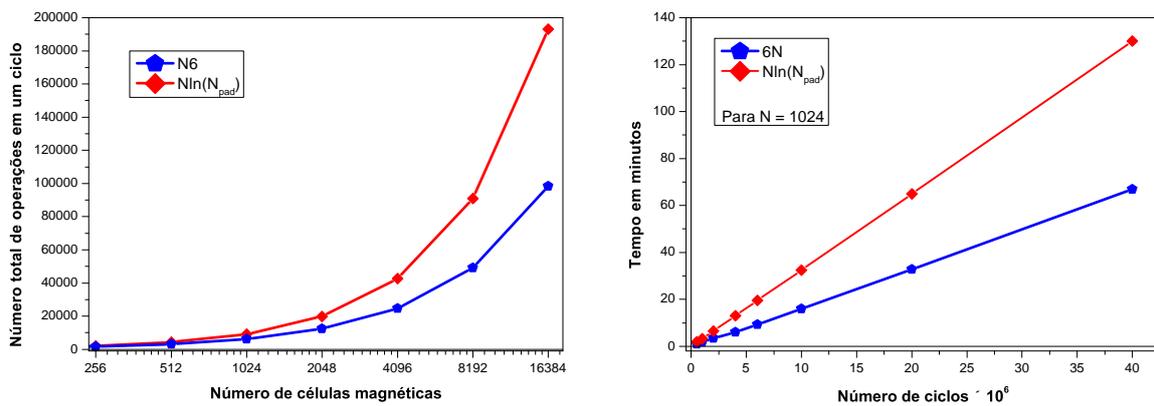


Figura 6.13: Desempenho computacional obtido ao se utilizar o método de soma em memória compartilhada vs FFT.

Mesmo utilizando um número pequeno de elementos, a diferença temporal entre os métodos não deveria ser tão evidente, já se nota que o método de SM tem ganhos consideráveis para um número elevado de ciclos. Portanto, esse método pode superar o método FFT. Entretanto, como citado na seção 3.3.2, o método de *Tensor Grid* promete consumo inferior, proporcional apenas ao número de células.

Além disso, a importância da utilização do campo dipolar pode ser averiguada na figura 6.14, onde, apenas variando o tamanho das células magnéticas, obtemos diferentes resultados (painéis superiores), para o caso sem interação dipolar (painel inferior). Nota-se também que a curva referente a componente m_y da magnetização, não apresenta o comportamento esperado, nota-se que a magnetização desaparece

para o painel inferior, além de apresentar os mesmos resultados para diferentes tamanhos de células magnéticas.

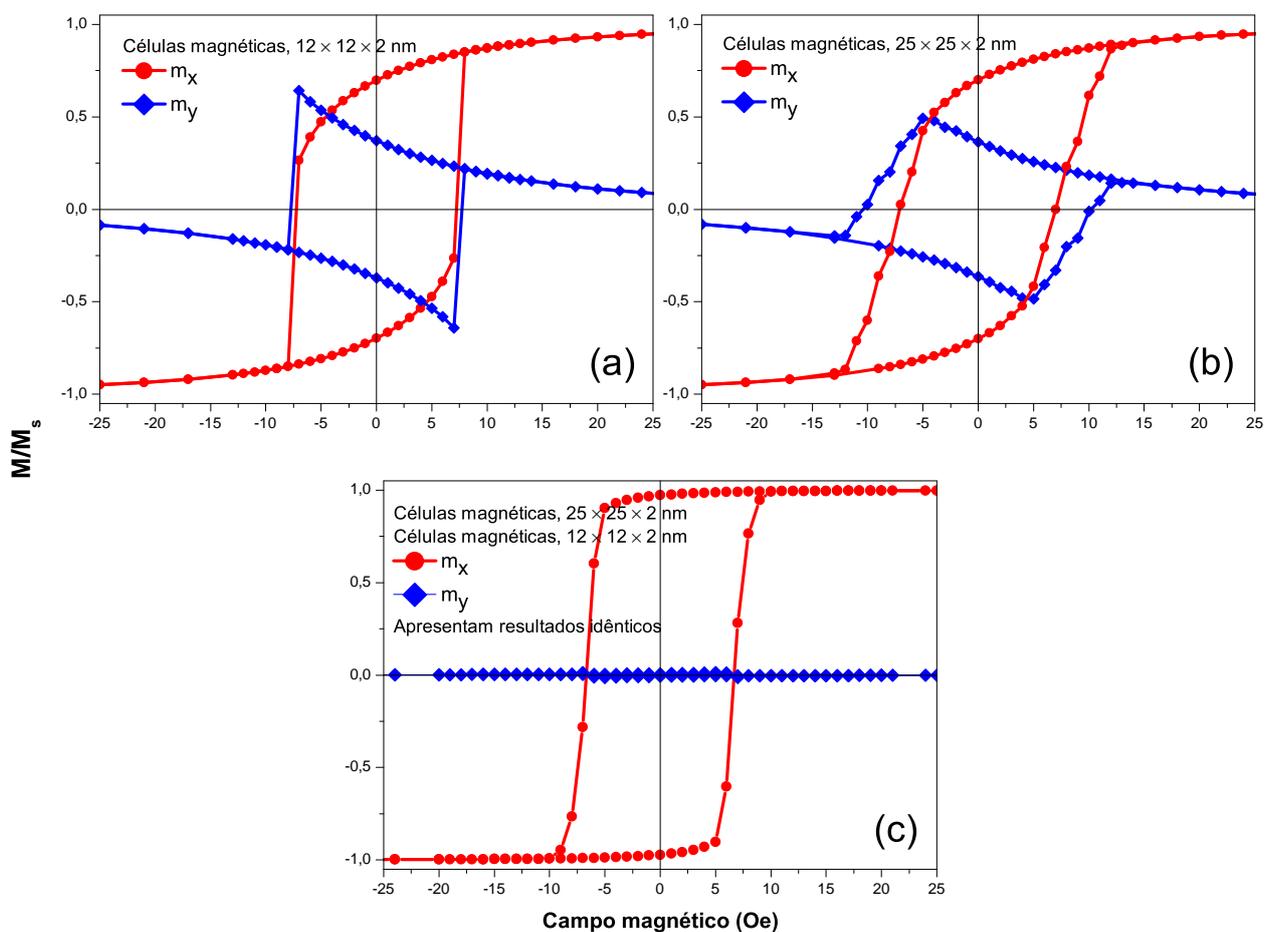


Figura 6.14: Comportamentos diferenciados causados pela interação dipolar. Nos painéis superiores essa se faz presente, e o tamanho e forma das células magnéticas altera a forma da curva de histerese. Já para o caso sem o campo dipolar, o laço de histerese independe da forma e suas componente m_y , não fornece informações confiáveis.

6.3 Análise computacional

A análise computacional consiste na tentativa de reprodução qualitativa do fenômeno de meta-estabilidade. Para isso é necessário a construção de conjunto de células magnéticas que representem o sistema de interesse. São atribuídas suas características, baseadas em parâmetros encontrados na literatura. Mimetizar o material FM não é um empecilho, já que maioria deles possui seus parâmetros estimados, e também a interação dos grãos FM entre si é bem conhecida. Porém a construção da interface AFM/FM pode apresentar inúmeros problemas.

Toda a elaboração do AFM se baseia no modelo de interface ideal, no qual todos momentos presentes na camada AFM são não-compensados. Os grãos podem possuir diferentes eixos e constantes de anisotropia. Além disso, os grãos FM têm interação de troca entre primeiros ou segundos vizinhos como mostrado na seção 3.2.1. Nos AFM, especialmente próximos à interface, é difícil afirmar se a interação de troca entre grãos interfaciais irá ocorrer. Para este trabalho optou-se pela não utilização de interação entre grãos que compõe o AFM; assim, os grãos AFM apenas interagirão com os grãos FM, mas não entre si. A escolha foi tomada para reduzir o número de interações dentro do AFM, reduzindo o número de interações e facilitando a interpretação dos resultados.

A geometria escolhida para a descrição do conjunto de células magnéticas, tem como número de células $n_x = 16$, $n_y = 16$ e $n_z = 2$, com dimensões de $h_x = 12$, $h_y = 12$ e $h_z = 2$ nm, totalizando 512 células magnéticas. Os parâmetros utilizados para o FM mimetizam o cobalto, apenas a constante de anisotropia foi reduzida para que o H_C resultasse da ordem de 20 Oe. Para o AFM, os parâmetros foram atribuídos conforme a necessidade do estudo, porém a interação FM/AFM foi escolhida para gerar um $H_{EB} \approx 70$ Oe.

Utilizando uma metodologia semelhante a do experimento, o sistema como um todo é exposto a um campo magnético suficiente para saturar o FM. As interações FM/AFM não serão capazes de desorientar o FM; assim, o material AFM poderá se acoplar com o FM ou permanecer em seu estado atual, o que dependerá de sua constante de anisotropia uniaxial e sua orientação.

Os grãos mais anisotrópicos são aqueles que apresentaram uma menor mobilidade em sua orientação. Já os grãos com campo de anisotropia da ordem do campo de troca ou inferiores, puderam se projetar na direção do eixo energeticamente favorável.

Juntamente a aplicação do campo magnético, o sistema micro-magnético foi exposto a um campo térmico \mathbf{H}_{th} com diferentes amplitudes, tentando induzir modificações especialmente nos grãos AFM. O comportamento das evoluções "temporais" pode ser visualizado na figura 6.15, na qual são eviden-

ciadas mudanças no H_{EB} , em função da agitação térmica.

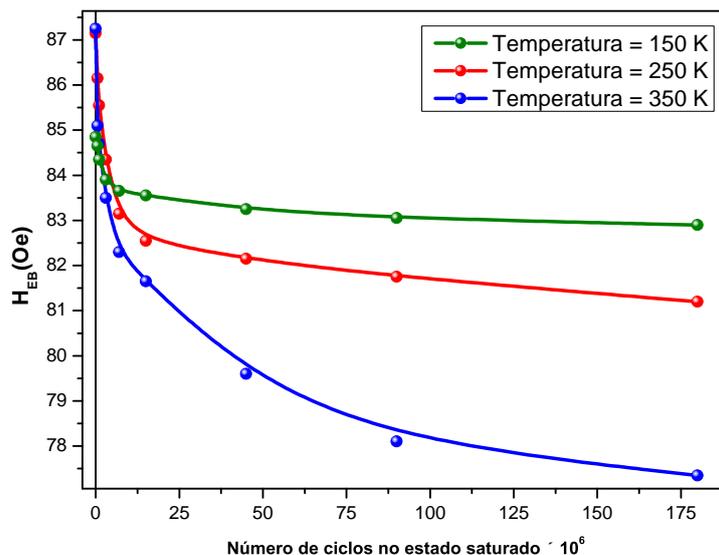


Figura 6.15: Variações obtidas no campo H_{EB} em função do número de ciclos para diferentes temperaturas. Nota-se que a mesma tendência para o caso experimental foi obtida, além disso as oscilações térmicas afetam a amplitude de variação do H_{EB} .

As mudanças no H_C foram pequenas, sendo assim inconclusivas; estas podem ser visualizadas na figura 6.16. As oscilações térmicas são notadas somente para a temperatura de 350 K. Dessa forma, o comportamento qualitativo da reversão temporal pôde ser evidenciado por meio das simulações micro-magnéticas.

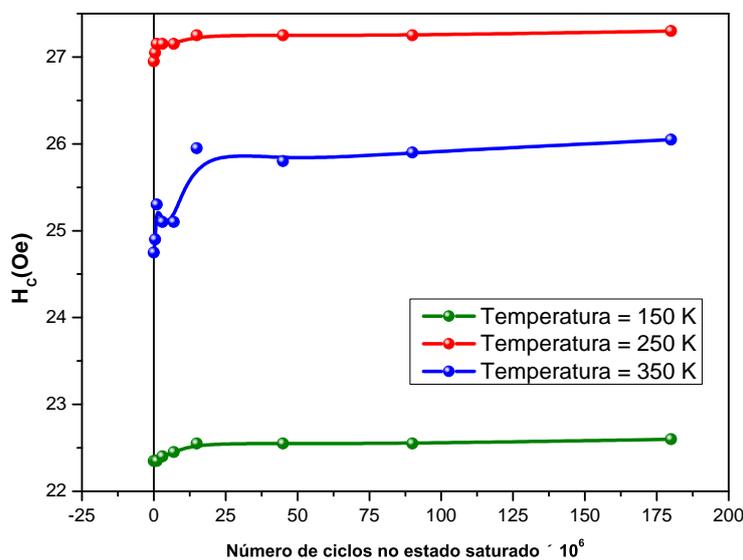


Figura 6.16: Variações obtidas no campo H_C em função do número de ciclos para diferentes temperaturas. Devido a pequenas amplitudes de variação do campo coercivo torna-se difícil afirmar se existe alguma tendência de acréscimo ou decréscimo do H_C .

7 *Conclusões*

Neste trabalho foi realizado um estudo sobre a evolução temporal de sistemas que apresentam EB, usando medidas de histerese magnética. Com o objetivo de melhor entender os resultados, foi desenvolvido um código computacional. O processo de construção de um *software* faz uso da teoria do micromagnetismo na reprodução de sistemas magnéticos submetidos a diferentes estímulos. Para essa descrição foi necessário rever as origens do ferromagnetismo vista no cap. 1. A partir daí, o modelo micromagnético, campos presentes, e métodos de cálculo para cada campo foram detalhados, juntamente com o processo de integração numérica, podendo ser encontrados nos capítulos 3 e 4 respectivamente.

A parte computacional desenvolvida acrescenta um método mais eficiente do que FFT para o cálculo do campo dipolar. O método de somar vetores em memória compartilhada apenas é possível devido a utilização do processamento em paralelo e pode ser aplicado em muitos casos para aumentar a eficiência.

Após sua construção, a validação do *software LLGmag* possibilita o seu uso de maneira adequada. Além disso, vários estados magnéticos característicos de sistemas com interação de longo alcance puderam ser reproduzidos.

Os principais resultados foram:

- I A análise experimental incluiu um diferente ponto de vista dos filmes finos: amostras como feitas ou irradiadas podem apresentar mudanças apenas com campo magnético aplicado. A meta-estabilidade aparenta ser uma característica intrínseca desses sistemas e pôde ser notado como os diferentes mecanismos de excitação atuam nas amostras.
- II Para o caso do tratamento térmico, nossos filmes finos apresentam meta-estabilidade por apenas algumas horas após esse procedimento. Já a irradiação conserva essa propriedade, sendo que, mesmo após alguns anos, o sistema permanece meta-estável.
- III Através das irradiações com íons leves constatamos que mesmo que o H_{EB} apresente um comportamento reversível, o valor do H_C não pode ser recuperado. Esse fato nos leva a questionar se os

grãos estão sendo absorvidos pela rede do material **AFM** e, assim, deixam de ser detectados.

IV Para finalizar, a análise computacional dos dados mostrou concordância com as mudanças experimentais observadas no valor do H_{EB} . O comportamento referente ao H_C não pôde ser reproduzido. Essa irreprodutibilidade possivelmente está associada a simplicidade do modelo adotado. Mesmo assim, ela foi suficiente para gerar previsões, especialmente nas variações de ΔH_{EB} , em função do número de ciclos, a diferentes temperaturas.

8 *Perspectivas*

O *software*, até então, foi testado apenas para a realização de simulações estacionárias. Para a obtenção de resultados de dinâmica de magnetização, são necessárias mais validações que possibilitariam uma visão microscópica do sistema passo a passo enquanto esse busca o estado de equilíbrio.

Devemos estimar de maneira correta o real ganho de velocidade da rotina que utiliza memória compartilhada, visto que o ganho em tempo computacional acabou sendo maior do que o esperado.

Além disso, outras funções ainda podem ser implantadas, como por exemplo, a atuação de campos magnéticos AC's com diferentes frequências, e medidas de transporte, como as de magnetorresistência e transferência de spin. Um pequeno exemplo pode ser observado na figura 8.1, no qual o fenômeno de transferência de spin é induzido em uma área menor do que o tamanho total do filme, e o efeito sobre os demais grãos pode ser estudado.

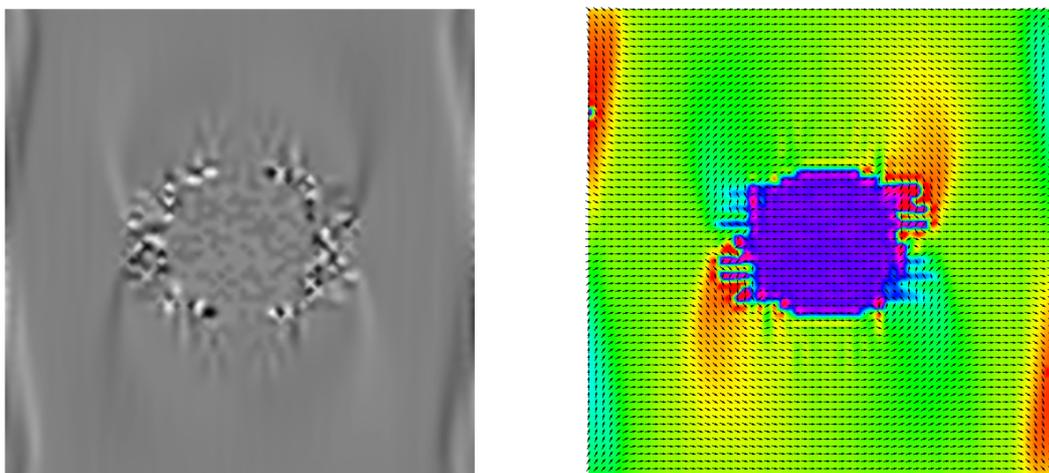


Figura 8.1: A esquerda a visão da componente fora do plano da magnetização pode ser vista; já a direita, as cores são referentes a projeção da magnetização no plano.

É possível a utilização de modelos que levem em conta as interações entre os grãos na interface a fim de reproduzir as mudanças no H_C .

Através da teoria micromagnética, uma infinidade de sistemas pode ser estudada. Essa ferramenta pode inclusive ajudar na construção de sistemas reais, já que determinados comportamentos podem ser previstos pela análise computacional.

Trabalhos publicados com minha participação desenvolvidos no LAM

- R. Cichelero, A. Harres, K. D. Sossmeier, J. E. Schmidt, and J. Geshev.
Magnetic interactions in exchange-coupled yet unbiased IrMn/NiCu bilayers.
Journal of Physics: Condensed Matter **25** (2013) 426001.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/25/42/426001>.
- A. Harres, R. Cichelero, L. G. Pereira, J. E. Schmidt, and J. Geshev.
Remanence plots technique extended to exchange bias systems.
Journal of Applied Physics **114** (2013) 043902.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4816255>.
- J. Geshev, T. Dias, S. Nicolodi, R. Cichelero, A. Harres, J. J. S. Acuña, L. G. Pereira, J. E. Schmidt, C. Deranlot, and F. Petroff.
Role of the uncompensated interface spins in polycrystalline exchange-biased systems.
Journal of Physics D: Applied Physics **44** (2011) 095002.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/44/9/095002>
- R. Cichelero, L. G. Pereira, T. Dias, J. E. Schmidt, C. Deranlot, F. Petroff, and J. Geshev.
Engineering double-shifted hysteresis loops in Co/IrMn/Cu/Co films.
Applied Physicd Letters **95** (2009) 112501.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.3227840>.

Bibliografia

- [1] J. W. F. Brown, *Micromagnetics*. New York: Wiley, 1963.
- [2] W. H. Meiklejohn and C. P. Bean, "New magnetic anisotropy," *Physical Review*, vol. 102, no. 5, p. 1413, 1956.
- [3] S. Nicolodi, L. C. C. M. Nagamine, A. D. C. Viegas, J. E. Schmidt, L. G. Pereira, C. Deranlot, F. Petroff, and J. Geshev, "Copper spacer thickness dependence of the exchange bias in IrMn/Cu/Co ultrathin films," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 316, p. e97, 2007.
- [4] R. Cichelero, L. Pereira, T. Dias, J. E. Schmidt, C. Deranlot, F. Petroff, and J. Geshev, "Engineering double-shifted hysteresis loops in Co/IrMn/Cu/Co films," *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 112501, 2009.
- [5] A. Harres, S. Nicolodi, L. G. Pereira, J. E. Schmidt, A. D. C. Viegas, and J. Geshev, "Effect of short-duration annealing on the exchange bias in IrMn/Co films," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 323, p. 2398, 2011.
- [6] P. A. A. van der Heijden, T.F.M.Maas, W. de Jonge, J. C. S. Kools, F. Roozeboom, and P. J. van der Zaag, "Thermally assisted reversal of exchange biasing in NiO and FeMn based systems," *Applied Physics Letters*, vol. 72, p. 492, 1998.
- [7] J. Fujikata, K. Hayashi, H. Yamamoto, and M. Nakada, "Thermal fluctuation aftereffect of exchange coupled films for spin valve devices," *Journal of Applied Physics*, vol. 83, no. 11, p. 7210, 1998.
- [8] K. Nishioka, "Thermal decay of ferro/antiferromagnetic exchange coupling in Co/CrMnPt systems," *Journal of Applied Physics*, vol. 86, no. 11, p. 6305, 1999.
- [9] A. Paetzold and R. Roll, "Thermally activated self-alignment of exchange coupling in NiO/NiFe bilayers," *Journal of Applied Physics*, vol. 91, no. 10, p. 7748, 2002.
- [10] L. Néel, "Magnetism and local molecular field," *Science*, vol. 174, p. 985, 1971.
- [11] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*. Philadelphia: Saunders College Publishing, 1976.
- [12] W. H. Meiklejohn and C. P. Bean, "New magnetic anisotropy," *Physical Review*, vol. 105, p. 904, Fevereiro 1957.
- [13] M. Takahashi, A. Yanai, S. Taguchi, and T. Suzuki, "A study of exchange anisotropy in Co-CoO evaporated thin films," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 19, p. 1093, 1980.

- [14] R. Jungblut, R. Coehoorn, M. Johnson, J. aan de Stegge, and A. Reinders, "Orientational dependence of the exchange biasing in molecular-beam-epitaxy-grown $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}/\text{Fe}_{50}\text{Mn}_{50}$ bilayers," *Journal of Applied Physics*, vol. 75, p. 6659, 1994.
- [15] A. E. Berkowitz and J. H. Greiner, "Exchange anisotropy and strain interactions in the Ni-NiO system," *Journal of Applied Physics*, vol. 36, p. 3330, 1965.
- [16] T. J. Moran, J. M. Gallego, and I. K. Schuller, "Increased exchange anisotropy due to disorder at permalloy/CoO interfaces," *Journal of Applied Physics*, vol. 78, p. 1887, 1995.
- [17] N. March, P. Lambin, and F. Herman, "Cooperative magnetic-properties in single-phase and 2-phase 3d metallic alloys relevant to exchange and magnetocrystalline anisotropy," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 44, p. 1, 1984.
- [18] J. Kouvel, "A ferromagnetic-antiferromagnetic model for copper-manganese and related alloys," *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 24, p. 795, 1963.
- [19] J. Fassbender and J. McCord, "Magnetic patterning by means of ion irradiation and implantation," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2008.
- [20] J. Fassbender, D. Ravelosona, and Y. Samson, "Tailoring magnetism by light-ion irradiation," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 37, p. R179, Novembro 2004.
- [21] D. Schafer, J. Geshev, S. Nicolodi, L. G. P. ande J. E. Schmidt, and P. L. Grande, "Controlled rotation of the exchange-bias direction in IrMn/Cu/Co via ion irradiation," *Applied Physics Letters*, vol. 93, p. 042501, Julho 2008.
- [22] D. Schafer, P. L. Grande, L. G. Pereira, and J. Geshev, "Ion irradiation effects on the exchange bias in IrMn/Co films," *Journal of Applied Physics*, vol. 109, p. 023905, 2011.
- [23] P. J. Flanders, "An alternating-gradient magnetometer," *Journal of Applied Physics*, vol. 63, p. 3940, 1988.
- [24] L. Landau and E. Lifshitz, "On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies," *Phys. Z*, vol. 8, no. 8, p. 153, 1935.
- [25] T. L. Gilbert and J. M. Kelly, "Anomalous rotational damping in ferromagnetic sheets," *Proceedings of the Pittsburgh Conference on Magnetism and Magnetic Materials*, p. 253, 1955.
- [26] T. R. Koehler and D. R. Fredkin, "Finite element methods for micromagnetics," *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 28, p. 1239, 1992.
- [27] D. B. Kirk and H. W. W., *Programming Massively Parallel Processors: A Hands-on Approach*. Burlington: Elsevier Inc., 2010.
- [28] A. Hubert and R. Schäfer, *Magnetic Domains*. Berlin: Springer-Verlag, 1^a ed., 2000.
- [29] A. Aharoni, *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*. New York: Oxford, 2^a ed., 1996.
- [30] A. E. Berkowitz and K. Takano, "Exchange anisotropy — a review," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 200, p. 552, 1999.

- [31] D. Mauri, H. C. Siegmann, P. S. Baus, and E. Kay, "Simple model for thin magnetic films exchange coupled to an antiferromagnetic substrate," *Journal of Applied Physics*, vol. 62, p. 3047, 1987.
- [32] A. P. Malozemoff, "Random-field model of exchange anisotropy at rough ferromagnetic-antiferromagnetic interfaces," *Physical Review B*, vol. 35, no. 7, p. 3679, 1987.
- [33] K. Takano, R. Kodama, A. Berkowitz, W. Cao, and G. Thomas, "Interfacial uncompensated antiferromagnetic spins: Role in unidirectional anisotropy in polycrystalline Ni₈₁Fe₁₉/CoO bilayers.," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 79, p. 1130, 1997.
- [34] K. Takano, R. Kodama, A. Berkowitz, W. Cao, and G. Thomas, "Role of interfacial uncompensated antiferromagnetic spins in unidirectional anisotropy in Ni₈₁Fe₁₉/CoO bilayers.," *Journal of Applied Physics*, vol. 83, p. 6888, 1998.
- [35] M. Donahue and D. Porter, "Exchange energy formulations for 3d micromagnetics.," *Physica B*, vol. 343, p. 177, 2004.
- [36] P. Grunberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. Brodsky, and H. Sowers, "Layered magnetic structures: Evidence for antiferromagnetic coupling of Fe-layers across Cr interlayers," *Physical Review Letters*, vol. 57, p. 2442, 1986.
- [37] J. Slonczewski, "Overview of interlayer exchange theory," *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 150, p. 13, 1995.
- [38] L. Greengard and V. Rokhlin, "A fast algorithms for particle simulations," *Journal of Computational Physics*, vol. 77, p. 325, 1987.
- [39] S. W. Yuan and H. N. Bertram, "Fast adaptive algorithms for micromagnetics," *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 28, no. 5, p. 2031, 1992.
- [40] L. Exl, W. Auzinger, S. Bance, M. Gusenbauer, F. Reichel, and T. Schrefl, "Fast stray field computation on tensor grids," *Journal of Computational Physics*, vol. 231, p. 2840, 2012.
- [41] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*. New York: Wiley, 3rd ed., 1999.
- [42] A. J. Newell, W. Williams, and D. J. Dunlop, "A generalization of the demagnetizing tensor for nonuniform magnetization," *Journal of Geophysical Research*, vol. 98, no. B6, p. 9551, 1993.
- [43] W. H. Press, S. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes: The art of scientific computing*. Edinburgh: Cambridge University Press, 2007.
- [44] B. V. de Wiele, F. Oyeslager, and L. Dupre, "Application of the fast multipole method for the evaluation of magnetostatic fields in micromagnetic computations," *Journal of Computational Physics*, vol. 227, p. 9913, 2008.
- [45] J. W. F. Brown, "Thermal fluctuations of a single-domain particle," *Physical Review*, vol. 130, no. 5, p. 1677, 1963.
- [46] M. Januszewski and M. Kostur, "Accelerating numerical solutions of stochastic differential equations with cuda," *Journal of Computational Physics*, vol. 181, p. 183, 2010.

-
- [47] B. V. de Wiele, F. Oyeslager, and L. Dupre, "Fast semianalytical time integration schemes for the landau-lifshtiz-gilbert equation," *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 43, no. 6, p. 2917, 2007.
- [48] P. Bogacki and L. Shampine, "A 3(2) pair of runge - kutta formulas," *Applied Mathematics Letters*, vol. 2, no. 4, p. 321, 1989.
- [49] muMAG Micromagnetic Modeling Activity Group, "www.ctcms.nist.gov/rdm/mumag.org.html."
- [50] A. Ehresmann, "He-ion bombardment induced exchange bias modifications: Fundamentals and applications," *Recent research developments in applied physics*, vol. 7, p. 401, 2004.