

ESTUDO DO EFEITO DIMENSIONAL E DO CAMPO MAGNÉTICO SOBRE NANOESFERAS FERROMAGNÉTICAS CORE E SHELL.

Maria Myllena Moraes Saraiva¹, Idalmir de Souza Queiroz Júnior², Maria das Graças Dias da Silva³

Resumo: Atualmente as nanopartículas ferromagnéticas são amplamente usadas nas mais diversas áreas; visando o estudo, compreensão e domínio acerca do comportamento dessas estruturas, neste estudo foram feitas simulações computacionais onde nanoesferas ferromagnéticas, do tipo core e shell com diferentes diâmetros, foram submetidas a influência de um campo magnético externo. O estudo destas partículas se dará por meio do conhecimento das interações magnéticas básicas, a energia de troca dos momentos magnéticos, a energia Zeeman, a energia de anisotropia cristalina e a energia dipolar. Com o estudo destas energias, será obtido o estado de equilíbrio dos momentos magnéticos e a fase magnética resultante.

Palavras-chave: spintrônica; nanomagnetismo; nanotecnologia; nanoesfera

1. INTRODUÇÃO

As nanopartículas ferromagnéticas têm estado cada vez mais presentes nas mais diversas áreas, estas que vão desde a saúde até as áreas tecnológicas, como às de telecomunicações e informática. Uma das pesquisas mais promissoras é a que diz respeito ao uso dessa tecnologia no ramo da saúde, onde se estuda a possibilidade de injetar no paciente nanopartículas ferromagnéticas recobertas por medicamentos e movê-la para o local onde a medicação é necessária com o auxílio de um campo magnético externo; a vetorização de fármacos visa tornar o tratamento mais efetivo e com uma menor quantidade de medicamentos.

Associando o conhecimento acerca das nanoestruturas ferromagnéticas à spintrônica, que é a tecnologia de controle e manipulação dos spins nos sistemas magnéticos de elétrons, é possível que haja obtenção de resultados promissores que possam contribuir para o avanço tecnológico em diferentes áreas do conhecimento.

Levando em conta a grande gama de aplicações para esse tipo de tecnologia, é necessário ter um conhecimento e compreensão acerca de sistemas deste tipo a fim de se ter um maior domínio sobre eles, o que motiva o estudo sobre o comportamento dessas partículas ao serem submetidas a variações no seu tamanho e no campo magnético.

O projeto aborda o estudo das nanoesferas ferromagnéticas dos tipos core e shell sob o efeito de um campo magnético externo. Neste trabalho foi calculado o campo local, através da energia magnética, e com isso foi realizada a minimização do torque magnético para se obter os estados estáveis ou metaestáveis.

2. DESENVOLVIMENTO

A fim de compreender o comportamento de nanoestruturas ferromagnéticas esféricas submetidas a um campo magnético externo, será observada a energia de troca dos momentos magnéticos, a energia Zeeman, a energia de anisotropia cristalina e a energia dipolar que interagem entre si, apresentando uma diversidade de fases magnéticas. O estudo destas energias fornecerá o estado de equilíbrio dos momentos magnéticos e a fase magnética resultante. Para este estudo, será importante fazer o levantamento do diagrama de fases da nanopartícula esférica ferromagnética, o que possibilitará a sua aplicação nas mais diversas atividades. Com isso será possível realizar estudos de remanência e de histerese magnéticas, além do levantamento das fases magnéticas que irão auxiliar na compreensão do comportamento da magnetização e histerese magnética destas nanoestruturas.

Devido à grande quantidade de átomos existentes dentro de um volume da ordem de 1000 nm^3 ($10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm}$) da região em estudo, faz-se uso de um pequeno volume, chamado de célula de simulação que concentra uma quantidade considerável de átomos que possuem um comportamento semelhante, devido à interação de “exchange” dos momentos magnéticos. Para este estudo foi considerada uma célula de simulação de tamanho $d = 2,7 \text{ nm}$, envolvendo cerca de 1600 átomos. Esta dimensão escolhida tende a não contemplar mudanças significativas em seus momentos magnéticos. Existe um tamanho máximo para a célula de simulação, que é o comprimento de “exchange”, no qual os momentos magnéticos deixam de interagir. No caso do ferro é cerca de 11 nm. Para este estudo usou-se a técnica numérica auto consistente, no qual é buscado iterativamente o estado de equilíbrio na equação de Landau–Lifshitz–Gilbert, que representa o torque entre a magnetização média em cada célula de simulação e o campo magnético médio na célula de simulação. Para calcular o torque magnético, usamos a Equação 1

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} \quad (1)$$

onde $\vec{\mu}$ representa o momento de dipolo magnético e o $\vec{B}$ representa o campo magnético externo. O estado de equilíbrio é buscado para analisar o que ocorre em um material magnético submetido a um campo magnético externo.

Neste trabalho foi estudada uma estrutura ferromagnética esférica sob o efeito de campo magnético externo na direção x e sua interação com os campos internos, formando diversas fases magnéticas que surgem destas interações. A simulação foi realizada através de um método iterativo auto consistente, onde se inicializa o sistema magnético com uma configuração magnética inicial, sobre cada célula se calcula o campo médio local, minimizando o torque entre as direções dos spins e o campo médio, a cada iteração. Foi utilizada a Equação 2 de interações magnéticas

$$E = -J_e \sum_i \sum_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{H} \cdot (M_s V \sum_i \vec{S}_i) - \frac{KV}{2} \sum_i (S_i^2)^2 + \frac{M_s^2 V}{2} \sum_i \sum_k k \left(\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_k}{r_{ik}^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ik})(\vec{S}_k \cdot \vec{r}_{ik})}{r_{ik}^5} \right) \quad (2)$$

o primeiro termo representa a energia de “exchange”, o segundo a energia Zeeman, o terceiro a anisotropia e o último é o efeito dipolar. Onde J_e representa o termo de “exchange” ou interação de troca dos momentos magnéticos, S_i representa os momentos magnéticos, H representa o campo magnético externo, K representa o termo de interação da anisotropia magnética, V representa o volume atômico, M_s representa a magnetização de saturação do material e r_{ik} representa a distância entre os momentos magnéticos.

2.1. Resultados e Discussões

Foram analisadas a influência do campo magnético externo em nanoesferas do tipo core-shell, como ilustrada na Figura 1, onde duas camadas de material ferromagnético foram separadas por uma camada de material não-ferromagnético. A simulação separou as esferas core e shell em duas estruturas diferentes, considerando as dimensões das esferas core e shell como sendo uma porcentagem do diâmetro total definido. O material ferromagnético usado foi o ferro e as nanoesferas core e shell foram estudadas sob diferentes perspectivas, incluindo a perspectiva tridimensional, onde foi possível observar a influência do campo magnético em toda a estrutura da esfera e não em apenas um plano.

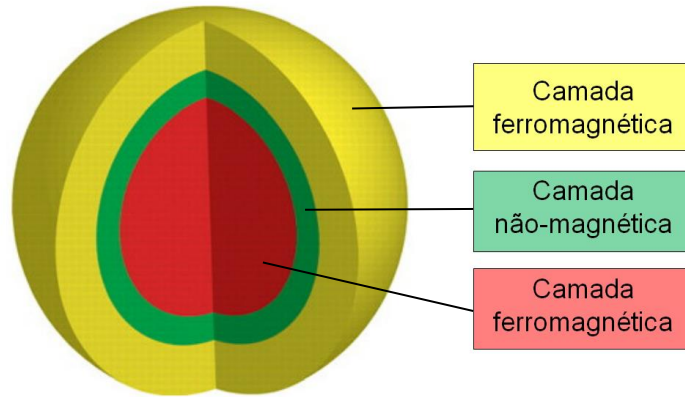


Figura 1. Modelo de estrutura usada durante o estudo (Autoria própria)

Tabela 1. Parâmetros magnéticos do ferro

M_s (A/m)	$1,6 \times 10^6$
A (J/m)	$1,3 \times 10^{-11}$
$H_{TROCA}(T) = A/M_s d^2$	$16,25 \times d^2$
K (J/m ³)	0
$H_{ANIS} = 2K/M_s (10^4 G)$	0
$L_{TROCA} = \pi \sqrt{\frac{2A}{\mu_0 M_s^2}}$	11,86 nm

Fonte: Rebouças (2010)

O ciclo de histerese, Figura 2, é uma importante ferramenta para o estudo, é construído medindo-se a

magnetização de um material magnético a cada variação do campo magnético externo. No ciclo de histerese é apresentada a magnetização de saturação M_s , que é a magnetização máxima que o material apresenta quando submetido a um grande campo magnético externo, a magnetização remanente, M_r , que é a magnetização que o material magnético apresenta ao ser desligado do campo magnético externo, o campo coercivo, H_c , que é o campo necessário para desmagnetizar um material magnetizado com a magnetização remanente.

A construção do ciclo inicia com o material desmagnetizado, e aumenta-se lentamente o campo magnético externo, na medida em que se verifica a magnetização do material. Com isso, a magnetização aumenta até atingir seu máximo de magnetização, M_s , saturando o material magnético. Depois se reduz o campo magnético externo lentamente, até o zero. Com isso a magnetização vai diminuindo lentamente e se mantém na magnetização remanente, M_r . Inverte-se o sentido do campo magnético e aumenta-se sua intensidade até que a magnetização do material se anule, este campo é o campo coercivo, H_c . Continua-se a aumentar o campo magnético externo até saturar o material magnético, obtendo-se a magnetização de saturação novamente, reduz-se a intensidade do campo magnético até zero, inverte-se o sentido do campo magnético novamente e aumenta-se a intensidade até a saturação do material, passando pelo campo de desmagnetização do material e fechando o ciclo.

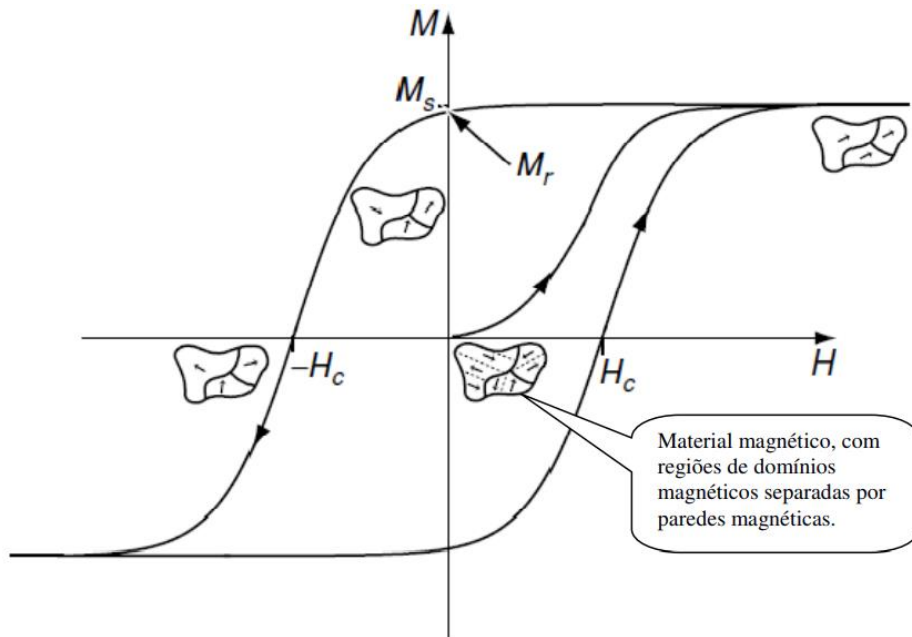


Figura 2. Ciclo de histerese de um material ferromagnético [5]

Na Figura 3, se percebe que os momentos magnéticos, representados por setas se alinham na saturação, se alinham parcialmente na remanência e se desalinham completamente na desmagnetização. As linhas separadoras dos momentos magnéticos são as paredes magnéticas, delimitando as regiões de domínio magnético. Os momentos magnéticos apresentados no ciclo de histerese representam os momentos magnéticos das células de simulação.

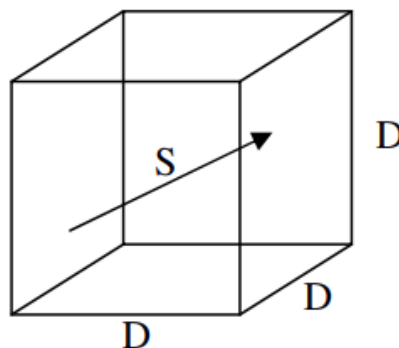


Figura 3. Célula de simulação cúbica de lado D e momento magnético da célula de simulação, S . (Autoria própria)

Este trabalho se concentrou em mostrar o comportamento dos momentos magnéticos na estrutura tipo core e Shell não interagente devido ao separador não-magnético. Nos resultados apresentados a seguir, o diâmetro total

da esfera core-shell foi definido como 81 nm e tendo esse diâmetro como base, foram analisadas esferas core (núcleo) e shell (casca) com vários diâmetros diferentes.

Para se obter o estado magnético de interesse, se faz um estudo de remanência, onde se aplica um campo magnético de intensidade suficiente para magnetizar toda a estrutura, e depois se retira o campo magnético com o interesse de verificar o estado magnético resultante. Pode-se também obter o ciclo de histerese magnética da estrutura, conforme apresentado na Figura 2, mas neste caso simulou-se até o estado de remanência. Com isso se pode obter as diversas fases de magnetização do material. Entre estas fases podem surgir fases tipo vórtice, onion, domínio, etc.

2.2. Fases obtidas para a estrutura core-shell

2.2.1. Core

DOMÍNIO

Na Figura 4, tem-se a representação bidimensional e tridimensional dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo core com diâmetro de 8,1 nm, onde satura-se o sistema com campo de 10 KOe e depois retira-se, na remanência se tem a magnetização negativa da ordem $S_x(M/M_s) \sim -4.710^{-4}$. Na Figura 4.a, a curva da magnetização com o campo externo aplicado. Na Figura 4.b, é mostrado o perfil dos spins em 3D para o núcleo, onde o gradiente de cores corresponde a componente da magnetização em relação ao plano xy, onde e_{nm} é o diâmetro do anel não-magnético. Na Figura 4.c, tem-se a projeção dos spins no plano xy. A configuração apresenta-se domínio.

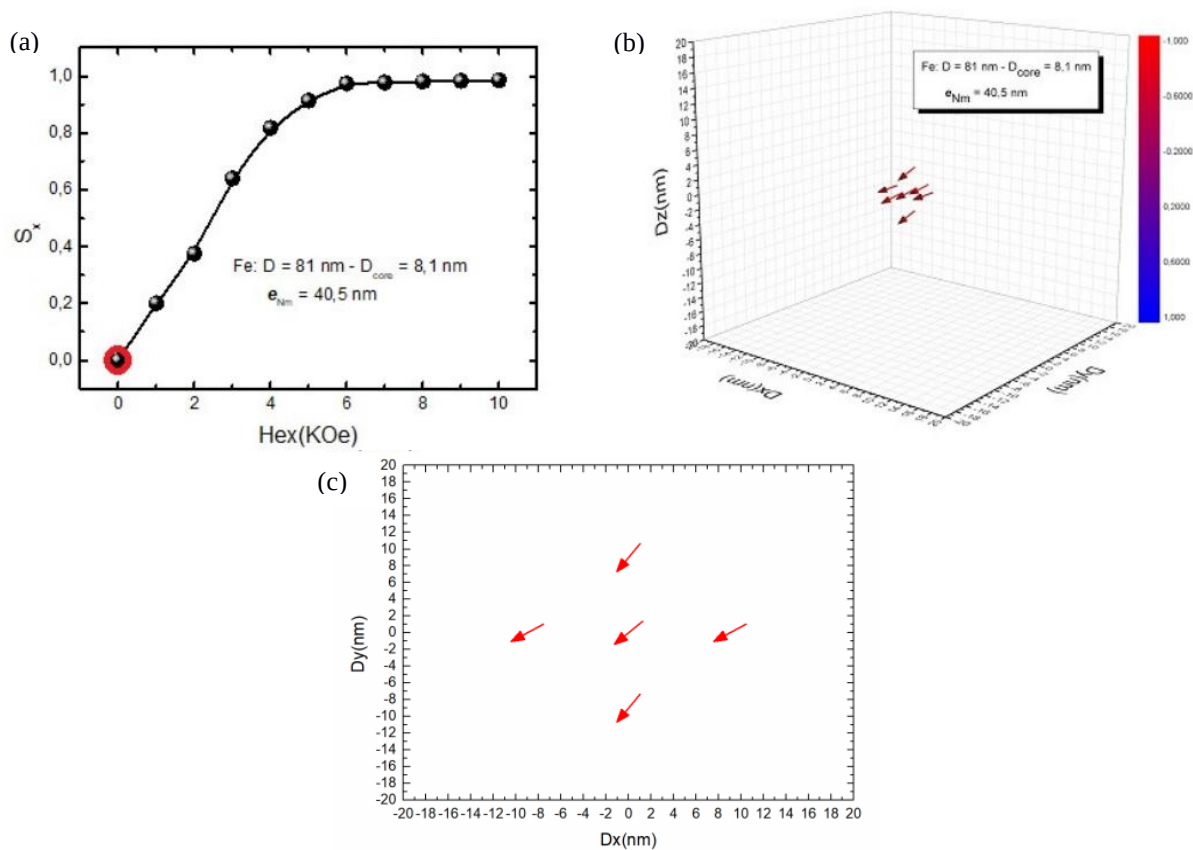


Figura 4. Representações da curva de magnetização, e das perspectivas bidimensionais e tridimensionais dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo core com diâmetro de 8,1 nm sob a influência de um campo magnético externo aplicado no eixo x. (Autoria própria)

VÓRTICE

Na Figura 5, são ilustradas as perspectivas bidimensional e tridimensional dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo core com diâmetro de 32,4 nm, onde satura-se o sistema com campo de 10 KOe e depois retira. Na Figura 5.a, tem-se a curva da magnetização com o campo externo aplicado. Já na Figura 5.b, tem-se o perfil dos spins em 3D do núcleo, onde o gradiente de cores corresponde a componente da magnetização em relação ao plano xy e e_{NM} é o diâmetro do anel não-magnético. Na Figura 5.c, é mostrada a projeção dos spins no plano xy.

A configuração apresenta-se numa configuração uniforme na direção de x, só que na perspectiva tridimensional a magnetização em circulação (vórtice) no plano yz.

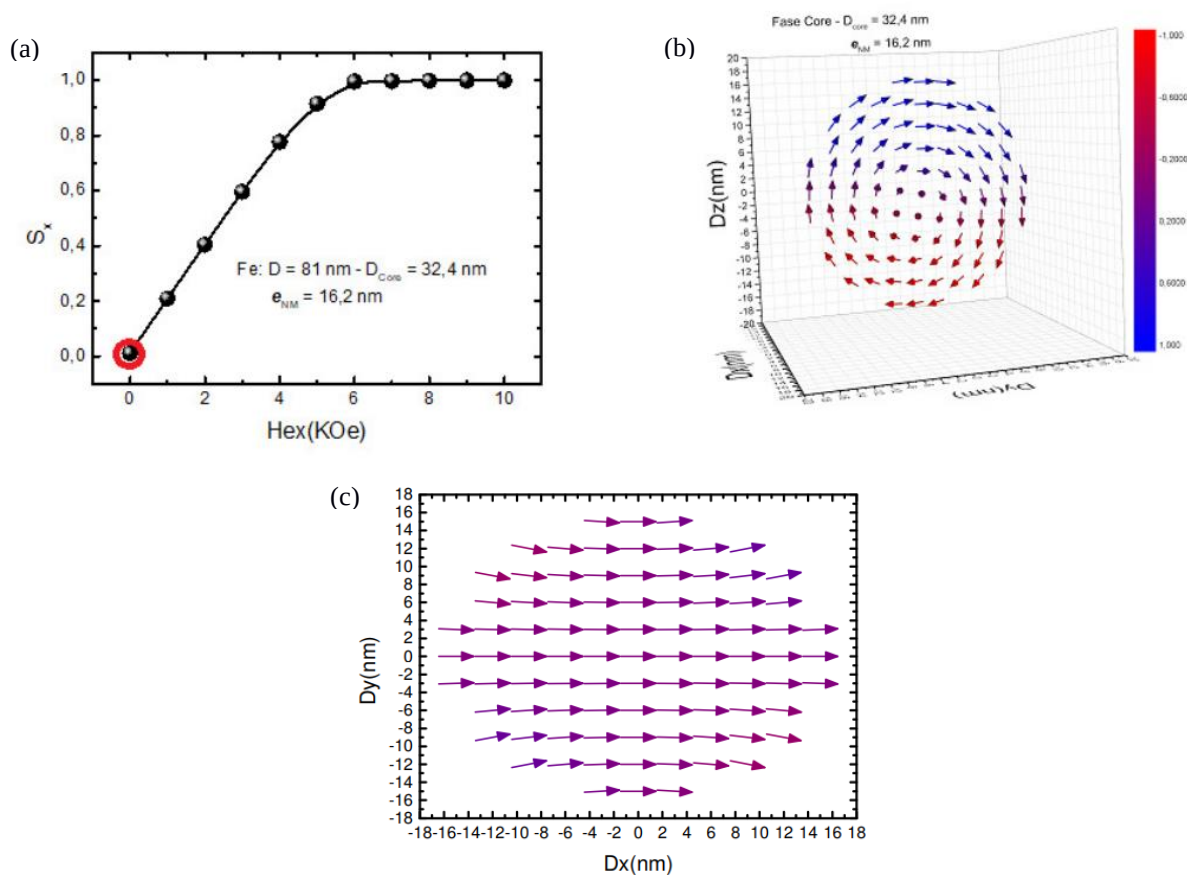
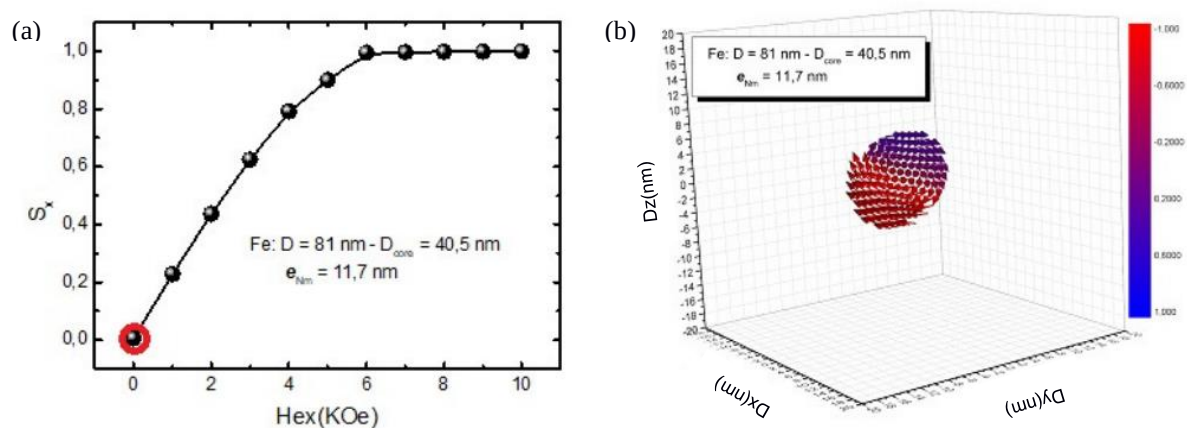


Figura 5. Representações da curva de magnetização, e das perspectivas bidimensionais e tridimensionais dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo core com diâmetro de 32,4 nm sob a influência de um campo magnético externo aplicado no eixo x. (Autoria própria)

VÓRTICE DESLOCADO

Na Figura 6, tem-se a representação bidimensional e tridimensional dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo core com diâmetro de 40,5 nm, onde satura-se o sistema com campo de 10 KOe e depois retira. Na Figura 6.a, é representada a curva da magnetização com o campo externo aplicado. Na Figura 6.b tem-se o perfil dos spins em 3D do núcleo, onde o gradiente de cores corresponde a componente da magnetização em relação ao plano xy. Já na Figura 6.c, é mostrada a projeção dos spins no plano xy e e_{NM} é o diâmetro do anel não-magnético. A configuração apresenta-se numa configuração uniforme na direção de x, só que na perspectiva tridimensional a magnetização em circulação (vórtice) deslocado em relação ao centro da nanopartícula.



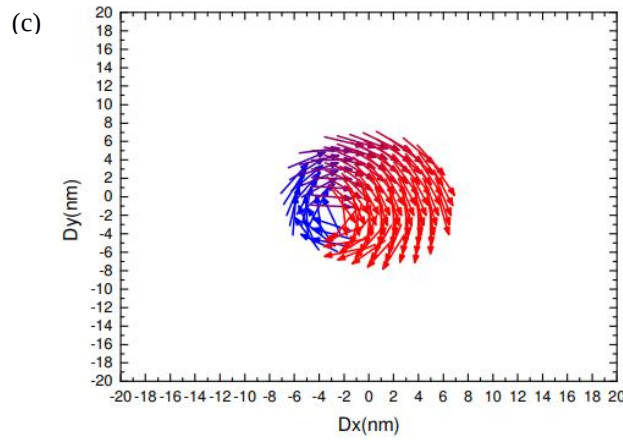


Figura 6. Representações da curva de magnetização, e das perspectivas bidimensionais e tridimensionais dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo core com diâmetro de 40,5 nm sob a influência de um campo magnético externo aplicado no eixo x. (Autoria própria)

VÓRTICE COM DIÂMETRO AUMENTADO

Na Figura 7, tem-se a representação bidimensional e tridimensional dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo core com diâmetro de 48,6 nm, onde satura-se o sistema com campo de 10 KOe e depois retira. Na Figura 7.a é mostrada a curva da magnetização com o campo externo aplicado. Na Figura 7.b, tem-se o perfil dos spins em 3D do núcleo, onde o gradiente de cores corresponde a componente da magnetização em relação ao plano xy. Já na Figura 7.c, mostra-se a projeção dos spins no plano xy e e_{NM} é o diâmetro do anel não-magnético. A configuração apresenta-se numa configuração uniforme na direção de x, só que na perspectiva tridimensional a magnetização em circulação (vórtice) com diâmetro aumentado.

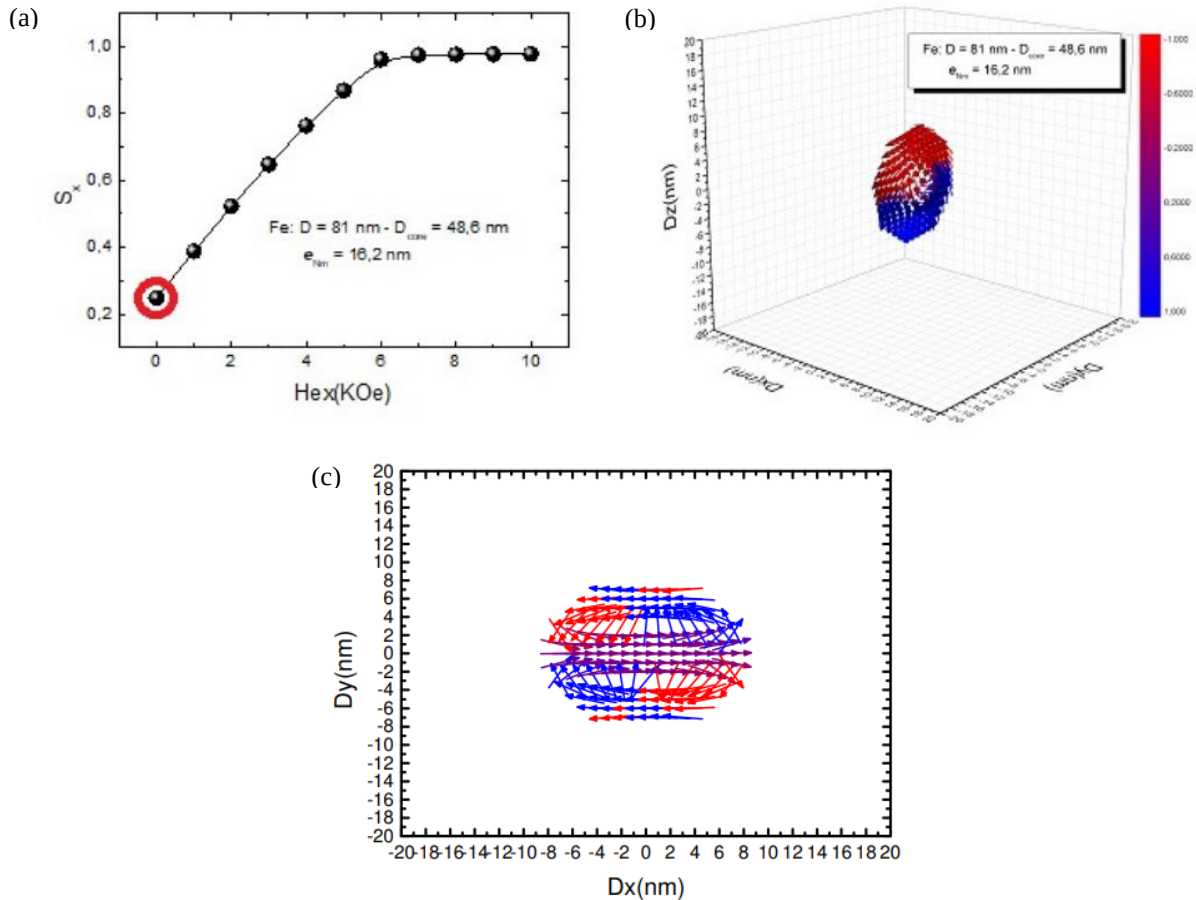


Figura 7. Representações da curva de magnetização, e das perspectivas bidimensionais e tridimensionais dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo core com diâmetro de 48,6 nm sob a influência de um campo magnético externo aplicado no eixo x. (Autoria própria)

VÓRTICE NUCLEADO NO PLANO XZ

Na Figura 8, são ilustradas as perspectivas bidimensional e tridimensional dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo core com diâmetro de 64,8 nm, onde satura-se o sistema com campo de 10 KOe e depois retira. Na Figura 8.a é representada a curva da magnetização com o campo externo aplicado. Na Figura 8.b, tem-se o perfil dos spins em 3D do núcleo, onde o gradiente de cores corresponde a componente da magnetização em relação ao plano xy. Na Figura 8.c é mostrada a projeção dos spins no plano xy e e_{NM} é o diâmetro do anel não-magnético. A configuração apresenta-se numa configuração uniforme na direção de x, só que na perspectiva tridimensional a magnetização em circulação (vórtice) projetado no plano xz. Ao analisar as perspectivas tridimensionais e bidimensionais, é possível concluir fase encontrada aqui não é uma fase verdadeira, mas sim uma fase de transição.

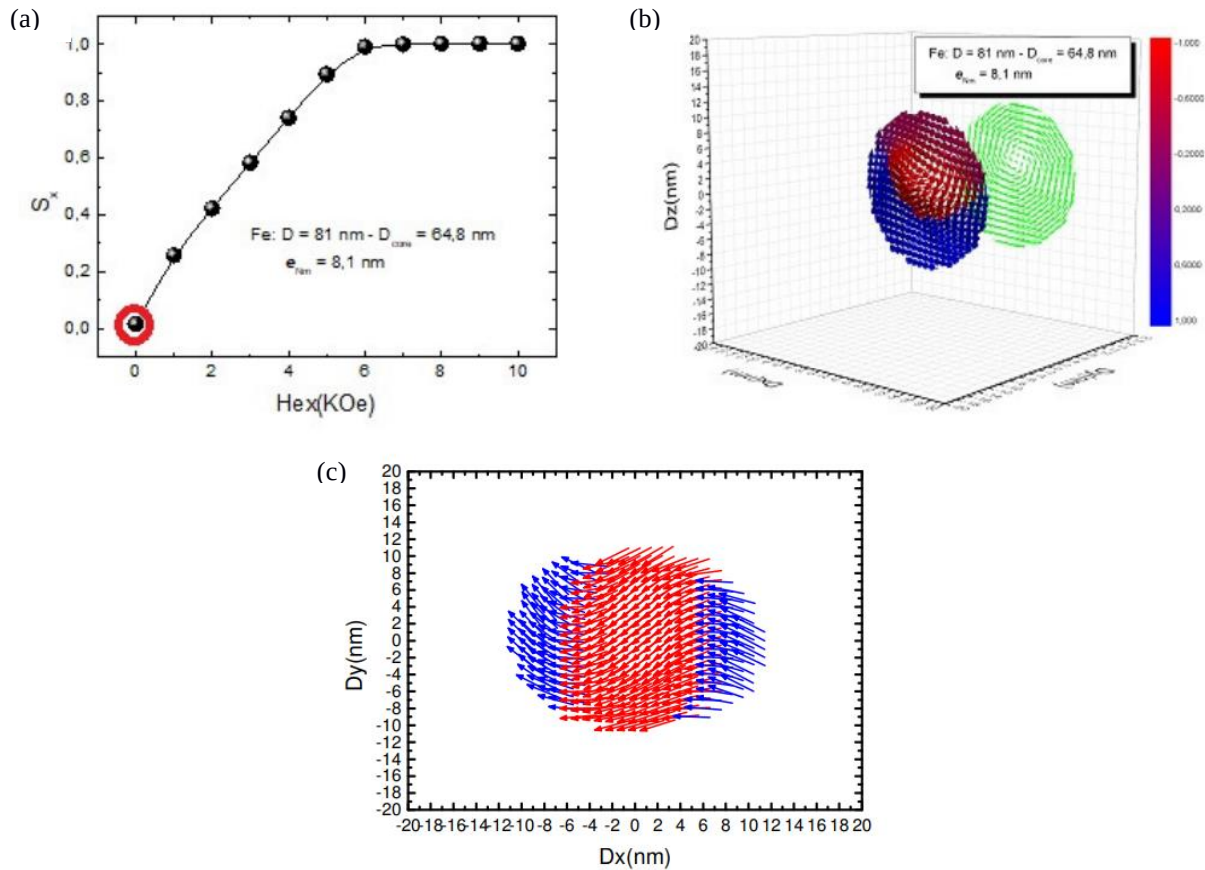
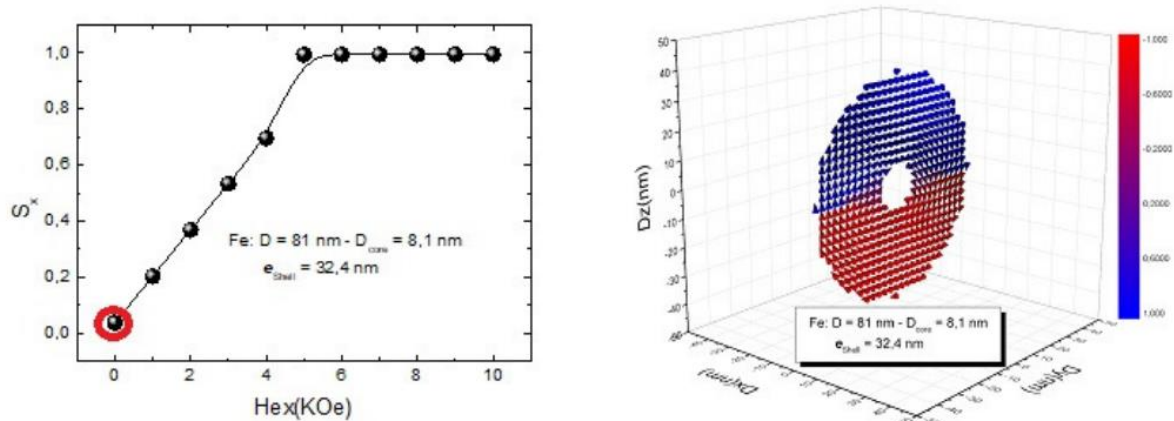


Figura 8. Representações da curva de magnetização, e das perspectivas bidimensionais e tridimensionais dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo core com diâmetro de 64,8 nm sob a influência de um campo magnético externo aplicado no eixo x. (Autoria própria)

2.2.1. Shell

VÓRTICE NUCLEADO NO PLANO YZ



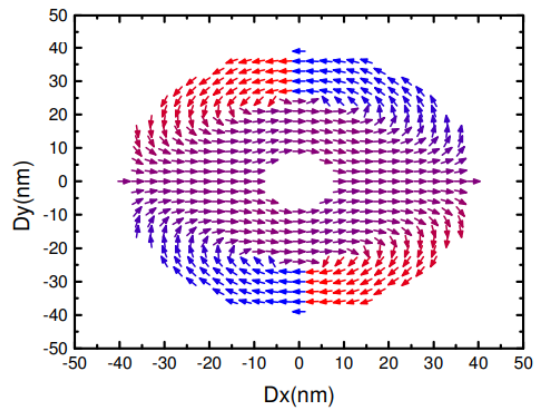


Figura 9. Representação bidimensional e tridimensional dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo shell com espessura de 32,4 nm sob a influência de um campo magnético externo aplicado no eixo x. Na estrutura shell, o núcleo interno não está incluso. (Autoria própria)

VÓRTICE NUCLEADO NO PLANO XZ

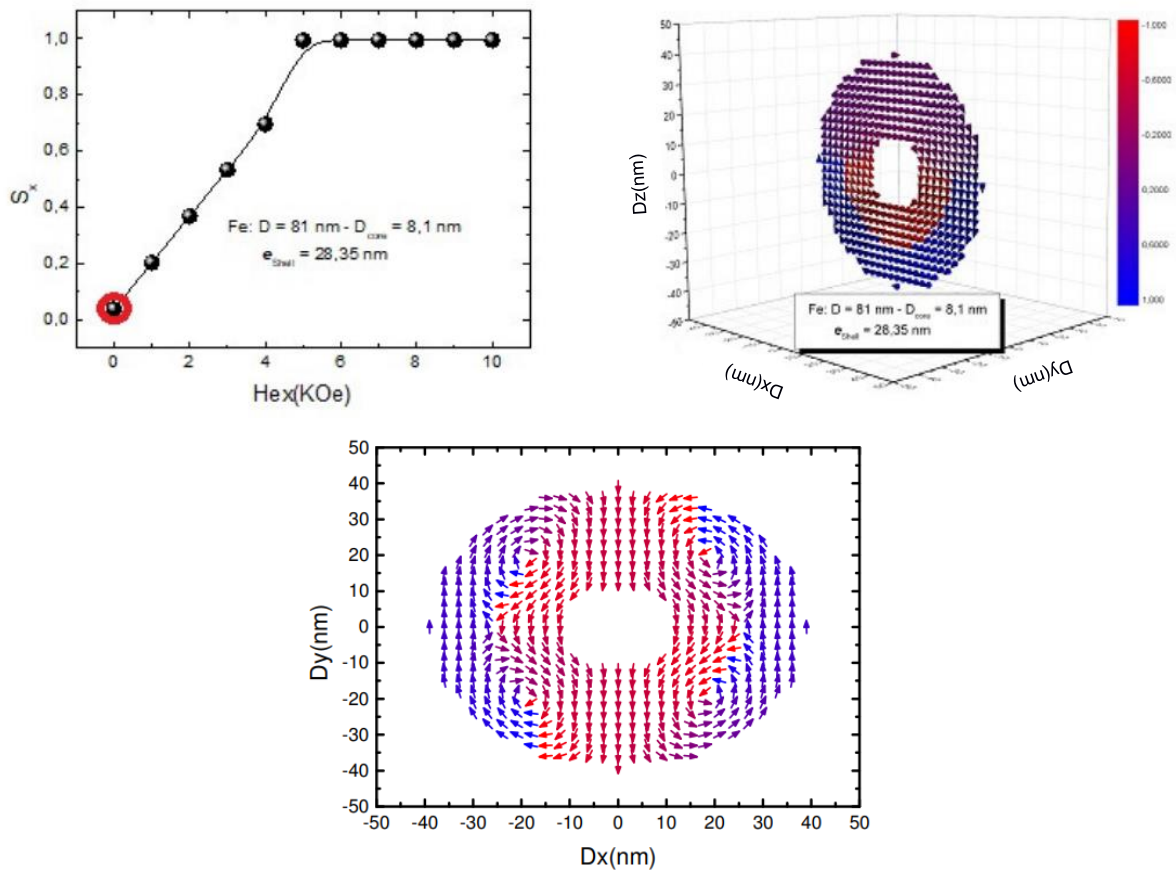


Figura 10. Representação bidimensional e tridimensional dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo shell com espessura de 28,35nm sob a influência de um campo magnético externo aplicado no eixo x. Na estrutura shell, o núcleo interno não está incluso. (Autoria própria)

VÓRTICE NUCLEADO NO PLANO XZ

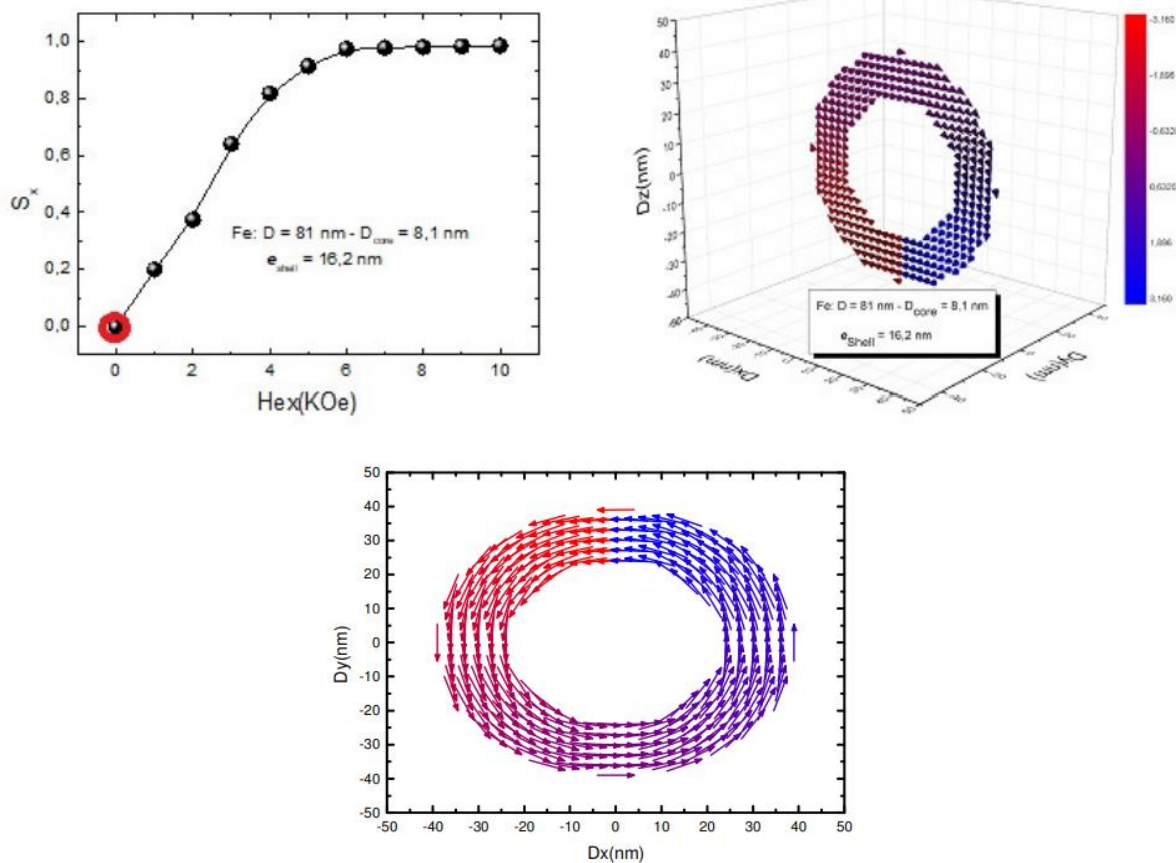
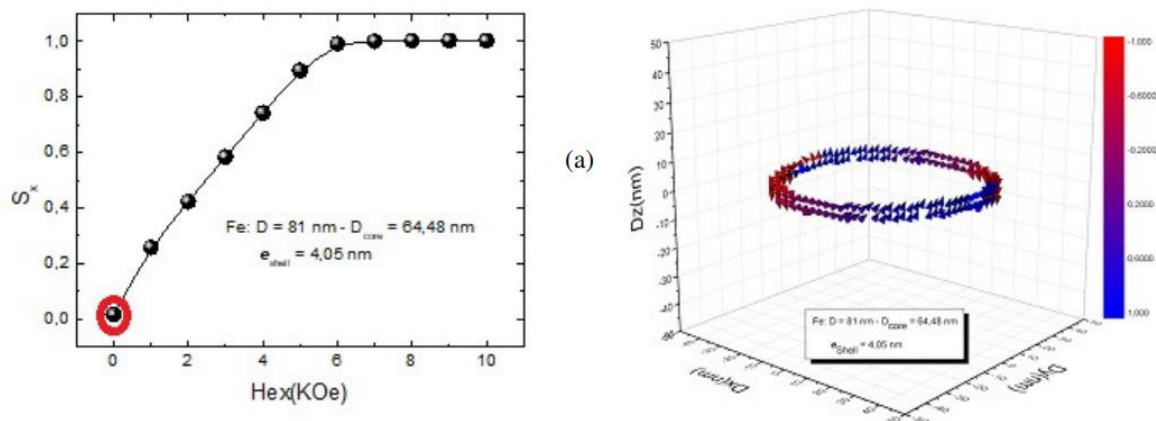


Figura 11. Representação bidimensional e tridimensional dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo shell com espessura de 16,2 nm sob a influência de um campo magnético externo aplicado no eixo x. Na estrutura shell, o núcleo interno não está incluso. (Autoria própria)

ONION (CEBOLA)



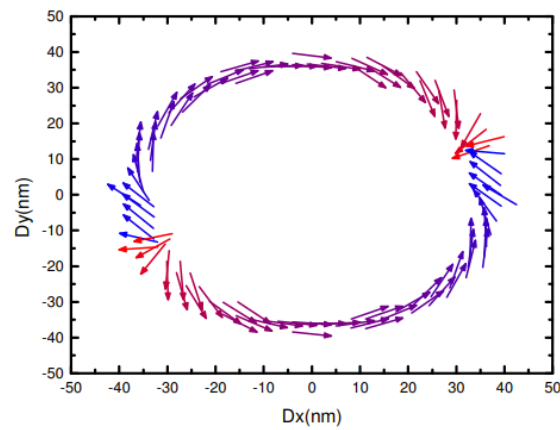
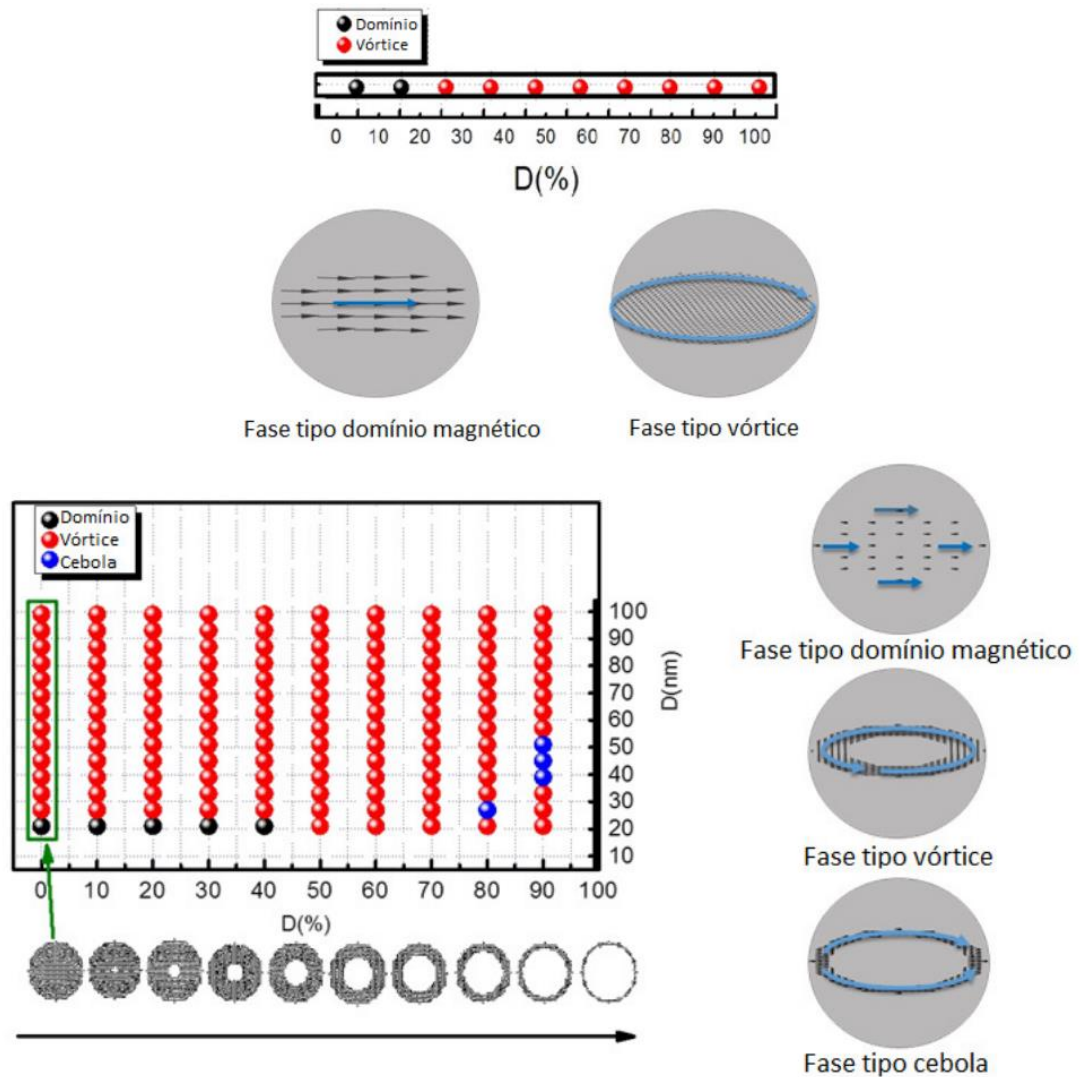


Figura 12. Representação bidimensional e tridimensional dos momentos magnéticos de uma nanoesfera do tipo shell com espessura de 4,05 nm sob a influência de um campo magnético externo aplicado no eixo x. Na estrutura shell, o núcleo interno não está incluso. (Autoria própria)

Depois de analisar e agrupar todos os resultados obtidos durante as simulações com uma nanoesfera ferromagnética core-shell com um diâmetro total de 81 nm, foi possível montar os diagramas de fases apresentados na Figura 13. A partir desses diagramas, pode-se observar de forma resumida todas as fases que foram encontradas ao longo da pesquisa e em quais momentos elas foram observadas.



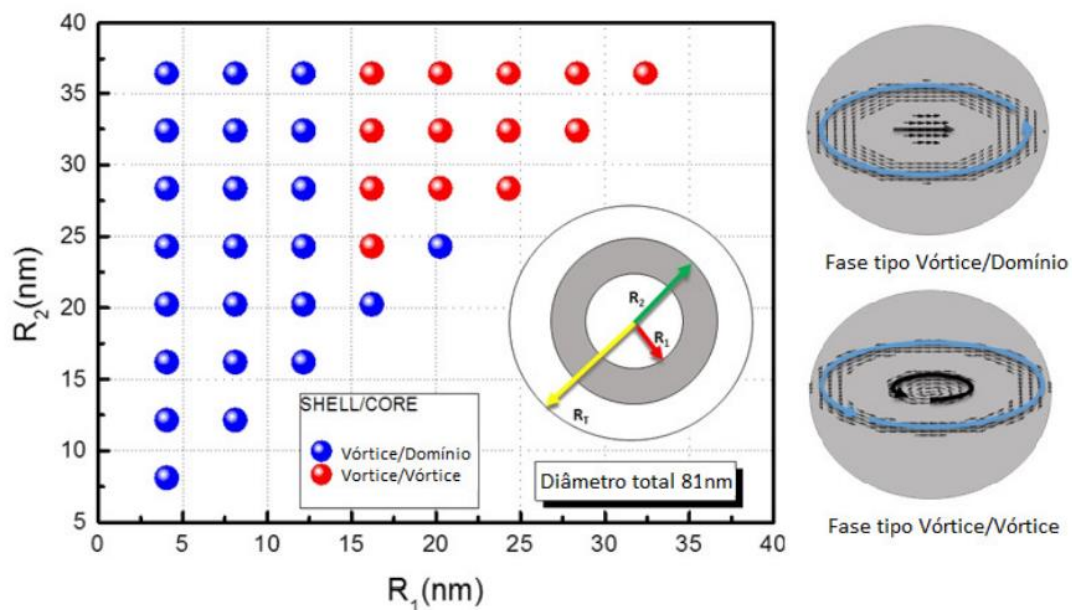


Figura 13. Resumo das fases obtidas na estrutura core-shell com diâmetro total de 81 nm. (Autoria própria)

3. CONCLUSÕES

Ao analisar os resultados obtidos com as estruturas core e shell na perspectiva tridimensional, foi constatado que eles difeririam bastante dos encontrados nos resultados das mesmas estruturas na perspectiva bidimensional, o que confirma a relevância do aprofundamento no estudo do comportamento das nanoesferas ferromagnéticas a fim de, posteriormente, buscar maneiras de aplicar diretamente os conhecimentos adquiridos durante este estudo na nanotecnologia. Portanto, os resultados obtidos ao longo da pesquisa têm se mostrado promissores, mas ainda não são conclusivos.

4. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] CULLITY, B. D. Introduction to magnetic materials. Addison Wesley Publishing Company, 1972.
- [2] GUIMARÃES, A. P. Principles of Nanomagnetismo. First edition. New York: Cambridge University Press, 2009.
- [3] FILHO, F. C. M. et al. Impact of core-shell dipolar interaction on magnetic phases of spherical core shell nanoparticles. Physical Review B, v. 92, n. 6, p. 064422, 2015.
- [4] REBOUÇAS, G.O.G. Nucleação de vortices e paredes de domínio em nanoestruturas magnéticas. Tese de doutorado. UFRN. 2010.
- [5] COEY, J.M.D. Magnetism and Magnetic Materials. Cambridge. 2009.



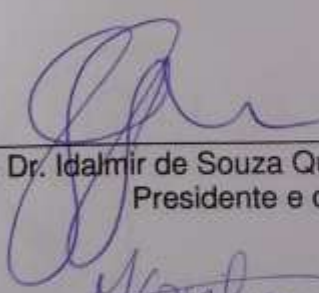
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
Universidade Federal Rural do Semi-Árido – UFERSA
Centro de Ciências Exatas e Naturais – CCEN

ATA DE DEFESA DE TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

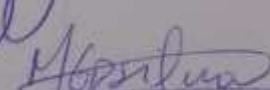
Às 9:30 horas do dia vinte e dois de março de dois mil e dezenove, auditório do CITED-UFERSA – Universidade Federal Rural do Semi-Árido, reuniu-se a Banca Examinadora de defesa de trabalho de conclusão de curso de autoria da aluna **MARIA MYLLENA MORAIS SARAIVA**, aluna do curso de Bacharelado em Ciência e Tecnologia desta universidade, N° de matrícula **2015002838**, com o título **"ESTUDO DO EFEITO DIMENSIONAL E DO CAMPO MAGNÉTICO SOBRE NANOESFERAS FERROMAGNÉTICAS CORE-SHELL"**. A Banca Examinadora ficou assim constituída por três membros: Prof. Dr. Idalmir de Souza Queiroz Júnior, presidente da banca e orientador do Trabalho de Conclusão de Curso; Profa. Dra. Maria das Graças Dias da Silva, co-orientadora do trabalho e Prof. Dr. José Lucas da Silva Paiva, como membro. Concluída a defesa, procedeu-se o julgamento pelos membros da banca examinadora, tendo a aluna obtido as seguintes notas: 10,0; 9,0; 9,5. Apuradas as notas verificou-se que a aluna foi aprovada com média geral 9,5. E para constar, eu, Idalmir de Souza Queiroz Júnior, lavrei a presente ata que, após lida e aprovada pelos membros da banca examinadora, será assinada por todos.

Mossoró, 22 de março de 2019.

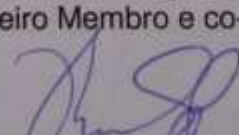
Assinatura dos membros da Banca Examinadora.



Prof. Dr. Idalmir de Souza Queiroz Júnior – UFERSA
Presidente e orientador



Profa. Dra. Maria das Graças Dias da Silva – UERN
Primeiro Membro e co-orientadora



Prof. Dr. José Lucas da Silva Paiva - UFERSA
Segundo Membro