



Propriedades magnéticas de nanopartículas ordenadas

Estudante: Enzo Figueiredo - Unicamp
Orientador: Prof. Dr. Diego Muraca - DFA/IFGW/Unicamp

04/08/2021

Palavras-chave: Magnetismo; nanopartículas; simulações.

Introdução

O principal objetivo deste projeto foi compreender e descrever o comportamento de uma nanopartícula magnética de monodomínio sujeita a um campo magnético a temperatura $0K$.

Inicialmente foram estudados alguns conceitos básicos do magnetismo e nanomagnetismo, como domínio magnético, largura da parede e diâmetro crítico que serão discutidos a seguir. Um aspecto importante é que o nanomagnetismo está associado ao estudo do comportamento magnético de partículas na escala nanométrica (da ordem de $10^{-9}m$) e nesta escala o comportamento das amostras de nanopartículas é fortemente determinado por suas dimensões.

O domínio magnético se refere a regiões da amostra na qual se considera que os momentos magnéticos do material estão orientados na mesma direção e sentido, sendo assim, partículas consideradas de domínio único, ou monodomínio, possuem apenas uma região na qual os momentos magnéticos estão alinhados, de forma que a soma dos momentos magnéticos dos átomos individuais podem ser considerados como um único momento magnético, já partículas de multidomínio possuem duas ou mais regiões nas quais os momentos magnéticos estão alinhados, de forma que cada um desses domínios possuem momento magnético resultante desalinhados entre si. A região que se encontra entre cada domínio é denominada parede de domínio. A largura da parede de domínio δ_0 , refere-se à região de transição de um domínio magnético para o outro. O diâmetro crítico D_{cr} é definido como o diâmetro a partir do qual se torna favorável a reorganização da estrutura interna da partícula para a criação de mais domínios magnéticos, portanto, em partículas com diâmetros abaixo do diâmetro crítico podemos considerar que todos os seus momentos magnéticos estão alinhados e que rotacionam coerentemente [2, 3]. Os estudos deste projeto se restringem a esta configuração específica: nanopartículas magnéticas de monodomínio cujos momentos magnéticos só podem rotacionar coerentemente.

No que se refere ao magnetismo, em particular ao ferromagnetismo, o estado de equilíbrio na magnetização de um material é determinado pelo estado de mínima energia, que é dado pela soma de várias contribuições, sendo as mais relevantes a energia de anisotropia, a energia magnetostática, a energia de troca e a energia Zeeman. A energia de anisotropia está relacionada com o fato do momento magnético da partícula ter menor dificuldade de se orientar em determinadas direções do espaço devido a efeitos provocados pela estrutura cristalina e pelos orbitais eletrônicos dos átomos que a compõem. A energia magnetostática está associada ao campo desmagnetizante que surge pela interação entre os dipolos magnéticos em oposição à magnetização. A energia de troca provém de efeitos quânticos devido a interações entre os spins dos elétrons que compõem a partícula. A energia de Zeeman se assemelha a uma energia potencial devido ao momento magnético total de uma partícula magnética quando submetida a um campo magnético externo.

Uma importante medida a ser ressaltada é a do ciclo de histerese que permite caracterizar o estado magnético da amostra. Histerese é o nome dado a uma classe de curvas que representam um processo irreversível, ou seja, que há perda de energia quando o sistema evolui de um estado para o outro. Em materiais magnéticos a histerese magnética está associada à perda de energia num ciclo fechado de

magnetização em função do campo externo aplicado, sendo assim, se a nanopartícula magnética passar por processos irreversíveis e for necessário o fornecimento energia ao sistema para fazê-lo retornar ao estado inicial, seu comportamento apresentará uma histerese.

Metodologia

A metodologia seguida foi compreender algum modelo teórico já existente na literatura, reproduzi-lo e simulá-lo numericamente.

O modelo abordado foi o de Stoner-Wohlfarth [1] que considera partículas magnéticas homogêneas e de domínio único em formato de elipsoides a temperatura de $0K$. No caso de magnetização homogênea ocorre que $\nabla M = 0$, assim a contribuição da energia de troca no cálculo da energia total livre é zero e, considerando uma partícula de formato esférico, um elipsoide cujo eixo maior e menor possuem o mesmo comprimento, a densidade volumétrica de energia total é dada por:

$$\frac{E_{total}}{V} = K \sin^2 \theta - \mu_0 M_s H (\cos \theta \cos \psi + \sin \theta \sin \psi \cos \phi) \quad (1)$$

em que θ é o ângulo entre a magnetização e o eixo de anisotropia z , ψ é o ângulo entre o campo aplicado e o eixo de anisotropia z , ϕ é o ângulo que a projeção da magnetização no plano xy faz com o eixo x e K é uma constante que representa a soma dos fatores desmagnetizantes com o termo de anisotropia.

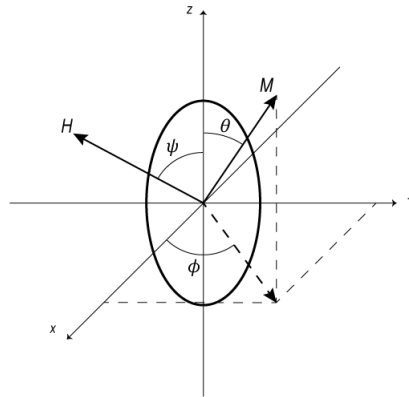


Figura 1: Representação esquemática de uma nanopartícula magnética de formato elipsoidal considerada no modelo S-W.

Para gerar uma expressão mais simplificada pode-se dividir a Equação 1 por $2K$ e, definindo $\epsilon = \frac{E_{total}}{2KV}$, é obtida a seguinte expressão:

$$\epsilon = \frac{\sin^2 \theta}{2} - h \cos(\psi - \theta) \quad (2)$$

sendo $h = \frac{H}{H_a}$ o campo normalizado, em que $H_a = \frac{2K}{\mu_0 M_s}$ é o campo de anisotropia.

Através da Equação 2 foi possível obter o comportamento da densidade de energia total em função do campo aplicado de modo que, se ψ for mantido fixo e o módulo de h for variável, pode-se analisar a variação dos mínimos de energia como representado nas Figuras 2a e 2b para os ângulos $\psi = 0^\circ$ e $\psi = 90^\circ$, respectivamente.

Considerando que a magnetização da partícula sempre tende a se orientar na posição que configura a menor energia, o trabalho foi encontrar os pontos de equilíbrio estável do sistema. Então, a partir da Equação 2, foram calculadas as primeira e segunda derivadas parciais da densidade de energia com respeito a θ , expressas a seguir:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} = \sin \theta \cos \theta - h \sin(\psi - \theta) \quad (3)$$

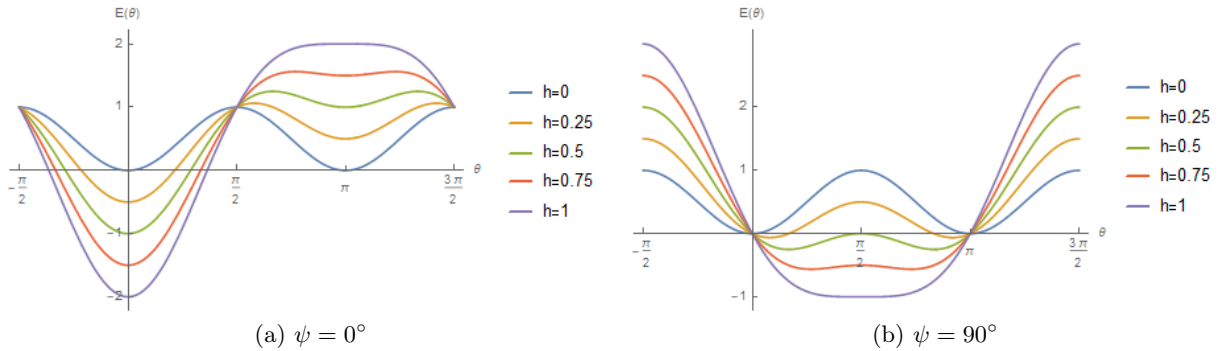


Figura 2: Densidade energia total do sistema para alguns valores de h

$$\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \theta^2} = \cos^2 \theta - \sin^2 \theta + h \cos(\psi - \theta) \quad (4)$$

Assim, fazendo uso das derivadas, basta encontrar os possíveis valores de θ variando os valores h para cada ψ , lembrando que, neste primeiro momento, é considerado que o sistema esteja a temperatura de $0K$.

A modo de simplificação, pode-se definir $h_x = h \cos \psi$ e $h_y = h \sin \psi$, assim, substituindo nas expressões (3) e (4), igualando ambas a zero e resolvendo, encontra-se os pontos de inflexão da equação da densidade de energia e , conseqüentemente, a intensidade de campo reduzido que permite a inversão da orientação da magnetização cuja solução obtida foi $h_x = -\cos^3 \theta$ e $h_y = \sin^3 \theta$. A partir disso, foi possível obter uma relação entre h_x e h_y que coincide com a equação do astroide [5](#). Essa relação indica o campo necessário para que exista inversão na direção da magnetização e delimita a região na qual é possível apenas uma solução de equilíbrio estável (região externa à curva) e a região que permite duas soluções estáveis (região interna à curva) para o mesmo campo aplicado no sistema. O astroide está representado na [Figura 3](#).

$$h_x^{\frac{2}{3}} + h_y^{\frac{2}{3}} = 1 \quad (5)$$

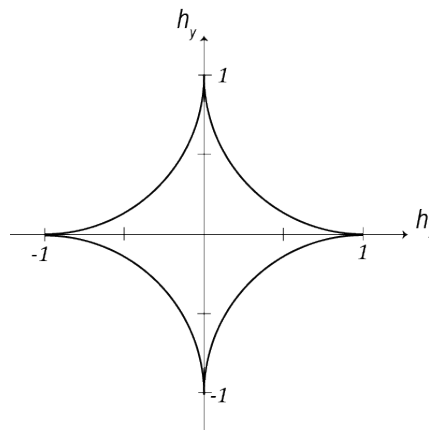


Figura 3: Exemplo de astroide.

Obtendo os valores de θ é possível graficar a magnetização em função do campo aplicado e assim prever o comportamento da magnetização da nanopartícula em função do campo aplicado.

Para obter a solução para qualquer ângulo ψ é necessário resolver o problema numericamente. Primeiramente foi adotada a estratégia de se basear no método utilizado por Szabó [5] que faz uso do astroide como principal recurso, contudo, após vários testes foi possível desenvolver e implementar um código mais simples que retorna o histerese para qualquer ângulo ψ fazendo apenas os cálculos de minimização da energias, que valem para uma única partícula isolada. Após isso, o problema abordado passou então a considerar uma distribuição de partículas não interagentes. A estratégia seguida foi simular numericamente calculando a média da contribuição da magnetização de cada partícula em determinada direção, com base na solução já obtida para uma partícula isolada.

Resultados

A partir dos cálculos foi possível graficar a histerese e interpretar os resultados apenas para os casos $\psi = 0^\circ$ e $\psi = 90^\circ$, visto que são situações com solução analítica, já para os demais ângulos foi necessário um estudo para solucionar o problema de forma numérica. O código implementado em python retorna o histerese para qualquer ângulo ψ fazendo apenas os cálculos de minimização da energia, conforme se mostra na Figura 4.

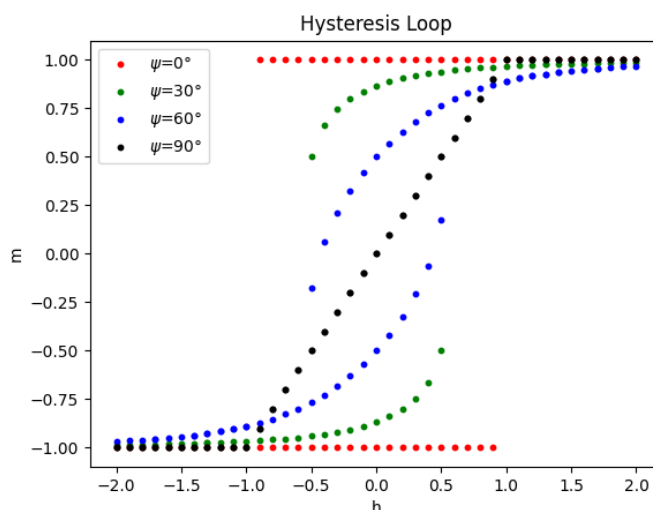
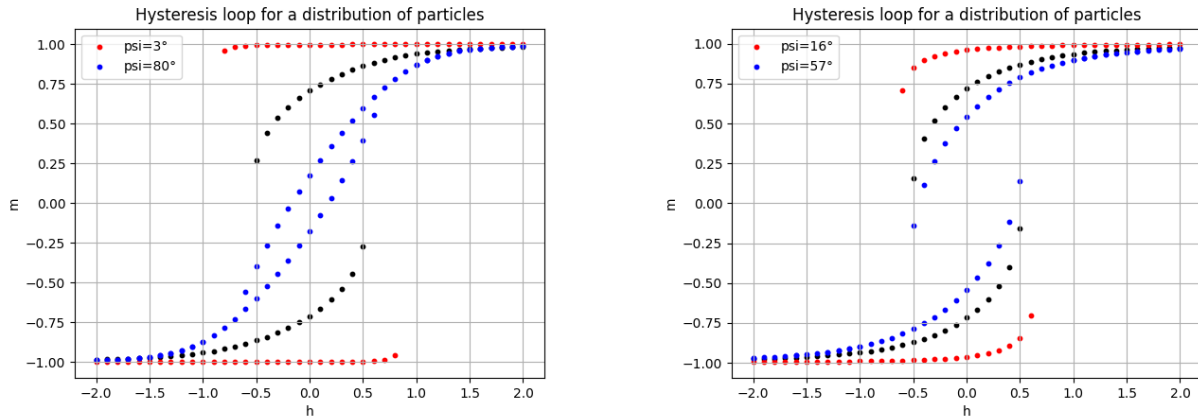


Figura 4: Ciclo de histerese obtido numericamente para os ângulos $\psi = 0^\circ$, $\psi = 30^\circ$, $\psi = 60^\circ$ e $\psi = 90^\circ$.

Por fim, foi desenvolvido outro programa em python agora capaz de retornar a curva de histerese para uma distribuição de nanopartículas não interagentes, ou seja, que não há interações de qualquer natureza entre as partículas, a diferentes orientações. O resultado obtido está expresso nas figuras 5a e 5b.



(a) Distribuição aleatória de 10 partículas com $\psi \leq 90^\circ$. (b) Distribuição gaussiana de 10 partículas, sendo que a gaussiana possui centro em $\psi = 50^\circ$ e $\sigma = 20^\circ$.

Figura 5: Ciclo de histerese para dois tipos de distribuição de partículas não interagentes

	ψ_1	ψ_2	ψ_3	ψ_4	ψ_5	ψ_6	ψ_7	ψ_8	ψ_9	ψ_{10}
Distribuição aleatória	40°	35°	38°	29°	58°	80°	70°	9°	36°	3°
Distribuição gaussiana	57°	55°	56°	47°	16°	45°	35°	38°	26°	50°

Tabela 1: Ângulos gerados numericamente para obtenção do histerese para uma distribuição de partículas orientadas aleatoriamente

Nas figuras 5a e 5b, os pontos em vermelho representam o ciclo de histerese para o menor valor de ψ da distribuição, os pontos em azul, para o maior valor, enquanto que os pontos em preto representam o ciclo de histerese resultante da distribuição. Pode-se observar que no primeiro gráfico o ciclo de histerese resultante está bem próximo à média dos extremos, já no segundo gráfico, o ciclo está bem mais próximo do valor mais provável ($\psi = 50^\circ$), o que faz com que cada gráfico seja condizente com seu respectivo tipo de distribuição.

Referências

- [1] E. C. Stoner and E. P. Wohlfarth - A Mechanism of Magnetic Hysteresis in Heterogenous Alloys (1947)
- [2] Alberto P. Guimarães - Principles of Nanomagnetism (2009), cap 1-3
- [3] Stephen Blundell - Magnetism in Condensed Matter (2001), cap 1,2 e 6
- [4] A. Iványi - Hysteresis Models in Electromagnetic Computation (1997), cap 6
- [5] Zsolt Szabó and Amália Iványi - Computer-aided Simulation of Stoner-Wohlfarth Model, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 215-216 (2000), 33-36