

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

**ESTUDO DE SISTEMAS MAGNÉTICOS POLICRISTALINOS
ATRAVÉS DA EQUAÇÃO DE LANDAU–LIFSHITZ–GILBERT**

Eduardo Velasco Stock

Monografia realizada sob Orientação do Prof. Dr. Julian Penkov Geshev, apresentada ao Instituto de Física da UFRGS, como requisito parcial para obtenção do título de Bacharel em Física - Pesquisa Básica.

Porto Alegre
Junho de 2014

Agradecimentos

A realização deste trabalho de conclusão de curso só foi possível devido ao auxílio e companheirismo de algumas pessoas. Agradeço ao Prof. Dr. Julian Penkov Geshev por sua orientação, aos meus colegas de laboratório Artur Harres de Oliveira e Rafael Cichelero pelo apoio e por suas críticas construtivas, a minha família por me dar suporte em todos os momentos, assim como a todos os outros colegas e amigos.

Resumo

A equação da dinâmica da magnetização, proposta por Landau e Lifshitz, é amplamente utilizada e é a base de muitos estudos de simulações de sistemas magnéticos. Neste trabalho, apresentamos uma revisão teórica dos conceitos básicos do micromagnetismo. Inicialmente, são estudadas as equações de Landau-Lifshitz e Landau-Lifshitz-Gilbert. Posteriormente, é descrita a construção de um modelo numérico, cuja dinâmica magnética baseia-se na equação de Landau-Lifshitz-Gilbert. É realizada a apresentação do algoritmo pelo qual o código, utilizado em nossas simulações, baseia-se. Uma breve descrição da linguagem de programação C-CUDA, na qual o código foi escrito, é feita. No final deste trabalho, são mostrados os resultados das simulações e discutidos brevemente os passos que pretendemos seguir na continuação deste trabalho.

Abstract

The equation of the magnetization dynamics proposed by Landau and Lifshitz is widely-used and is the base for numerous studies on simulations of magnetic systems. In this work we confer a theoretical review of the basic concepts of micromagnetism. First, the Landau-Lifshitz and Landau-Lifshitz-Gilbert equations are presented. After that, the construction of the numerical model used here is described, where the magnetic dynamics is based on the Landau-Lifshitz-Gilbert equation. A presentation of the algorithm on which the code used in our simulation is based is then performed. A brief description of the programming language on which the code is written is made as well. At the end of the study, some simulation results are shown and proposals for future development are presented.

Conteúdo

Introdução	1
1 Revisão teórica	2
1.1 Magnetodinâmica Clássica	2
1.2 Campo de interação de troca	8
1.3 Campo de anisotropia magnetocristalina	10
1.4 Campo magnético externo	10
2 Modelo numérico	12
2.1 Definição	12
2.2 Grãos	13
2.3 Integração numérica	13
2.4 Procedimento computacional	14
2.4.1 1º passo: Construção	14
2.4.2 2º passo: Campo efetivo	16
2.4.3 3º passo: Integração numérica	17
2.4.4 4º passo: Estado de equilíbrio	17
2.4.5 5º passo: Curva de histerese	18
3 Simulações computacionais	19
3.1 Simulações em paralelo	19
3.2 Análise de grãos	20

<i>Conteúdo</i>	5
3.3 Distribuições corrigidas	24
3.4 Análise de resultados	29
4 Conclusão	30
5 Perspectivas	31
Bibliografia	32

Introdução

Sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade são parte fundamental da tecnologia atual, encontrando inúmeras aplicações em diversos dispositivos. Um exemplo são as mídias de gravação magnética, responsáveis pelo armazenamento de dados.

As primeiras teorias que buscaram descrever os fenômenos do magnetismo da matéria surgiram no início do século XX. Uma abordagem rigorosa da dinâmica da magnetização foi realizada em 1935, por Landau e Lifshitz. Estes, descreveram o movimento de um *spin* individual¹ sob a influência de um campo magnético. A equação proposta por Landau e Lifshitz é a base para muitos trabalhos já publicados. Posteriormente, Gilbert, propôs uma forma alternativa de escrever a equação de Landau-Lifshitz.

Neste trabalho, pretende-se estudar a equação de Landau-Lifshitz na formulação de Gilbert (LLG), através de simulações da dinâmica magnética de filmes finos policristalinos. O código utilizado nos cálculos foi escrito e vem sendo implementado há aproximadamente dois anos no laboratório de magnetismo da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Primeiramente, realizaremos uma revisão da teoria por trás da equação diferencial de LLG e descreveremos os campos responsáveis pela dinâmica da magnetização utilizados em nossas simulações. Em seguida, um modelo numérico será apresentado. O conceito de grão e sua construção a partir do diagrama de Voronoi serão explicados. Posteriormente, será descrita uma proposta de correção das distribuições da anisotropia do sistema. Por último, os resultados das simulações serão apresentados e discutidos.

1 Revisão teórica

1.1 Magnetodinâmica Clássica

Os fenômenos magnéticos manifestam-se na natureza de maneira análoga aos fenômenos elétricos. É possível perceber isto quando observamos a forma coulombiana da força de interação de dois pólos magnéticos. Considerando dois pólos que apresentam fluxos magnéticos m_1 e m_2 , separados por uma distância r , a força de interação entre estes é dada por

$$F = \frac{m_1 m_2}{4\pi\mu_0 r^2}, \quad (1.1)$$

onde μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo.²

Suponhamos que um magneto de comprimento l possua dois pólos opostos de fluxos magnéticos $+m$ e $-m$ e que este esteja imerso em um campo magnético externo uniforme \vec{H} , como mostra a figura 1.1. A força que cada pólo sofrerá será, respectivamente,

$$\vec{F}_1 = m\vec{H} \quad (1.2)$$

e

$$\vec{F}_2 = -m\vec{H}. \quad (1.3)$$

Ao estabelecermos um referencial no centro do magneto, notamos que a força resultante é nula. O torque,² entretanto, será dado por

$$\vec{\tau} = \sum_i \vec{\tau}_i = \vec{r} \times \vec{F}_1 + \vec{r} \times \vec{F}_2, \quad (1.4)$$

$$\vec{\tau} = m\vec{r} \times \vec{H} - m(-\vec{r}) \times \vec{H}, \quad (1.5)$$

$$\vec{\tau} = 2m\vec{r} \times \vec{H}. \quad (1.6)$$

Neste ponto é interessante definirmos a quantidade momentum magnético, $\vec{\mu} = m\vec{l}$, onde \vec{l} é um vetor que une os dois pólos. Sendo assim, reescrevemos a equação 1.6 como

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{H}. \quad (1.7)$$

A equação 1.7 não faz menção ao formato do magneto, logo esta possui um caráter geral.

Ao lembrarmos da definição de torque, temos

$$\vec{\tau} = \frac{d\vec{L}}{dt}. \quad (1.8)$$

No caso de uma partícula carregada, o torque relaciona-se com o momentum magnético através de

$$\vec{\tau} = -\frac{1}{\gamma} \frac{d\vec{\mu}}{dt}, \quad (1.9)$$

onde γ é a constante giromagnética.²

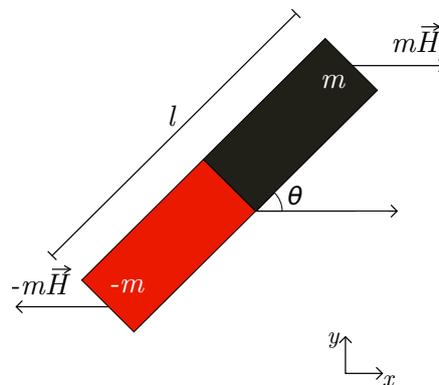


Figura 1.1: Magneto de comprimento l com pólos de fluxos magnéticos $\pm m$.

Combinando as equações 1.7 e 1.9, ficamos com

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} + \gamma\vec{\mu} \times \vec{H} = 0. \quad (1.10)$$

Ao supormos que um material seja formado por um conjunto de momenta magnéticos, define-se a magnetização, \vec{M} , por

$$\vec{M} = \frac{\sum_i \vec{\mu}_i}{\Delta V}, \quad (1.11)$$

$$\vec{M} = \frac{\vec{\mu}}{\Delta V}, \quad (1.12)$$

onde consideramos um volume, ΔV , suficientemente pequeno de modo que o campo \vec{H} possa ser considerado uniforme dentro seu interior. Combinando as equações 1.12 e 1.10 temos que

$$\frac{d\vec{M}}{dt} + \gamma\vec{M} \times \vec{H} = 0. \quad (1.13)$$

Esta última equação representa o movimento de precessão da magnetização em torno do campo magnético externo. Para verificar tal afirmação, suponhamos, sem perda de generalidade, que o campo \vec{H} esteja orientado na direção positiva de y . A equação 1.13 pode ser reescrita em termos de suas componentes cartesianas,

$$\frac{d\vec{M}_x}{dt}\hat{x} + \frac{d\vec{M}_y}{dt}\hat{y} + \frac{d\vec{M}_z}{dt}\hat{z} = -\gamma[(M_y H_z - M_z H_y)\hat{x} + (M_z H_x - M_x H_z)\hat{y} + (M_x H_y - M_y H_x)\hat{z}]. \quad (1.14)$$

Para o nosso caso particular, resultam 3 equações,

$$\frac{d\vec{M}_x}{dt} = \gamma M_z H_y, \quad (1.15)$$

$$\frac{d\vec{M}_y}{dt} = 0 \quad (1.16)$$

e

$$\frac{d\vec{M}_z}{dt} = -\gamma M_x H_y. \quad (1.17)$$

É fácil notar que a componente da magnetização na direção y é constante. Para resolver as equações diferenciais para as outras duas componentes da magnetização, deriva-se as equações 1.15 e 1.17 com relação ao tempo. Desta maneira, ficamos com

$$\frac{d^2\vec{M}_x}{dt^2} = \gamma H_y \frac{dM_z}{dt} \quad (1.18)$$

e

$$\frac{d^2\vec{M}_z}{dt^2} = -\gamma H_y \frac{dM_x}{dt}. \quad (1.19)$$

Substituindo a equação 1.15 na equação 1.19 e a equação 1.17 na equação 1.18, temos que

$$\frac{d^2\vec{M}_z}{dt^2} = -\gamma^2 H_y^2 M_z \quad (1.20)$$

e

$$\frac{d^2\vec{M}_x}{dt^2} = -\gamma^2 H_y^2 M_x. \quad (1.21)$$

As equações 1.20 e 1.21 possuem a mesma forma que a equação diferencial que rege um oscilador harmônico.³ Conclui-se que as componentes x e z da magnetização executam um movimento de rotação em torno do eixo y . Logo, \vec{M} precessiona em torno do campo externo \vec{H} .

A hipótese até aqui descrita, não leva em conta nenhum tipo dissipação de energia. Portanto, a magnetização descreveria um movimento de precessão perpétuo em torno das linhas de campo. Este fato não condiz com a realidade observada. Perdas de energia associadas a magnetização, geralmente, ocorrem devido à formação de correntes induzidas (correntes de Foucault), descontinuidades magnéticas, difusão.⁴

Com o intuito de introduzir a dissipação da energia, Landau e Lifshitz¹ propuseram a adição de um termo fenomenológico de amortecimento na equação da dinâmica da magnetização.

Para melhor descrever as equações diferenciais, a partir de agora adotaremos a notação \vec{H}_{ef} para

nos referirmos ao campo efetivo. A notação \vec{H} será apenas utilizada para denotar-se o campo externo aplicado. Esta escolha é motivada pelo fato de que existem muitas interações magnéticas que são introduzidas na equação diferencial a partir de seu campo. No decorrer deste capítulo, tais interações serão descritas, assim como seus respectivos campos.

Portanto, a equação diferencial de Landau-Lifshitz (LL) é dada por

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma\vec{M} \times \vec{H}_{ef} - \frac{\lambda}{M_s}\vec{M} \times \vec{M} \times \vec{H}_{ef}, \quad (1.22)$$

onde M_s é a magnetização de saturação, \vec{H}_{ef} é o campo efetivo e λ é a constante de amortecimento característico do sistema.

A equação de LL diverge quando λ tende a infinito, ou seja, no caso superamortecido. Gilbert, então, sugeriu que o termo responsável pela dissipação energética fosse proporcional à derivada temporal do vetor magnetização.⁵ Este termo seria uma espécie de amortecimento viscoso, fazendo uma analogia direta com a mecânica de fluidos.

A equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG), é escrita como

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma'\vec{M} \times \vec{H}_{ef} + \frac{\alpha'}{M_s}\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt}, \quad (1.23)$$

onde α' é a constante de amortecimento de Gilbert.

Realizando algumas operações vetoriais, é possível verificar algumas propriedades que o sistema, agora regido pela equação 1.23, possui. Ao executarmos o produto escalar da equação diferencial 1.23 pelo vetor magnetização, obtemos

$$\vec{M} \cdot \frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma'\vec{M} \cdot (\vec{M} \times \vec{H}_{ef}) + \frac{\alpha'}{M_s}\vec{M} \cdot \left(\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} \right). \quad (1.24)$$

Sabendo que o produto vetorial de dois vetores quaisquer resultará em um vetor perpendicular a ambos, temos

$$\vec{M} \cdot \frac{d\vec{M}}{dt} = 0, \quad (1.25)$$

que, devido à propriedade de comutação do produto escalar, resulta em

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} (\vec{M} \cdot \vec{M}) = 0, \quad (1.26)$$

ou então,

$$\frac{d}{dt} (M^2) = 0. \quad (1.27)$$

O resultado da equação 1.27 é importante, pois determina que o módulo da magnetização se mantém constante.

Multiplicando vetorialmente a equação 1.23 pela magnetização, ficamos com

$$\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma' \vec{M} \times \vec{M} \times \vec{H}_{ef} + \frac{\alpha'}{M_s} \vec{M} \times \vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt}. \quad (1.28)$$

Ao aplicarmos a propriedade do produto vetorial triplo nesta equação, temos

$$\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma' \vec{M} \times \vec{M} \times \vec{H}_{ef} + \frac{\alpha'}{M_s} \left[\vec{M} \left(\vec{M} \cdot \frac{d\vec{M}}{dt} \right) - \frac{d\vec{M}}{dt} (\vec{M} \cdot \vec{M}) \right]. \quad (1.29)$$

Utilizando a equação 1.25 e $|\vec{M}| = M_s$, obtemos

$$\vec{M} \times \frac{d\vec{M}}{dt} = -\gamma' \vec{M} \times \vec{M} \times \vec{H}_{ef} - \alpha' M_s \frac{d\vec{M}}{dt}. \quad (1.30)$$

Colocando o resultado da equação 1.30 na equação 1.23 e fazendo algumas operações algébricas, chega-se à equação original de LL na formulação de Gilbert. Esta é dada por

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\frac{\alpha' \gamma'}{M_s (\alpha'^2 + 1)} \vec{M} \times \vec{M} \times \vec{H}_{ef} - \frac{\gamma'}{\alpha'^2 + 1} \vec{M} \times \vec{H}_{ef}. \quad (1.31)$$

Neste trabalho, a abordagem dos sistemas magnéticos foi realizada através da utilização da equação

de LL na formulação de Gilbert. A seguir, os campos que compõem o campo efetivo são descritos.

1.2 Campo de interação de troca

O campo de interação de troca, ou campo de *exchange*, foi introduzido formalmente por Heisenberg,² em 1928, com o advento da teoria quântica. A energia associada a esta interação, para o caso de primeiros vizinhos, é dada por

$$E_{ex} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.32)$$

onde J é constante de acoplamento.

Ao escrevermos a energia em termos do ângulo entre os spins vizinhos, ficamos com

$$E_{ex} = -JS^2 \sum_i \sum_{j \neq i} \cos \phi_{i,j}, \quad (1.33)$$

onde $\phi_{i,j}$ é o ângulo entre o i -ésimo e o j -ésimo *spin*, o somatório em i é realizado sobre todos *spins* e o somatório em j é realizado sobre os primeiros vizinhos do i -ésimo *spin*.

Assumiremos que o tamanho característico no qual varia a magnetização seja muito maior que a distância entre os *spins*. Deste modo, é razoável considerar que a magnetização seja uma variável contínua espacialmente. De acordo com a lei dos cossenos, a equação 1.33 é reescrita como

$$E_{ex} = -\frac{JS^2}{2M_s^2} \sum_i \sum_{j \neq i} [\vec{M}(\vec{r}_i + \Delta\vec{r}_{ij}) - \vec{M}(\vec{r}_i)]^2, \quad (1.34)$$

onde o termo constante de energia foi negligenciado e definimos que

$$\vec{M}(\vec{r}_i) = M_s \vec{m}(\vec{r}_i) \quad (1.35)$$

e

$$\vec{m} \cdot \vec{m} = 1. \quad (1.36)$$

Devido a lenta variação da magnetização, causada pela aproximação semi-clássica, o ângulo entre

a magnetização calculada em pontos vizinhos será muito pequeno. Desta maneira, pode-se utilizar uma aproximação em primeiro ordem em série de Taylor. Temos que

$$\vec{M}(\vec{r}_i + \Delta\vec{r}_{ij}) - \vec{M}(\vec{r}_i) = (\Delta\vec{r}_{ij} \cdot \nabla)\vec{M}(\vec{r}_i) + O((\Delta\vec{r}_{ij})^2). \quad (1.37)$$

Logo, desprezando os termos $O((\Delta\vec{r}_{ij})^2)$, chegamos à forma final para a energia de exchange, resultando em

$$E_{ex} = \frac{JS^2}{2M_s^2} \sum_i \sum_{j \neq i} |(\Delta\vec{r}_{ij} \cdot \nabla)\vec{M}(\vec{r}_i)|^2. \quad (1.38)$$

Escolhendo a rede cristalina como sendo uma rede cúbica simples, de face centrada ou de corpo centrado, todas de lado a , chega-se à expressão⁶

$$E_{ex} = \frac{Ja^2S^2}{M_s^2} \sum_i \left[\left(\frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \vec{M}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \vec{M}}{\partial z} \right)^2 \right]. \quad (1.39)$$

Para o caso em que o tamanho sistema é muito maior que o tamanho da célula unitária, o somatório torna-se uma integral. Sendo assim, utilizando a densidade de *spins*, dada por

$$\rho_s = \frac{n_s}{a^3}, \quad (1.40)$$

onde n_s é o número de *spins* dentro de uma célula, pode-se escrever a energia de interação de troca como

$$E_{ex} = \frac{Ja^2S^2}{M_s^2} \int \rho_s \left[\left(\frac{\partial \vec{M}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \vec{M}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \vec{M}}{\partial z} \right)^2 \right] dV. \quad (1.41)$$

O campo de *exchange* pode ser derivado a partir desta energia, utilizando o princípio variacional³

$$\vec{H}_{ex} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\delta E_{ex}}{\delta \vec{M}(\vec{r})}, \quad (1.42)$$

$$\vec{H}_{ex} = \frac{2A}{\mu_0 M_s^2} \left(\frac{\partial^2 \vec{M}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{M}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \vec{M}}{\partial z^2} \right), \quad (1.43)$$

$$\vec{H}_{ex} = \frac{2A}{\mu_0 M_s^2} \nabla^2 \vec{M}. \quad (1.44)$$

1.3 Campo de anisotropia magnetocristalina

Os campos de anisotropia magnetocristalina têm sua origem na estrutura cristalina dos materiais. Os momentos magnéticos, pertencentes a uma determinada estrutura de rede, apresentam direções preferenciais de orientação. Estas direções são definidas a partir do tipo de quebra de simetria que ocorre na rede e são chamadas de eixos de fácil magnetização ou eixos fáceis.

A anisotropia magnetocristalina uniaxial caracteriza-se por aprestrar apenas um eixo de fácil magnetização. Um exemplo típico de material que apresenta este tipo de estrutura é o cobalto (Co) em sua fase hexagonal, onde observa-se que o eixo fácil orienta-se perpendicularmente ao plano hexagonal. A energia associada a anisotropia uniaxial é dada por⁶

$$E_u = - \int \left(K_{u1} \frac{M_{\perp}^2}{M_s^2} + K_{u2} \frac{M_{\perp}^4}{M_s^4} + O(M_{\perp}^6) \right) dV, \quad (1.45)$$

onde M_{\perp} é a componente da magnetização na direção do eixo fácil.

O campo de anisotropia uniaxial é dado por

$$\vec{H}_u = \frac{2K_{u1}}{\mu_0 M_s^2} M_{\perp} \hat{M}_{\perp} + \frac{4K_{u2}}{\mu_0 M_s^4} M_{\perp}^3 \hat{M}_{\perp}. \quad (1.46)$$

1.4 Campo magnético externo

A energia associado a aplicação de um campo magnético externo, é denominada energia de Zeeman e é dada por

$$E_z = - \int \vec{H} \cdot \vec{M} dV, \quad (1.47)$$

onde \vec{H} é o campo externo aplicado.

O campo magnético efetivo resulta em

$$\vec{H}_{ef} = \vec{H}_{ex} + \vec{H}_{anis} + \vec{H}_{ap}. \quad (1.48)$$

2 *Modelo numérico*

2.1 Definição

Os sistemas reais que desejamos estudar são filmes finos com espessuras da ordem de alguns nanômetros. Para tanto, faremos uso de cálculos micromagnéticos,⁷ utilizando o método de diferenças finitas.

Nossa representação consiste em uma rede composta por células unitárias cúbicas. Cada célula contém um momentum magnético posicionado em seu centro.

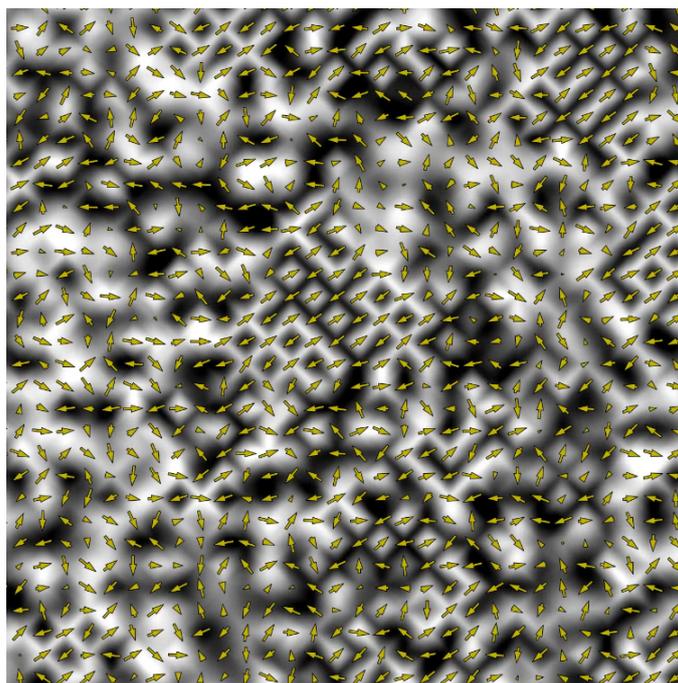


Figura 2.1: Momenta magnéticos em uma rede quadrada.

A equação diferencial escolhida para reger a dinâmica dos momenta é a equação de LLG onde, através do termo de campo efetivo, são definidas todas as interações dos entes magnéticos. Os campos utilizados em nosso modelo são os gerados pela interação de troca, anisotropia magneto-cristalina e o

Uma função qualquer, $f(t)$, tem seu valor em um passo Δt a frente, dado por

$$f(t + \Delta t) \approx f(t) + \Delta t f'(t), \quad (2.1)$$

onde $f(t)$ é a função de interesse calculada no passo anterior t e $f'(t)$ é a sua derivada.

A motivação por trás desta escolha, deve-se ao fato de que o tamanho do passo de tempo, Δt , utilizado em nosso código, é extremamente pequeno. Portanto, o erro associado a aproximação do método é relativamente pequeno.

A integração temporal da equação de LLG é realizada de maneira que, em cada passo, os momenta tenham seus valores normalizados individualmente. Esta normalização é feita com o intuito de manter a norma da magnetização constante, minimizando os erros provocados pelo método de integração.

2.4 Procedimento computacional

O estudo do comportamento magnético de nosso sistema é realizado através da análise de curvas de histerese. Para tanto, faz-se necessário compreender como o código, que torna essa análise possível, funciona. A figura 2.3 apresenta, de maneira resumida, o algoritmo utilizado no código.

2.4.1 1º passo: Construção

O primeiro passo do algoritmo consiste na construção do sistema. Primeiramente, são definidos a quantidade de camadas que compõem o sistema e estipula-se a quantidade e tamanho dos grãos de cada camada. A partir desta etapa, definem-se todas as características dos momenta magnéticos, tais como distribuições da constante de anisotropia, direção de eixo fácil e parâmetros de interação.

As constantes de anisotropia uniaxial, K_u , representadas na equação 1.45, são responsáveis por refletir o quão “preso” ao eixo fácil, os momenta de um determinado grão estão. Em nosso modelo, utilizamos apenas o termo de 1ª ordem em energia, ou seja, o termo associado a K_{u1} . A constante de anisotropia, K_{u1} , de cada grão, é gerada por uma variável aleatória cuja distribuição de probabilidade é do tipo log-normal,

$$p(x)_{log} = \frac{1}{x\sigma_{log}\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(\ln(x) - \mu_{log})^2}{2\sigma_{log}^2} \right], \quad (2.2)$$

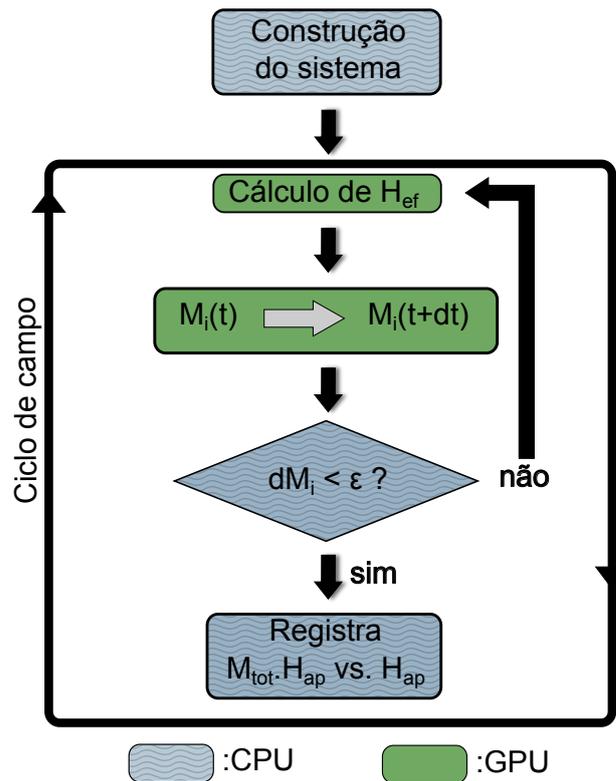


Figura 2.3: Representação esquemática do algoritmo utilizado.

onde $p(x)_{log}$ é a densidade de probabilidade, x é a variável aleatória, σ é o desvio padrão e μ é o valor médio da distribuição. O valor médio de K_u e o desvio padrão são definidos *a priori*, ou seja, são parâmetros de entrada.

O crescimento de grãos em um dado material, pode se dar em diferentes direções. Sendo assim, a direção de fácil magnetização de um grão é definida por uma variável aleatória regida por uma distribuição gaussiana,

$$p(x)_g = \frac{1}{2\pi\sigma_g^2} \exp\left[-\frac{(x - \mu_g)^2}{2\sigma_g^2}\right], \quad (2.3)$$

onde μ_g é o valor médio e σ_g é o desvio padrão.

O eixo de fácil magnetização não apresenta sentido preferencial, logo, dois valores de ângulos diferentes em 180 graus, estarão representando a mesma direção. Portanto, razoável que a distribuição gaussiana seja definida dentro do intervalo de ± 90 graus.

Os parâmetros que definem a anisotropia do sistema são os que caracterizam as distribuições citadas. Desta maneira, apesar de utilizar-se estes mesmos parâmetros, a cada simulação, o sistema não se repetirá. Espera-se, entretanto, que a medida que a quantidade de grãos aumente, a dinâmica da magnetização seja reprodutível globalmente.

Estabelecidas as características de anisotropia do sistema, definem-se as constantes de acoplamento, J , entre os momentos magnéticos. Consideramos que o acoplamento entre momentos magnéticos pertencentes a um mesmo grão dá-se de maneira diferente do acoplamento entre momentos de grãos distintos. Dentro de um grão, a constante de acoplamento é a mesma. Portanto, são definidas duas constantes de acoplamento, uma entre momentos do mesmo grão, J_{in} , e outra entre momentos de grãos distintos, J_{out} .

O estado inicial de cada grão, juntamente ao valor de M_s , também são determinados durante esta etapa da simulação. Em geral, escolhe-se arranjos muito simples para suas magnetizações, como por exemplo, um alinhamento perfeito em uma direção ou uma rede de spins anti-paralelos, dependendo do tipo de camada que deseja-se obter. Para o caso do presente trabalho, o estado inicial de total alinhamento na mesma direção e sentido foi utilizado.

2.4.2 2º passo: Campo efetivo

Após a etapa de construção do sistema, inicia-se o processo de cálculo de seus estados magnéticos. A estimativa do campo efetivo sentido por cada grão é representada no segundo passo do algoritmo da figura 2.3. Para o nosso caso, o campo efetivo é compreendido pelos campos de exchange, campo magnetocristalino e campo externo aplicado. Sendo este último, independente do estado do sistema e definido por parâmetro de entrada.

$$\vec{H}_{ef} = \vec{H}_{ex} + \vec{H}_{anis} + \vec{H}_{ap}. \quad (2.4)$$

2.4.3 3º passo: Integração numérica

A próxima etapa do algoritmo consiste em resolver a equação de LLG. A derivada temporal da magnetização é determinado explicitamente pela equação de LLG. Desta maneira, calcula-se a magnetização passo a passo, utilizando o método de Euler,

$$M_x(t + \Delta t)_i = M_x(t)_i + \Delta t \frac{dM_x}{dt}(t)_i, \quad (2.5)$$

$$M_y(t + \Delta t)_i = M_y(t)_i + \Delta t \frac{dM_y}{dt}(t)_i, \quad (2.6)$$

$$M_z(t + \Delta t)_i = M_z(t)_i + \Delta t \frac{dM_z}{dt}(t)_i. \quad (2.7)$$

Para encontrar o estado magnético do sistema, efetua-se este procedimento para todos os momentos magnéticos que o compõem.

2.4.4 4º passo: Estado de equilíbrio

O segundo e o terceiro passo do algoritmo são realizados até que o sistema atinja um estado de equilíbrio. Para tanto, é estabelecido um critério que consiste em analisar, a cada passo, se a taxa de variação temporal da magnetização para todos os grãos é menor que um certo ε , ou seja,

$$|\vec{M} \times \vec{H}_{ef}| \leq \varepsilon. \quad (2.8)$$

No caso em que o critério é respeitado, registra-se o valores da magnetização do sistema e de campo externo aplicado. Em caso negativo, o estado do sistema permanece continuamente sendo evoluído. Esta “laço” permanece durante um determinado tempo suficientemente grande, onde o estado do sistema possa ser considerado assintótico. Neste instante, o processo é interrompido e os valores de magnetização total e campo externo são registrados. Após o registro do estado final do sistema, o próximo passo do algoritmo é realizado.

2.4.5 5º passo: Curva de histerese

Para reproduzir uma curva de histerese, o ciclo de \vec{H}_{ap} parte de um valor máximo H_{max} , diminuindo seu módulo até anular-se e invertendo seu sentido e atingindo o valor mínimo H_{min} . O ciclo se fecha ao realizar o mesmo procedimento no sentido contrário. Cada etapa deste ciclo ocorre quando o quarto passo é finalizado. No final deste processo, uma curva de histerese pode ser visualizada a partir dos dados registrados.

3 *Simulações computacionais*

O objetivo do presente trabalho foi verificar a reprodutibilidade de curvas de histerese de sistemas cuja distribuição de grãos foi gerada a partir do diagrama de Voronoi. Uma proposta de correção das distribuições de constantes de anisotropia e de direções de eixos fáceis será apresentada, implementada e comparada ao método descrito no capítulo anterior. Tal proposta será descrita no decorrer do capítulo.

Uma breve descrição da linguagem de programação, C-CUDA, na qual o código utilizado fora escrito, é realizada a seguir.

3.1 **Simulações em paralelo**

O algoritmo apresentado na figura 2.3 é aparentemente simples. Entretanto, os processos ali descritos, podem ser muito demorados quando sistemas com muitos componentes são levados em conta. A cada passo de tempo, calcula-se o campo efetivo que age sobre cada elemento do conjunto e em seguida atualizam-se seus estados de magnetização. Para atingir o equilíbrio, uma quantidade muito grande de passos devem ser executados, resultando em um processo demorado.

Com este intuito, o código utilizado em nossas simulações, foi escrito em linguagem C utilizando a plataforma *CUDATM*,* criada pela empresa NVIDIA. CUDA é uma sigla da língua inglesa para “Compute Unified Device Architecture”.

Esta plataforma permite aumentos significativos das velocidade de processamentos, pois aproveita a potência da unidade de processamento gráfico (GPU). Desta maneira, os processadores paralelos que compõem a GPU passam a fazer parte do sistema de computação. Sendo assim, a execução de diversos cálculos passa a se dar de maneira simultânea.

*www.nvidia.com.br/cuda

3.2 Análise de grãos

Os sistemas simulados consistiram em uma rede quadrada de lado 5nm, de dimensão total de $128 \times 128 \times 1$ células unitárias.

Com o intuito de analisar a relação do número de grãos com a reprodutibilidade da dinâmica magnética, foram utilizadas distribuições de Voronoi compostas por 256, 512 e 1024 grãos. Para cada uma das três distribuições foram efetuadas três simulações.

A seguir são mostrados gráficos das três curvas de histerese e os histogramas relativos às suas distribuições de constantes de anisotropia e direções de eixos fáceis dos grãos. Junto aos histogramas, foram fitadas curvas do tipo log-normal e Gaussiana com os mesmos parâmetros relativos à primeira etapa do algoritmo.

Curvas de histerese e histogramas

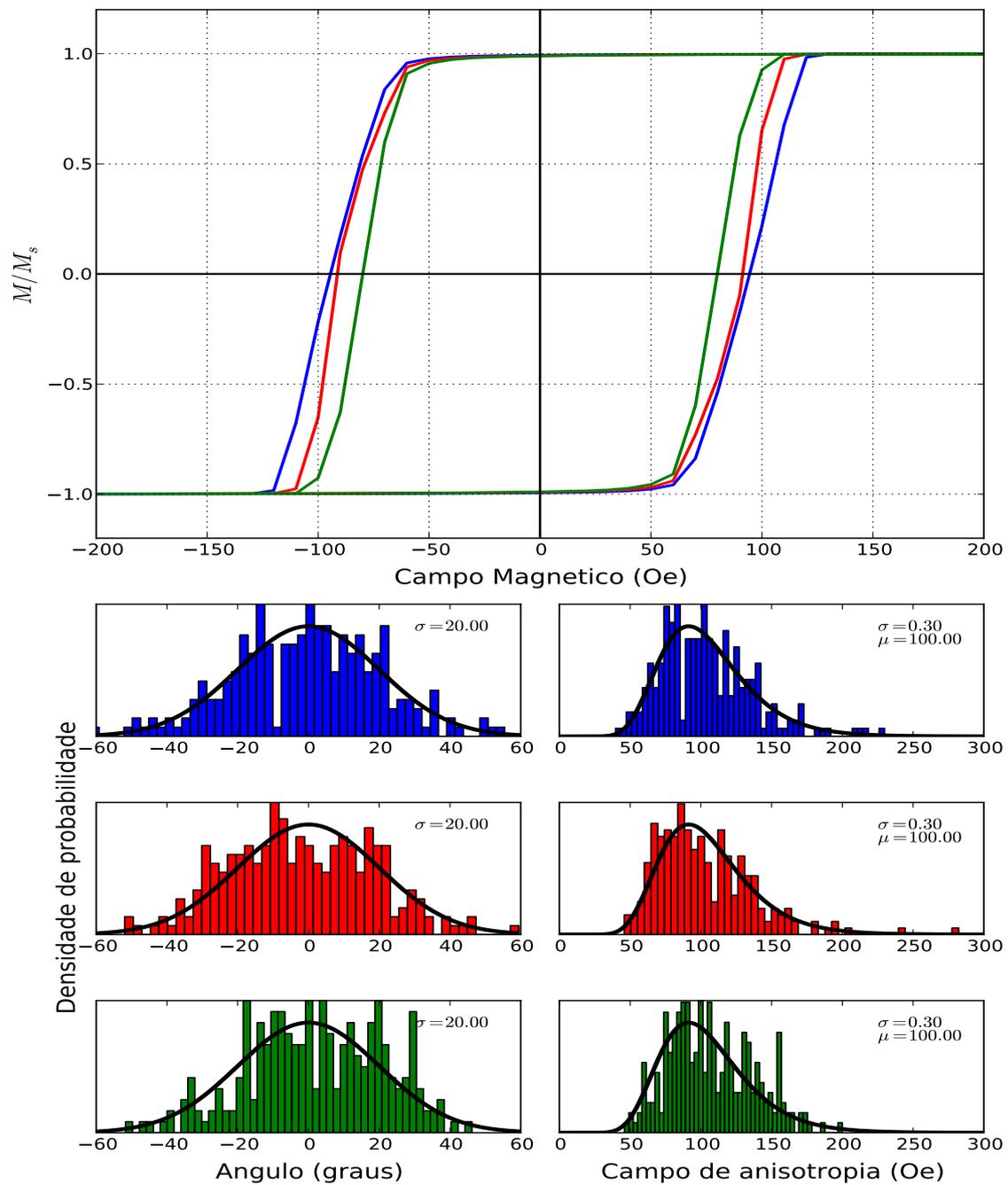


Figura 3.1: Curvas de histerese e distribuições angular e de valor da constante de anisotropia para um sistema formado por 256 grãos.

Curvas de histerese e histogramas

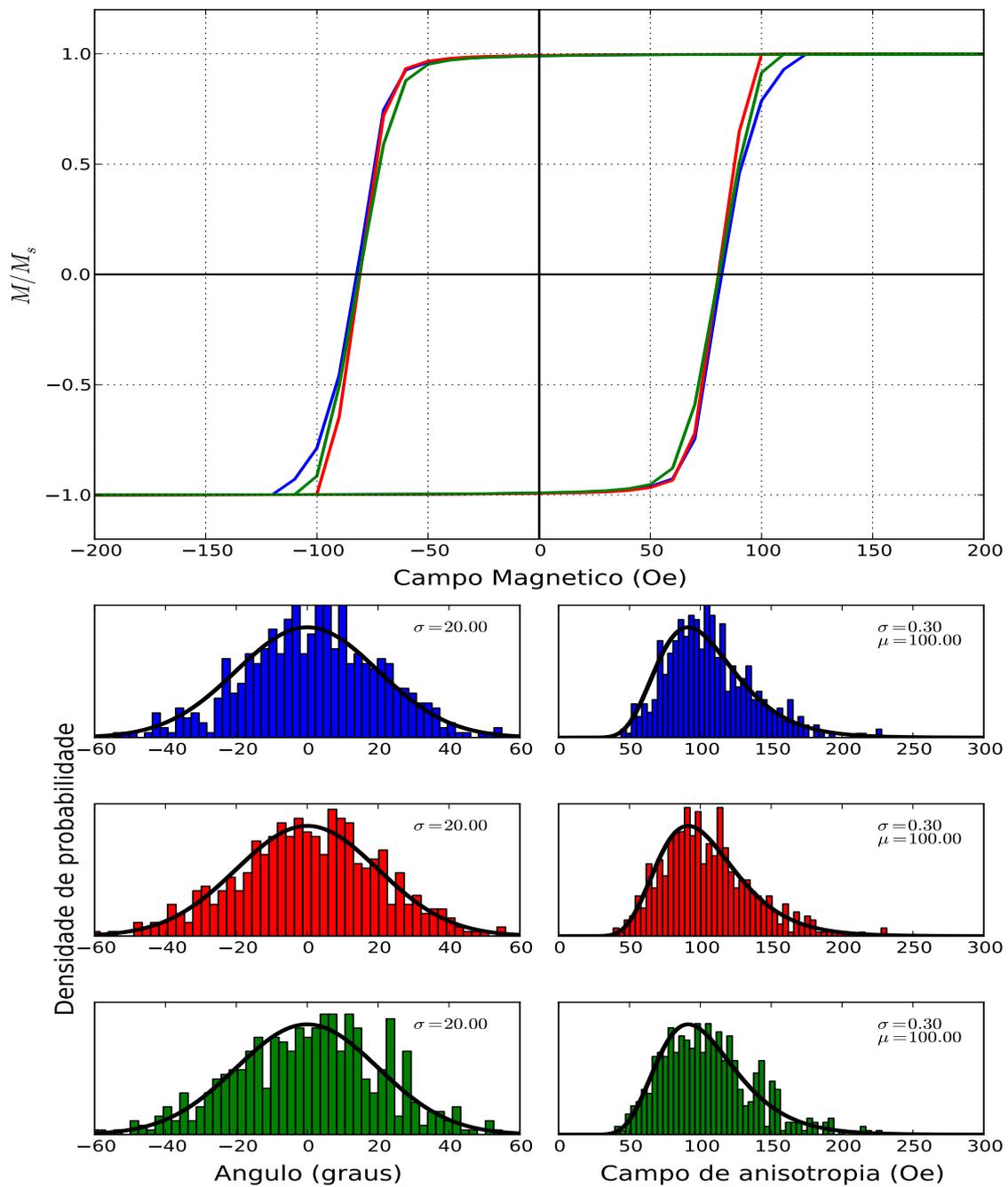


Figura 3.2: Curvas de histerese e distribuições angular e de valor da constante de anisotropia para um sistema formado por 512 grãos.

Curvas de histerese e histogramas

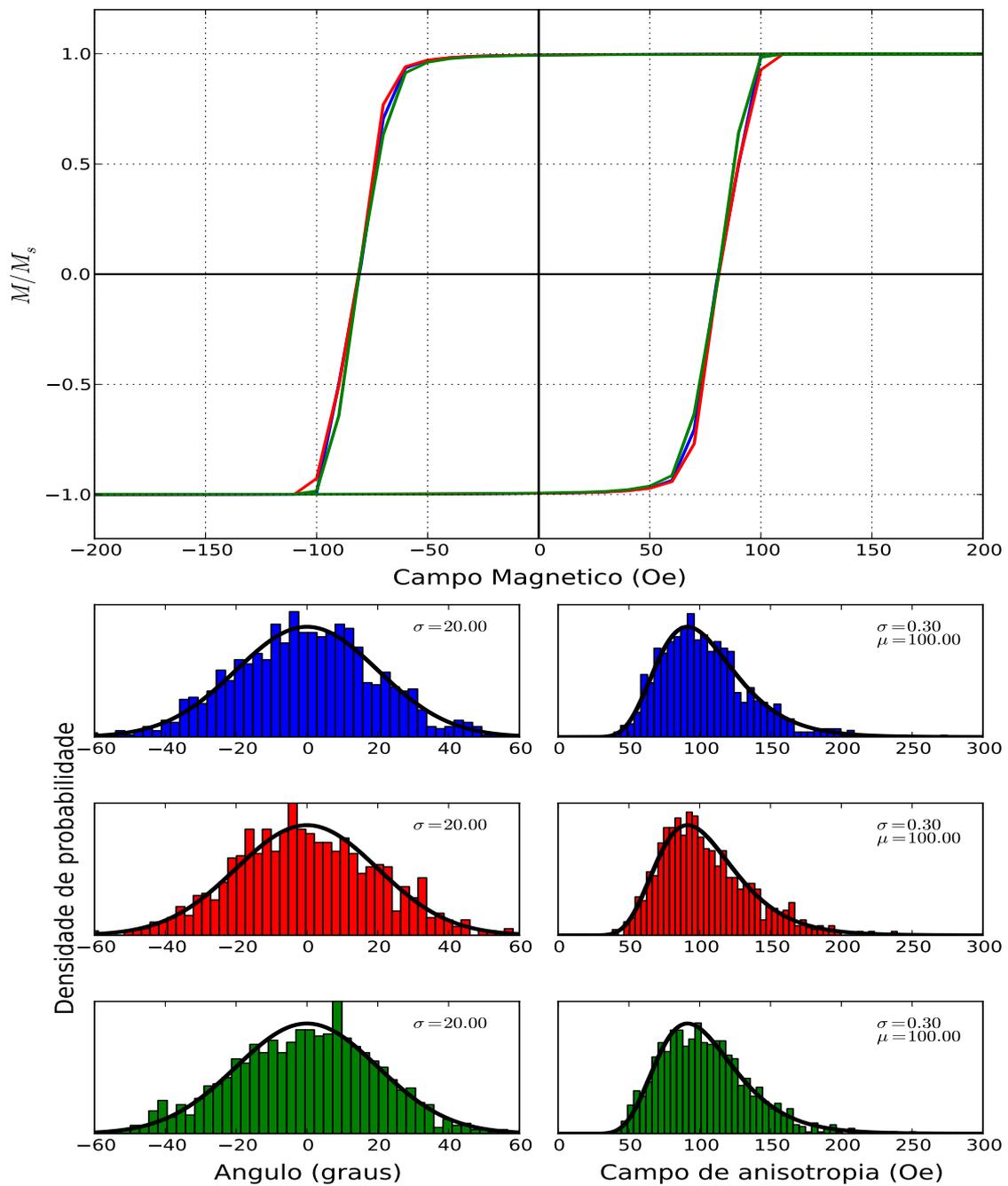


Figura 3.3: Curvas de histerese e distribuições angular e de valor da constante de anisotropia para um sistema formado por 1024 grãos.

3.3 Distribuições corrigidas

Esta etapa do presente estudo consiste em propor um critério de correção para as distribuições das constantes de anisotropia e direções de eixos fáceis. Esta correção é realizada no primeiro passo do algoritmo e consiste em criar histogramas de contagem dos valores gerados das características anisotrópicas, para comparação com suas distribuições.

No caso da constante de anisotropia, cada valor de K_u gerado é contabilizado pelo histograma. Este histograma é definido por um número finito, N , de intervalos de largura ΔK_u , definidos a partir da estipulação de um valor máximo $K_{u\max}$. Desta maneira, temos

$$\Delta K_u = \frac{K_{u\max}}{N}. \quad (3.1)$$

Como um valor de K_u deve ser atribuído a cada grão, a soma de todo o histograma resultará no número total de grãos. Define-se, então, uma função log-normal $p_{\log}(K_u)$, cuja área sob a curva resulta no número total de grãos. O procedimento de correção acontece após cada valor de K_u ser aleatoriamente criado. Uma vez que este é gerado, realiza-se a verificação do critério

$$\text{histograma}_j(K_{ui,j}) \leq p_{\log}(\bar{K}_j) + \delta, \quad (3.2)$$

onde $K_{ui,j}$ é o valor “sorteado” para o i -ésimo grão, j é o índice do intervalo que $K_{ui,j}$ pertence, \bar{K}_j é o valor médio do j -ésimo intervalo e δ é uma margem de erro definida. Em nossas simulações, utilizamos $\delta = 0.5$.

Caso o critério, acima, seja respeitado, o valor gerado de K_u é atribuído ao grão. Em caso negativo, um novo valor é gerado e o critério é novamente verificado.

A distribuição das direções dos eixos fáceis dos grãos passa por um processo análogo. Entretanto, uma função Gaussiana, $p_{\text{gauss}}(\theta)$, é criada. O eixo de fácil magnetização só será definido para um dado grão, caso o ângulo, θ , gerado, respeitar o critério

$$\text{histograma}_j(\theta_{i,j}) \leq p_{\text{gauss}}(\bar{\theta}_j) + \delta', \quad (3.3)$$

onde $\theta_{i,j}$ é o ângulo “sorteado” para o i -ésimo grão, j é o índice do intervalo que $\theta_{i,j}$ pertence, $\bar{\theta}_j$ é o

valor médio do j -ésimo intervalo e δ' é uma margem de erro definida. Utilizou-se $\delta' = 0.5$.

As simulações, efetuadas com a implementação destas propostas de correções, podem ter seus resultados visualizados nas figuras abaixo.

Curvas de histerese e histogramas

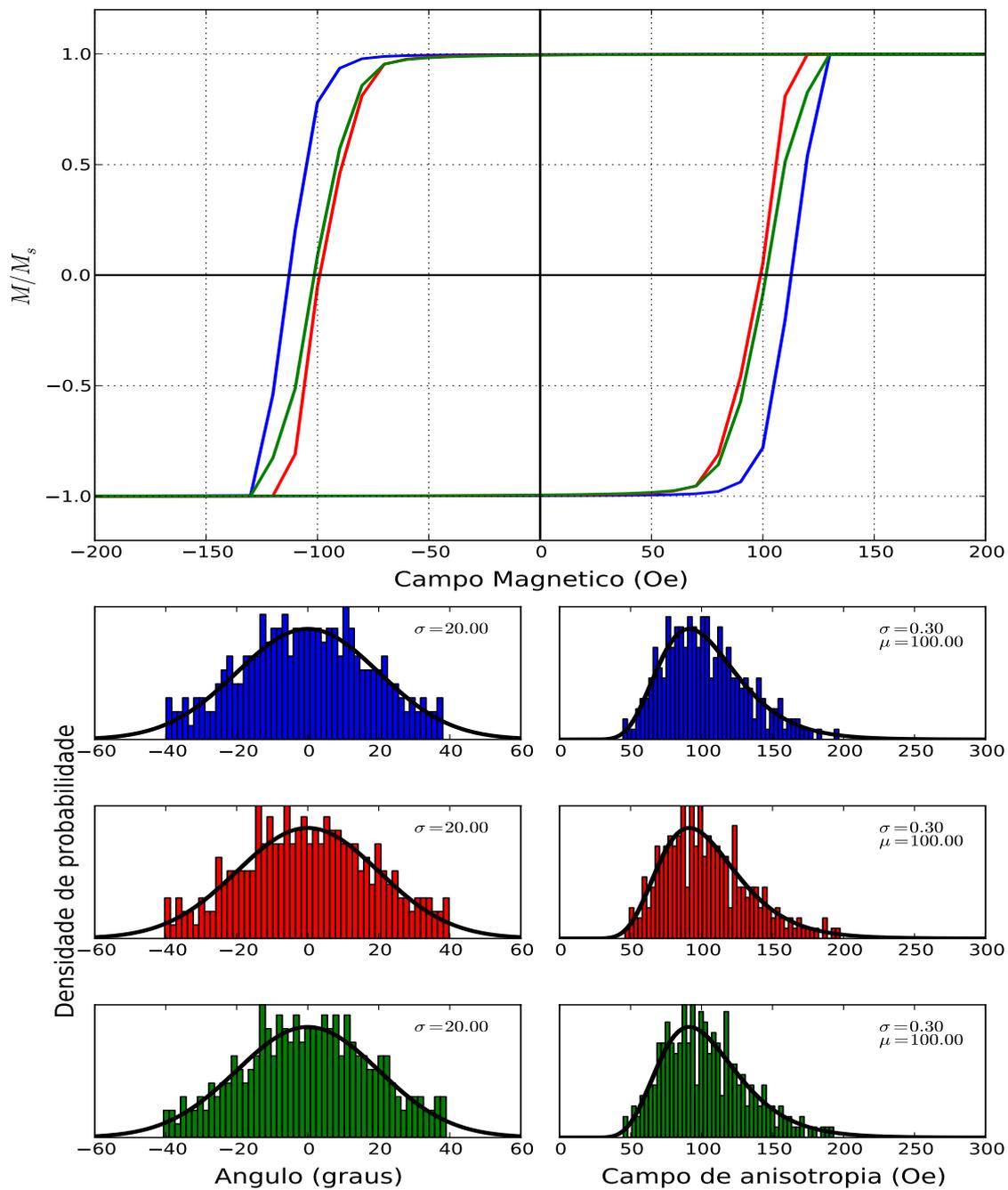


Figura 3.4: Curvas de histerese e distribuições angular e de campo de anisotropia corrigidas, para um sistema formado por 256 grãos.

Curvas de histerese e histogramas

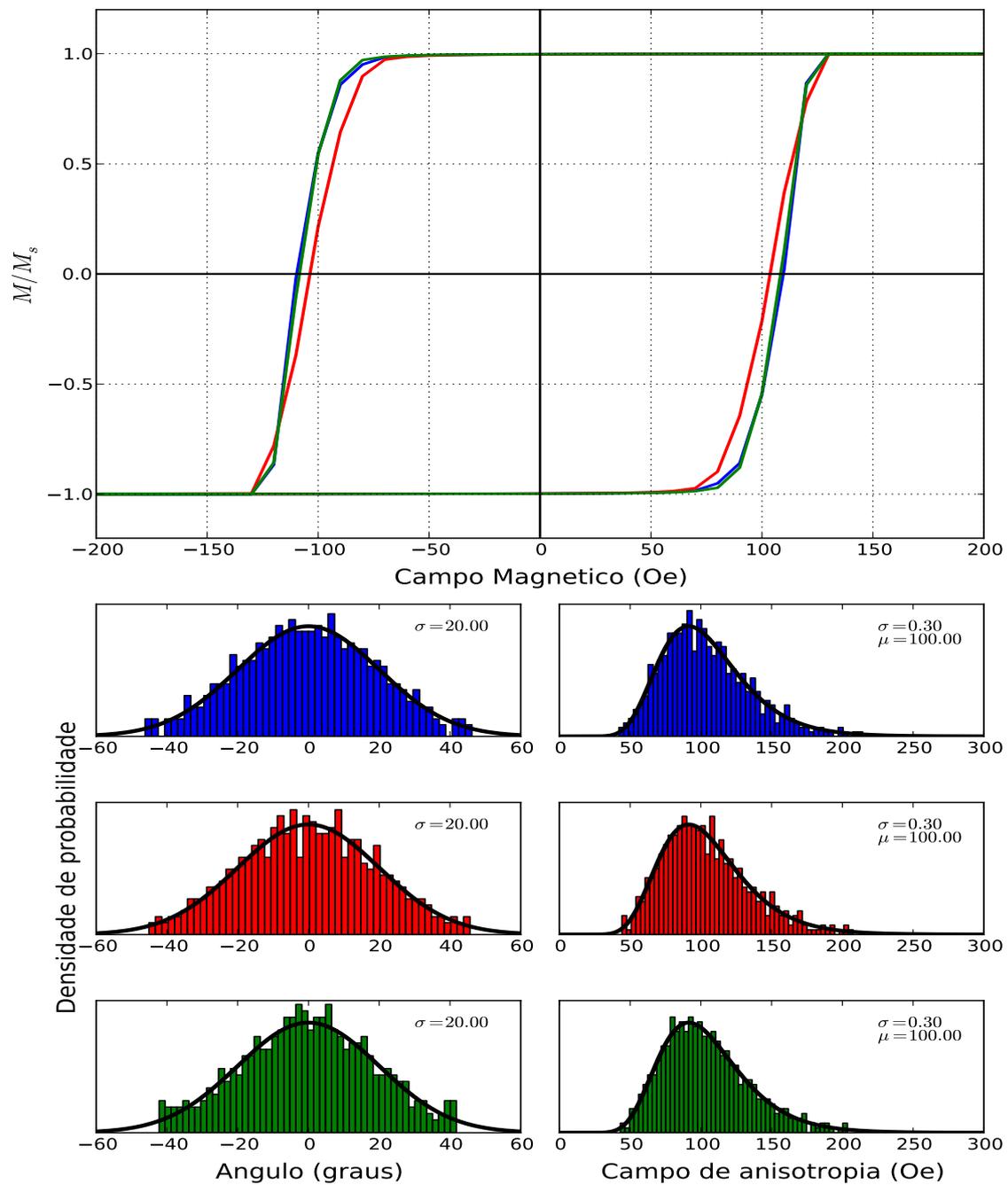


Figura 3.5: Curvas de histerese e distribuições angular e de campo de anisotropia corrigidas, para um sistema formado por 512 grãos.

Curvas de histerese e histogramas

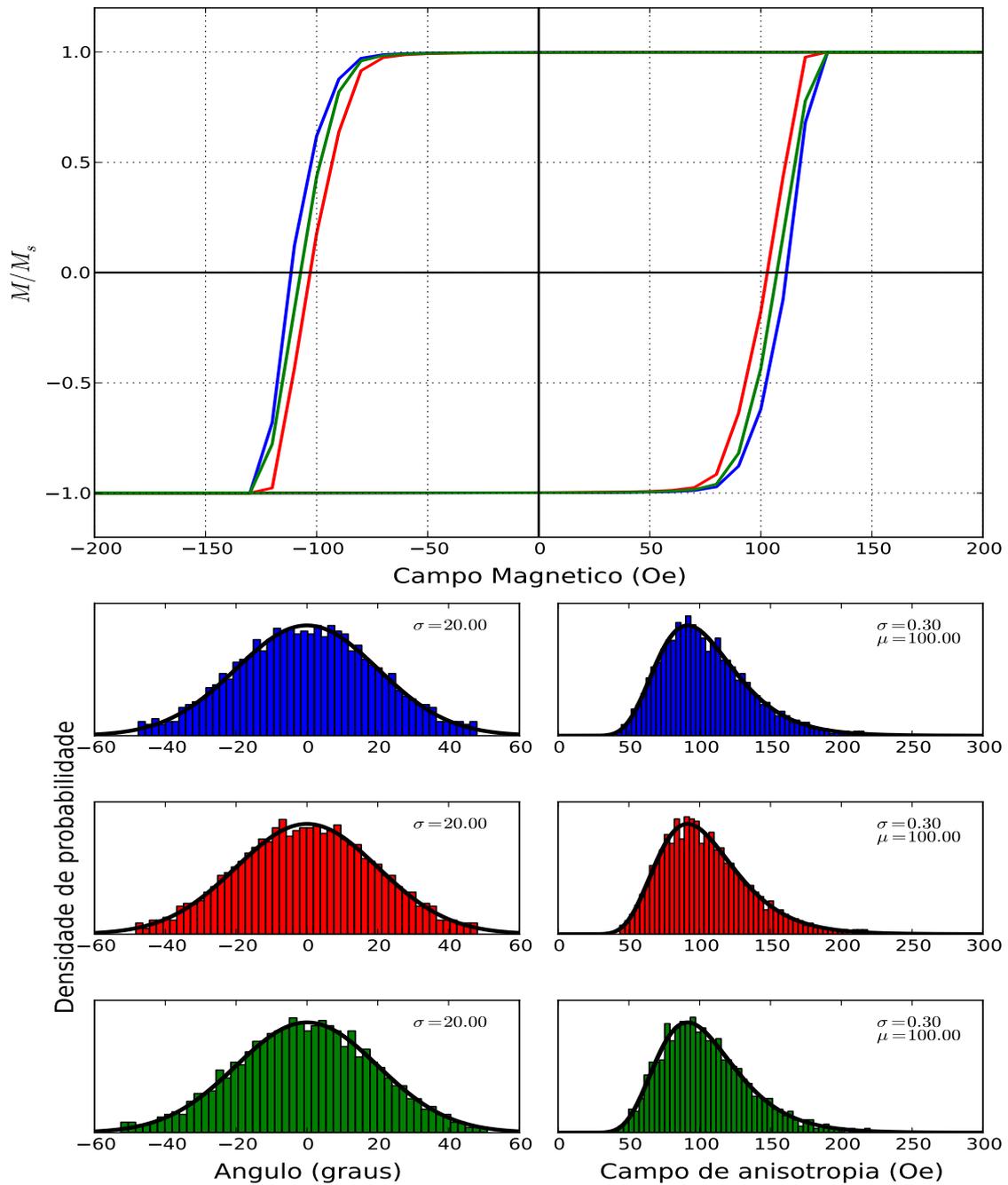


Figura 3.6: Curvas de histerese e distribuições angular e de campo de anisotropia forçadas, para um sistema formado por 1024 grãos.

3.4 **Análise de resultados**

Através das curvas de histerese, mostradas acima, é possível verificar a clara dependência da reprodutibilidade do sistema proposto, com o número de grãos. Esta dependência pode ser explicada pelo fato de determinarmos, através de distribuições de probabilidade, a anisotropia de um sistema formado por um número finito de regiões. A medida que o número de grãos aumenta, há a tendência de as constantes de anisotropia e as direções de eixo fáceis destes, seguirem o comportamento das distribuições log-normal e Gaussiana das variáveis aleatórias que os definem.

É possível verificar pelas figuras 3.4, 3.5 e 3.6 três figura acima que a correção das distribuições foi eficiente em sua proposta para o caso de 1024 grãos, mas para os casos de 256 e 512 grãos a distribuição não é respeitada. É notável, porém, que as distribuições do campo de anisotropia e angular seguem as distribuições log-normal e Gaussiana de maneira mais perceptível que o método sem correção. Entretanto, verifica-se que um novo fenômeno ocorre. As curvas de histerese, para um mesmo número de grãos, apresentam menor reprodutibilidade e verifica-se um alargamento do ciclo. É possível perceber que há um aumento na coercividade.

4 *Conclusão*

Este trabalho teve como objetivo, realizar uma revisão teórica a respeito da dinâmica micromagnética, descrever um modelo numérico para a representação de um filme fino policristalino, apresentar uma proposta de correção da distribuição da anisotropia do sistema, realizar uma breve formatação do código utilizado nas simulações e analisar os resultados das simulações.

Primeiramente, realizou-se uma revisão da teoria micromagnética. Nesta etapa, conseguimos constatar o problema da divergência da equação de LL e verificar a solução apresentado por Gilbert. Ainda neste capítulo, foi feita uma descrição dos campos que compõem a dinâmica micromagnética.

No segundo capítulo, descreveu-se um modelo numérico com o intuito de representar um filme fino policristalino, o qual se pretendia simular. Foi definido o conceito de grão e como este foi implementado no modelo, a partir do diagrama de Voronoi. O método de Euler, utilizado em nossas simulações, foi descrito e fez-se o uso de um fluxograma para descrever o algoritmo no qual o código responsável pelas simulações se baseia. Cada passo do algoritmo foi detalhadamente explicado. O primeiro passo do algoritmo definiu-se por ser a etapa de construção das características magnéticas do sistema. O segundo passo é a etapa onde realizam-se os cálculos de campo efetivo que age sobre todos os entes magnéticos. O terceiro passo consiste na evolução temporal da magnetização do sistema. O quarto passo trata da verificação do estado de equilíbrio dos momentos magnéticos. O quinto passo é responsável pela criação do ciclo de histerese do sistema.

No terceiro capítulo, realiza-se uma breve descrição da linguagem de programação C-CUDA, na qual o código foi escrito. O resultado de simulações são mostrados e constata-se a dependência da quantidade de grãos que compõem o sistema com a reprodutibilidade das curvas de histerese. Verificase que a tentativa de uma correção nas distribuições da constante de anisotropia e direção de eixos fáceis, deforma a curva de histerese.

Portanto, acreditamos que o presente trabalho atingiu os objetivos pelo qual foi proposto.

5 *Perspectivas*

O modelo de filme fino policristalino utilizado em nossas simulações, não levou em conta outros tipos de campos magnéticos que se têm conhecimento. O campo desmagnetizante, ou campo dipolar, não foi utilizado. Este fenômeno origina-se da própria distribuição da magnetização de um dado material. Portanto, a adição deste campo na equação de LLG acarretaria em uma descrição mais realística do problema.

Pretende-se fazer uma análise mais profunda a respeito da deformação da curva de histerese, quando força-se a distribuição de anisotropia do sistema por distribuições teóricas.

Bibliografia

- [1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, “On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies,” *Phys. Z. Sowjetunion*, vol. 8, p. 153, 1935.
- [2] S. CHIKAZUMI and S. H. CHARAP, *Physics of Magnetism*. Huntington: Robert E. Krieger Publishing Co., Inc., 1^a ed., 1978.
- [3] S. T. Thornton and J. B. Marion, *Classical dynamics of particles and systems*. Belmont: Brooks/Cole-Thomson Learning, 5^a ed., 2004.
- [4] A. Hubert and R. Schäfer, *Magnetic Domains: the Analysis of Magnetic Microstructures*. Springer, 3^a ed., 2009.
- [5] 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.
- [6] B. Krüger, *Current-Driven Magnetization Dynamics: Analytical Modeling and Numerical Simulation*. PhD thesis, Universität Hamburg, 2011.
- [7] W. F. Brown Jr., “Micromagnetics,” *Interscience*, 1963.