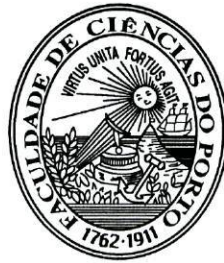


Faculdade de Ciências da Universidade do Porto



*Estados magnéticos de sistemas com interacção  
dipolar baseados em redes planares*

Miguel Dias Costa

Março de 2001

Faculdade de Ciências da Universidade do Porto



*Estados magnéticos de sistemas com interacção  
dipolar baseados em redes planares*

Miguel Dias Costa

Licenciado em Física - Ramo Científico

pela

Faculdade de Ciências da Universidade do Porto

Tese submetida para satisfação parcial dos requisitos do programa do  
Mestrado Inter-Universitário em Física da Matéria Condensada.

Março de 2001

### *Agradecimentos*

Ao meu orientador, Professor Doutor **Yuri Pogorelov**, expresso o meu agradecimento pela constante disponibilidade e paciência demonstradas ao longo da orientação deste mestrado.

Ao Professor Doutor **João Lopes dos Santos** e ao Mestre **João Viana Parente Lopes**, pelo acompanhamento e por todas as horas extraordinárias.

Ao Centro de Física do Porto, pela concessão da bolsa que tornou possível a realização deste trabalho.

### **Resumo**

Esta tese é dedicada ao estudo de redes ordenadas, bidimensionais, de pequenas partículas magnéticas, tratadas quer na aproximação pontual quer como partículas de tamanho finito, nomeadamente dipolos unidimensionais ou discos bidimensionais. São analisadas as condições para levantamento da degenerescência do estado fundamental de Luttinger e Tisza na rede planar de dipolos pontuais, bem como para o aumento da susceptibilidade magnética e aparecimento de ordem de longo alcance, particularmente considerando uma rede assimétrica (rectangular). São usados métodos analíticos para estudar este sistema e variações dele a temperatura nula e, através da construção do espectro de excitações elementares, a temperaturas baixas. O uso de métodos de Monte Carlo multicanónicos permite estender este estudo a qualquer temperatura, sendo apresentadas estimativas de susceptibilidade e calor específico para o caso da rede quadrada de dipolos pontuais, obtidas através de um novo método de avaliação da densidade de estados. Os resultados obtidos com este método, que permitiu chegar a estados de baixa energia muito próximos do estado fundamental previsto por Belobrov *et al.*, revelaram propriedades termodinâmicas até agora desconhecidas e ainda não completamente compreendidas.

### ***Abstract***

This thesis is dedicated to the study of ordered bidimensional lattices of magnetic fine particles, treated either as point dipoles or as finite-size particles, that is, as unidimensional dipoles or bidimensional disks. We have analyzed the conditions for breaking the degeneracy of Luttinger and Tisza's ground state, for a planar lattice of point dipoles, as well as for increase of the magnetic susceptibility and the onset of long range order, especially considering an assymmetric (rectangular) lattice. Analitical methods are used to study this system and its variations at vanishing temperature and, through the analisys of the elementary excitations spectrum, low temperatures. The use of multicanonical Monte Carlo methods allows us to extend this study to arbitrary temperature and we present estimates of susceptibility and specific heat for the square lattice of point dipoles, obtained through the use of a new method of estimating the density of states. The results obtained with this new method, that reached low energy states very close to the ground state introduced by Belobrov *et al.*, revealed as yet unknown and not fully understood thermodynamical properties.

# Conteúdo

<b>1. Introdução</b>	<b>8</b>
<b>I. Sistemas Nanoestruturados</b>	<b>11</b>
<b>2. Multicamadas Magnéticas</b>	<b>12</b>
2.1. Magneto-Resistência Gigante . . . . .	13
2.2. Multicamadas Descontínuas, Junções de Spin e Válvulas de Spin .	15
2.3. Aplicações Tecnológicas . . . . .	16
<b>3. Grânulos Magnéticos</b>	<b>17</b>
3.1. Partículas de Domínio Único . . . . .	17
3.2. Modelo de Stoner-Wohlfarth . . . . .	18
3.3. Modelo de Néel . . . . .	19
3.4. Modelo de Brown . . . . .	21
3.5. Outros Modelos de Relaxação Superparamagnética . . . . .	22
3.6. Sistemas Experimentais . . . . .	23
3.7. Aplicações Tecnológicas . . . . .	24
<b>II. Temperatura Nula - Energia do Estado Fundamental</b>	<b>28</b>
<b>4. Redes de Dipolos Pontuais</b>	<b>29</b>
4.1. Método de Luttinger e Tisza . . . . .	30
4.2. Estado Fundamental Degenerado . . . . .	32
4.3. Condições para Levantamento da Degenerescência . . . . .	34
4.4. Redes Rectangulares . . . . .	36

<b>5. Para Além da Aproximação Pontual</b>	<b>40</b>
5.1. Dipolos Unidimensionais . . . . .	41
5.2. Discos Bidimensionais . . . . .	46
<b>III. Temperaturas Baixas - Ondas Magnetoestáticas</b>	<b>50</b>
<b>6. Espectro de Excitações Magnéticas</b>	<b>51</b>
6.1. Dipolos Pontuais . . . . .	52
6.2. Grandezas Termodinâmicas . . . . .	56
6.3. Dipolos Finitos . . . . .	59
<b>IV. Temperatura Genérica - Simulações de Monte Carlo</b>	<b>63</b>
<b>7. Revisão de Métodos de Monte Carlo</b>	<b>64</b>
7.1. Introdução . . . . .	64
7.2. Cadeias de Markov . . . . .	65
7.3. Algoritmo de Metropolis . . . . .	66
7.4. Variações do Algoritmo de Metropolis . . . . .	67
7.5. Métodos Avançados . . . . .	69
7.6. Multicanonical Ensemble . . . . .	70
7.7. Novo Algoritmo Multicanónico . . . . .	71
7.8. Métodos de Histogramas . . . . .	73
7.9. Outros Métodos de Simulação Computacional . . . . .	75
<b>8. Simulações</b>	<b>76</b>
8.1. Simulações Metropolis . . . . .	77
8.2. Simulações Multicanónicas . . . . .	80
8.3. Médias de Grandezas Termodinâmicas . . . . .	85
8.4. Susceptibilidade Magnética . . . . .	89
8.5. Calor Específico . . . . .	91
<b>9. Perspectivas de Trabalhos Futuros</b>	<b>95</b>
<b>10. Conclusões</b>	<b>96</b>

# 1. Introdução

As novas ferramentas e técnicas capazes de fabricar estruturas com dimensões à escala nanométrica abriram numerosas possibilidades na investigação de novos dispositivos, num domínio até então inacessível aos investigadores experimentais. Por exemplo, uma área de intensa investigação actual incide sobre a determinação da dimensão a partir da qual será fisicamente ou financeiramente impraticável continuar a tendência de reduzir o tamanho, aumentando a complexidade, dos chips de silicone. No entanto, o campo que nos interessa é o dos materiais magnéticos, e nestes destacam-se os materiais granulares e as multicamadas, também eles com potenciais aplicações na área da informática e tecnologias de informação.

O que torna estes novos materiais tão interessantes é a grande versatilidade resultante da variedade de parâmetros que podemos ajustar - entre as propriedades electrónicas, a densidade de estados na superfície de Fermi e o livre percurso médio, por exemplo, e nas magnéticas, a magnetização, a anisotropia, a coercividade, etc. Além disso, podemos variar, também, parâmetros de estrutura como, nas multicamadas, a espessura e o número de camadas, e, nos materiais granulares, o diâmetro e a concentração de grânulos, entre outros.

De todas as propriedades dos novos materiais magnéticos, a que mais se destaca será, provavelmente, o efeito de magneto-resistência gigante (GMR), descoberto, pela primeira vez, em multicamadas, por Baibich *et al.* [1], por permitir o fabrico de sensores muito pequenos (cabeças de leitura), capazes de medir um campo fraco, num certo ponto, a partir da alteração da resistência. No fabrico de memórias de acesso aleatório (MRAM), uma magneto-resistência elevada, combinada com um campo coercivo diminuto, permite aumentar a densidade e a velocidade, diminuindo, ao mesmo tempo, a diferença de potencial necessária. Estas características podem ser encontradas tanto em multicamadas magnéticas, como em materiais granulares e junções magnéticas de túnel. Outros materiais

## 1. Introdução

exibem também propriedades magnéticas que podem ser usadas no fabrico de sensores, como uma magneto-resistência ainda mais elevada nas manganites, designada por magneto-resistência colossal (CMR), com origem em processos físicos significativamente diferentes (o acoplamento de spin electrónico, carga e distorções da rede num “polarão spin-rede”) e o efeito de magnetoimpedância gigante (GMI) em micro-fios.

Na classe de materiais granulares, mais simples de preparar e mais estáveis do que as multicamadas, destaca-se a possibilidade de construir estruturas ordenadas de pequenas partículas magnéticas que podem vir a substituir os actuais dispositivos de gravação magnética, pelo que importa estudar não só o aparecimento de ordem de longo alcance nestes sistemas como também a resposta a um campo aplicado, embora os actuais interesses de investigação destas partículas se estendam a campos tão diversos como o geomagnetismo, mineralogia, química (catalisadores), arqueologia (técnicas de fabrico de cerâmicas) e biologia (proteínas armazenadoras de ferro e bactérias magnetotácteis). Este último caso é particularmente interessante por poder levar a técnicas biológicas de preparação de nanoestruturas magnéticas.

A primeira parte desta tese, constituída pelos **capítulos 2 e 3**, pretende ser uma breve revisão da literatura nesta área de investigação, apresentando as principais classes de sistemas magnéticos nanoestruturados.

A segunda parte consiste no estudo de sistemas baseados em redes planares a temperatura nula. No **capítulo 4** é introduzido o método de Luttinger e Tisza para redes de dipolos pontuais, que conduz a um estado fundamental continuamente degenerado, e são analisadas as condições para o levantamento dessa degenerescência e para o aparecimento de ordem de longo alcance. Especial ênfase será dada, no **capítulo 5**, à substituição de dipolos pontuais por modelos de tamanho finito mais realísticos, e à forma como estes efeitos podem levantar também a degenerescência e diminuir a barreira energética entre os estados antiferromagnético e ferromagnético.

Na terceira parte, **capítulo 6**, é feita uma análise, a temperaturas baixas, das propriedades termodinâmicas de uma rede quadrada de dipolos pontuais, através da construção do espectro de excitações elementares (ondas magnetoestáticas) e, posteriormente, do efeito da introdução de correcções de tamanho finito, supondo um estado fundamental ordenado ferromagneticamente.

A quarta e última parte é dedicada ao uso de simulações de Monte Carlo, re-

## 1. *Introdução*

vistos no **capítulo 7**, em particular de uma variação do método Multicanônico de Berg, para estudar as propriedades termodinâmicas da rede quadrada de dipolos pontuais a qualquer temperatura, no **capítulo 8**.

Parte I.

# Sistemas Nanoestructurados

## 2. Multicamadas Magnéticas

Como já foi dito, os sistemas magnéticos nanoestruturados de maior relevância tecnológica são as multicamadas magnéticas e os materiais granulares. Embora o nosso trabalho se concentre nestes últimos, é importante conhecer as propriedades e aplicações das multicamadas, que são em grande medida comuns aos dois tipos de materiais.

Multicamadas magnéticas (figura 2.1) são estruturas fabricadas através da deposição ordenada de filmes finos alternados de dois ou mais metais, sendo pelo menos um deles magnético. Graças aos desenvolvimentos tecnológicos que permitem a deposição de camadas de apenas alguns angstroms de espessura, é possível estudar uma grande variedade de fenômenos físicos, incluindo efeitos magneto-ópticos, magneto-resistência, anisotropia de superfícies e interfaces magnéticas, etc.

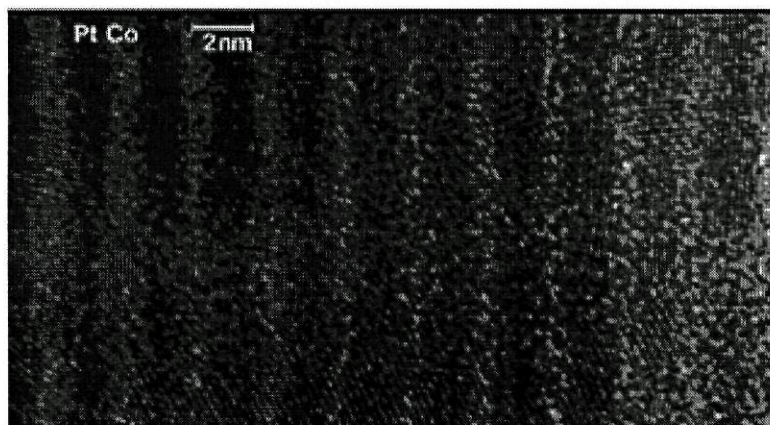


Figura 2.1.: Imagem HRTEM (*High Resolution Transmission Electron Microscopy*) de uma multicamada Co (0.8nm) / Pt (1.4nm) : Página de Internet do *Oxford Centre for Advanced Materials and Composites*.

## 2. Multicamadas Magnéticas

Estes sistemas são constituídos por um substrato (eg. Cu, Au, Al) seguido por uma repetição periódica -  $n$  vezes - de uma espessura  $x$  de um ferromagnete (eg. Fe, Co, Ni) e uma espessura  $y$  de um metal não magnético (eg. Cu, Ag, Au, Mg). Os valores típicos de  $x$  e  $y$  situam-se entre alguns angstroms e algumas centenas de angstroms e  $n$  pode ser apenas 1 ou várias centenas. Ocasionalmente, é usada uma camada fina de protecção sobre o filme.

### 2.1. Magneto-Resistência Gigante

O que possibilita as aplicações referidas das multicamadas é a forma como as magnetizações das camadas podem ser distribuídas. Numa distribuição usual, as magnetizações das camadas, normalmente sobre o plano das camadas, encontram-se antiparalelas entre si (acoplamento antiferromagnético). Nesta configuração, a resistência eléctrica do filme é elevada. Aplicando um campo magnético a este sistema, também no plano das camadas, em geral, é possível alinhar as magnetizações de todas as camadas (acoplamento ferromagnético), resultando um sistema com uma resistência inferior. O filme exhibe magneto-resistência negativa, sendo a magneto-resistência definida por

$$\frac{\Delta\rho}{\rho}(H) = \frac{\rho(H) - \rho(0)}{\rho(0)}. \quad (2.1)$$

Medindo a magnetização de multicamadas em função do campo aplicado, é possível obter informação directa sobre o acoplamento entre as camadas ferromagnéticas e, em particular, em função da espessura da camada não magnética. Verificou-se que é comum um acoplamento de troca oscilatório do tipo da interacção de RKKY,

$$J_{RKKY}(r) \propto \frac{\sin(2k_F y)}{(2k_F y)^2}, \quad (2.2)$$

isto é, uma alternância entre as configurações paralela e antiparalela, a campo nulo, em função de  $y$ .

Os efeitos galvanomagnéticos - alterações nas propriedades de condução de materiais pela aplicação de um campo magnético - foram estudados extensivamente nos materiais muito puros. No entanto, podem ser difíceis de perceber e interpretar quando o facto de o material não ser homogéneo desempenha um pa-

## 2. Multicamadas Magnéticas

pel crucial. A magneto-resistência positiva - um aumento da resistência eléctrica através da aplicação de um campo magnético - está, normalmente, associada à forma das órbitas electrónicas em materiais cristalinos muito puros e em fortes campos magnéticos. É um efeito diamagnético que, em metais extremamente puros, a temperaturas muito baixas, aumenta a resistência por um factor de seis a oito ordens de magnitude. Salvo uma ou outra excepção, este efeito não tem grandes aplicações práticas em dispositivos devido à necessidade de temperaturas muito baixas e ao diminuto valor inicial da resistência em metais muito puros.

No entantó, a magneto-resistência negativa - uma diminuição da resistência quando o campo é aplicado - implica um aumento de ordem e uma redução da difusão de electrões. Em metais ferromagnéticos, a corrente eléctrica é transportada por electrões em dois canais aproximadamente independentes, referentes à orientação do spin, com condutividades distintas, dependentes da difusão de electrões em impurezas ou nas interfaces. Quando, da aplicação de um campo magnético, resulta uma alteração do estado do sistema de antiferromagnético para ferromagnético, a difusão de electrões nas interfaces é muito inferior, diminuindo, assim, a resistividade eléctrica (figura 2.2).

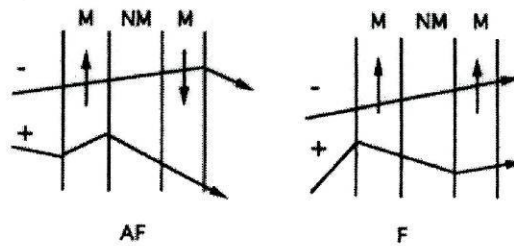


Figura 2.2.: Representação esquemática do mecanismo de magneto-resistência gigante. Os sinais + e - representam electrões com spins + e  $-1/2$  [2].

Em geral, os sistemas de multicamadas que exibem magneto-resistência negativa gigante são aqueles em que as propriedades de dispersão são muito diferentes para as duas orientações de spins, tanto no filme como nas interfaces. A estrutura detalhada das interfaces, incluindo as impurezas introduzidas durante o fabrico, é, por isso, de grande importância. Por esta razão, é nas técnicas de deposição de filmes finos em multicamadas que se concentra grande parte da investigação nesta área.

## 2.2. Multicamadas Descontínuas, Junções de Spin e Válvulas de Spin

As multicamadas são usadas em muitas combinações diferentes. Os sistemas conhecidos como válvulas de spin são formados por uma camada metálica não magnética entre duas camadas metálicas magnéticas [3], e são mais eficazes que todos os outros, de tal forma que estão sujeitos a intensa investigação para aplicação em sensores e cabeças de leitura. Nas junções de spin, a camada intermédia é isoladora [4] e são mais instáveis do que as válvulas de spin, por serem muito dependentes das condições de deposição das camadas. Existem, ainda, multicamadas descontínuas [5] (figura 2.3), nas quais a camada intermédia é constituída por grânulos de um material como o cobalto [6], combinando as propriedades das multicamadas com a estabilidade e facilidade de preparação, em relação às multicamadas, dos materiais granulares, e junções descontínuas de spin [7].

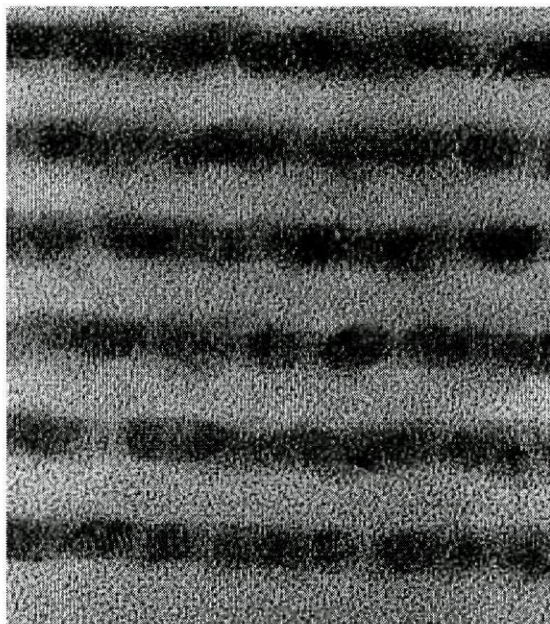


Figura 2.3.: Multicamada descontínua  $(\text{Co}(2\text{nm})/\text{SiO}_2(3,5\text{nm}))_{20}$ . Imagem por TEM (*Transmission Electron Microscopy*): Página de Internet do *Commissariat à l'Energie Atomique - Département de Recherche Fondamentale sur la Matière Condensée*.

## 2. *Multicamadas Magnéticas*

No caso das junções de spin o mecanismo é diferente. Como a camada intermédia é isoladora, a condução dá-se por efeito de túnel, razão pela qual estes dispositivos são conhecidos também como junções magnéticas de túnel (MTJ's). Ao contrário do que acontece nas estruturas de GMR, onde a corrente é, normalmente, paralela às camadas, aqui a corrente é perpendicular às camadas, mas a resistência também depende da magnetização das camadas ferromagnéticas, como nos dispositivos de GMR. A grande vantagem das junções magnéticas de túnel é que, enquanto nas estruturas de camada condutora a GMR chega a 110%, a temperatura ambiente, com campos muito elevados (cerca de 20,000 Oe), as estruturas de camada isoladora exibem magneto-resistência de túnel (TMR) até 47% em campos magnéticos muito mais fracos (1 a 10 Oe).

### 2.3. **Aplicações Tecnológicas**

No que diz respeito às aplicações tecnológicas [8], os dispositivos de GMR permitem criar configurações magnéticas onde a inversão de magnetização ocorre quer por rotação de magnetização, resultando numa variação de resistência com baixa coercividade (para usar em sensores - por exemplo, cabeças de leitura de discos magnéticos de alta densidade) quer por um processo de inversão com histerese que permite a existência de dois estados remanentes com diferentes resistências (para criar memórias de acesso aleatório não voláteis, com a alta velocidade da actual StaticRAM e a alta densidade da DynamicRAM). Por ser não volátil, este tipo de memória pode proporcionar computadores que voltam instantaneamente ao estado em que se encontravam quando foram desligados e o baixo consumo beneficia particularmente os computadores portáteis.

Uma vez controlados eficazmente mecanismos como a difusão e efeito de túnel dependentes de spin que estão na base da GMR e TMR, antecipa-se o aparecimento de diversos dispositivos electrónicos, como transistores de spin, numa tecnologia que é já designada por "Spintronics".

## 3. Grânulos Magnéticos

Os materiais granulares magnéticos são compósitos de nanopartículas magnéticas [9], normalmente de cobalto ou níquel, inseridas numa matriz não magnética, metálica ou isoladora. Actualmente, têm sido alvo de intenso estudo, motivado pela descoberta do efeito de magneto-resistência gigante [10][11] em matrizes metálicas mas já nos anos 70 tinham chamado a atenção. Nessa altura, verificou-se uma magneto-resistência elevada em filmes granulares metal/isolador que, abaixo do limite de percolação metálica, consistem de nanopartículas ferromagnéticas distribuídas aleatoriamente numa matriz isoladora. Este efeito foi atribuído ao facto de a condução ser dominada pelo efeito túnel dos electrões entre grânulos [12]. Já nessa altura, as medições da magneto-resistência mostraram que a probabilidade de transferência de um electrão por efeito de túnel é dependente do spin. Em matrizes metálicas, os momentos magnéticos dos grânulos têm um efeito semelhante na difusão dos electrões de condução [13]. Neste caso, a probabilidade desta difusão dependente de spin é função da magnetização global  $M = \langle \cos \theta_i \rangle$  e também do valor médio  $\langle \cos \theta_{ij} \rangle$  do coseno do ângulo entre os momentos magnéticos de partículas vizinhas.

Como as correlações entre os nanogrânulos magnéticos desempenham um papel crucial no comportamento destes materiais, com matrizes quer metálicas quer isoladoras, a nossa principal preocupação será com o estudo das propriedades e interacções entre pequenas partículas magnéticas, independentemente do meio em que se inserem.

### 3.1. Partículas de Domínio Único

Ao contrário de ferromagnetes grandes, que se subdividem em domínios, com uma estrutura de magnetização complicada, as partículas que constituem os materi-

### 3. Grânulos Magnéticos

ais granulares são de dimensão suficientemente reduzida para formar um único domínio, com magnetização saturada devida à interacção de troca (desde que a temperatura seja inferior à temperatura de Curie do material), de tal forma que a energia térmica da partícula desempenha um papel importante no seu comportamento magnético.

No caso de um conjunto de partículas esféricas, com anisotropia desprezável e independentes, cada uma com um momento magnético constante  $\mu$ , que pode rodar livremente no espaço, o comportamento magnético é particularmente simples. Se o sistema estiver em equilíbrio termodinâmico à temperatura  $T$  e sujeito a um campo aplicado  $H$ , as orientações dos momentos serão determinadas pelo termo de Zeeman

$$E = -\mu \cdot H, \quad (3.1)$$

obedecendo a uma distribuição de Boltzmann, como no caso do paramagnetismo clássico. A magnetização média na direcção do campo é dada pela função de Langevin, com a diferença de  $\mu$  não ser o momento magnético de um átomo mas sim de uma partícula ferromagnética de um único domínio, que pode conter mais de  $10^5$  átomos. Esta comparação está na origem da designação de superparamagnetismo para este comportamento da magnetização em equilíbrio térmico.

Naturalmente, os grânulos não têm propriedades completamente isotrópicas, quer devido às suas próprias formas, quer devido a factores externos como a estrutura da rede que os rodeia. Sendo assim, a energia dos grânulos terá uma contribuição anisotrópica que, no caso mais simples de simetria uniaxial, terá a forma

$$E = KV \sin^2 \theta, \quad (3.2)$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre o momento e o eixo de simetria da partícula,  $V$  é o volume da partícula e  $K$  é a densidade de energia de anisotropia. No caso de anisotropia de forma,  $K$  é a diferença entre a densidade de energia para magnetização paralela ao eixo de anisotropia e a densidade de energia para a magnetização perpendicular.

#### 3.2. Modelo de Stoner-Wohlfarth

Se a partícula estiver sujeita a um campo magnético ao longo do eixo de simetria, a energia será dada por

### 3. Grânulos Magnéticos

$$E = KV \sin^2 \theta - \mu H \cos \theta \quad (3.3)$$

( $\mu$  é o momento magnético da partícula e  $\theta$  é o respectivo ângulo em relação ao eixo de anisotropia). Esta expressão corresponde ao modelo de Stoner-Wohlfarth [14], desenvolvido para descrever os processos de coercividade e viscosidade magnética e que tem sido muito usado por fabricantes de ímãs permanentes como indicador de processos através dos quais podem ser obtidas propriedades melhoradas essencialmente a partir de um aumento da anisotropia. Como se pode ver pela figura 3.1, este modelo é caracterizado pela possibilidade de existência de dois mínimos metaestáveis, separados por uma barreira que depende da constante de anisotropia e da magnitude e direcção do campo em relação à direcção de anisotropia.

Apesar do uso generalizado desta teoria, existem dúvidas sobre a sua validade geral para a maior parte dos materiais que constituem os ímãs permanentes. Uma das fraquezas mais sérias desta teoria é não ter em conta interacções entre as partículas de domínio único (embora a interacção dipolar possa ser introduzida no campo total sobre uma partícula). Além disso, os ímãs permanentes não são formados, normalmente, por redes de partículas isoladas de domínio único - este modelo é mais adequado aos materiais usados para gravação magnética.

### 3.3. Modelo de Néel

Foi Néel [16] quem apontou pela primeira vez que partículas ferromagnéticas de domínio único exibem o fenómeno de superparamagnetismo [17]. Néel e, posteriormente, Brown [18] consideraram um conjunto destas partículas colocadas num campo magnético muito elevado e, depois, retiradas do campo. Néel afirmou que deveríamos observar uma magnetização remanente que decai com o tempo, à medida que as flutuações térmicas mudam as direcções de magnetização das partículas. Depois de removido o campo, a remanência desaparecerá da forma

$$M_r(t) = M_r(0)e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (3.4)$$

### 3. Grânulos Magnéticos

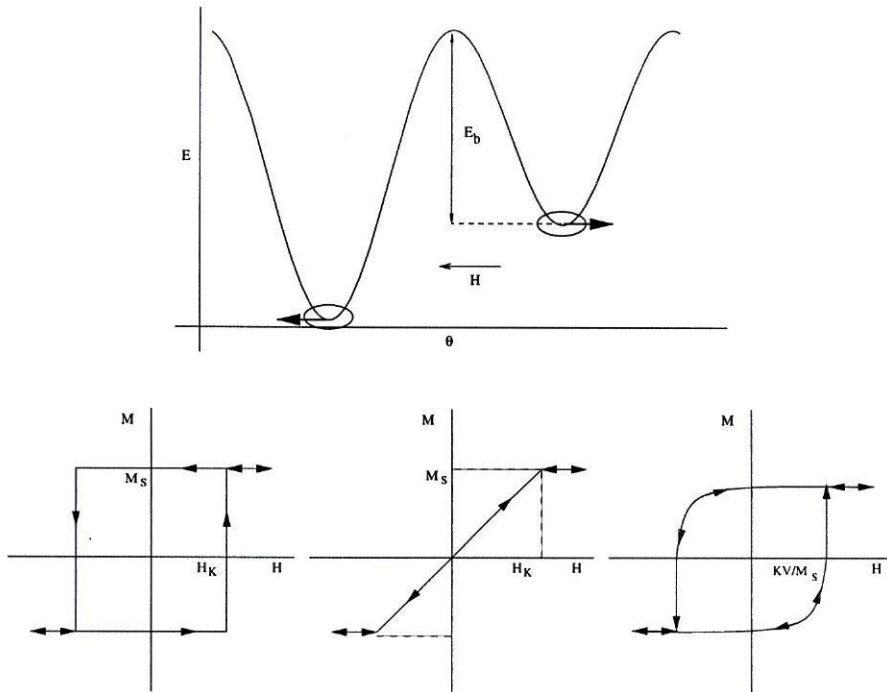


Figura 3.1.: Em cima, energia de uma partícula em função da direcção da magnetização no modelo de Stoner-Wohlfarth. Em baixo, curvas de magnetização  $M$  de uma partícula com campo aplicado  $H$ : (a) paralelo o eixo de anisotropia, (b) perpendicular ao eixo de anisotropia e (c) a um ângulo arbitrário com o eixo de anisotropia ( $M_s = \mu$  e  $H_K = KV/\mu$ )[15].

onde  $\tau$  é o parâmetro tempo de relaxação. Usando a probabilidade clássica de saltar uma barreira de energia, Néel chegou à relação

$$\frac{1}{\tau} = f_0 e^{-\frac{KV}{k_B T}} \quad (3.5)$$

( $f_0$  é um factor tipicamente da ordem de  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  e corresponde à frequência de precessão de um momento, a temperatura finita, em torno do campo a que está sujeito). Esta expressão permitiu comparar os tempos de relaxação para partículas de diferentes tamanhos verificando-se que acima de um certo raio (alguns nanómetros), ou abaixo de uma determinada temperatura (temperatura de bloqueamento), o tempo necessário para observar alguma alteração é muito elevado, de tal forma que, para todos os efeitos práticos, a magnetização é estável e nada tem de ser alterado na teoria convencional de ferromagnetismo. Uma excepção a

este comportamento é a observação de sistemas onde uma fracção das partículas de domínio único parece não ter atingido ainda a sua temperatura de bloqueamento a temperaturas de apenas alguns Kelvin, o que poderia ser atribuído a um efeito de túnel macroscópico (MQT) [19]. No entanto, é muito difícil determinar quando ou se a relaxação se deve a um efeito quântico, devendo este caso manifestar-se através de um tempo de relaxação independente da temperatura.

A experiência imaginária de Néel, onde a alteração na magnetização pode ser observada, é limitada a uma pequeno leque de tamanhos, nem sempre possíveis de obter experimentalmente, em que o tempo de relaxação é da mesma ordem do tempo necessário para a medição. Para partículas ainda mais pequenas, o tempo de relaxação pode ser tão pequeno que ocorrem várias inversões de magnetização dentro do tempo de medição. Neste caso, o valor médio da magnetização sem campo aplicado é nulo. Este argumento pode ser generalizado para chegar à conclusão que um conjunto destas partículas sujeito a um campo magnético se comporta como um conjunto de átomos paramagnéticos, como já foi dito.

### 3.4. Modelo de Brown

Os resultados experimentais estão de acordo com a teoria de Néel mas de uma forma maioritariamente qualitativa. Brown argumentou que a teoria de Néel é demasiado simples por considerar apenas um único salto de um mínimo de energia para o outro, sem permitir que o vector magnetização passe algum tempo entre os dois mínimos de energia antes de saltar, além de ignorar a possibilidade de voltar ao mínimo original. Brown mostrou que a teoria podia ser tratada no contexto de processos estocásticos governados por uma equação de Langevin e escreveu a equação de Fokker-Planck para a densidade de orientações de momento magnético na esfera unitária (ver, por exemplo, [20]).

Na derivação da equação de Fokker-Planck, a equação estocástica para o movimento do vector momento magnético de uma partícula tanto pode ser a equação de Landau-Lifshitz,

$$\frac{d\mathbf{n}}{dt} = \gamma [\mathbf{n} \times (\mathbf{H}_{ef} + \Xi)] - \gamma a [\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{H}_{ef})] \quad (3.6)$$

(onde  $\gamma$  é o factor giromagnético,  $\mathbf{n}$  é a direcção do momento,  $a = \eta\gamma M_s$ ,  $\eta$  é uma constante de amortecimento escolhida de forma a  $a$  ser adimensional e  $\Xi$  é um

### 3. Grânulos Magnéticos

campo aleatório devido às flutuações térmicas) como a equação de Gilbert, com o amortecimento incorporado no campo efectivo.

Usando a equação de Landau-Lifshitz, a equação de Fokker-Planck para a função de distribuição

$$f(\mathbf{N}, t) = \langle \delta(\mathbf{N} - \mathbf{n}(t)) \rangle \quad (3.7)$$

das orientações  $\mathbf{n}(t)$  dos momentos magnéticos na esfera  $|\mathbf{N}| = 1$ , sendo a média sobre valores de  $\Xi$ , é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} \{ \gamma [\mathbf{N} \times \mathbf{H}_{ef}] - \gamma a [\mathbf{N} \times (\mathbf{N} \times \mathbf{H}_{ef})] \\ + \gamma a k_B T \left[ \mathbf{N} \times \left( \mathbf{N} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{N}} \right) \right] \} f = 0. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Brown mostrou também que a teoria de taxas de fuga de Kramers podia ser adaptada de forma a fornecer uma expressão para a taxa de fuga (inverso do maior tempo de relaxação) para momentos magnéticos. No entanto, as tentativas de Brown para considerar estes efeitos no caso de anisotropia uniaxial levaram aos mesmos resultados obtidos por Néel e as principais diferenças entre os dois tratamentos chegaram apenas com a resolução numérica da equação diferencial para um material com anisotropia cúbica.

### 3.5. Outros Modelos de Relaxação Superparamagnética

Mais recentemente, os processos de relaxação superparamagnética têm sido alvos de alguma controvérsia, com a publicação de dois modelos que consideram a introdução de interacções entre as partículas e conduzem a efeitos opostos. No modelo de Mørup-Tronc [21] a barreira de energia é dada por

$$E_B = KV \left[ 1 + 2h (\pm \cos v - \sin v) + h^2 \right] \quad (3.9)$$

(onde  $v$  é o ângulo entre o campo e a direcção de anisotropia e  $\pm$  corresponde à existência de duas barreiras). Este modelo considera graus de liberdade colectivos (limite de interacções fortes) e as interacções levam a uma diminuição da barreira

### 3. Grânulos Magnéticos

de energia. Por outro lado, no modelo de Dormann-Bessais-Fiorani [22],

$$E_B = E_{B0} + n_1 a_1 M^2 V \mathcal{L} \left[ \frac{a_1 M^2 V}{k_B T} \right] \quad (3.10)$$

(onde  $E_{B0}$  corresponde ao limite sem interações,  $n_1$  é o número de próximos vizinhos,  $a_1 \simeq C_V/\sqrt{2}$ , sendo  $C_V$  é a concentração de partículas na amostra, e  $\mathcal{L}$  é a função de Langevin). Este modelo é baseado no modelo de Stoner-Wohlfarth, lida com graus de liberdade individuais (limite de interações fracas) e prevê um aumento da mesma barreira. Várias análises dos dois modelos foram publicadas desde então mas esta e outras questões continuam em aberto. As verificações experimentais destes modelos foram efectuadas em sistemas com baixas concentrações, longe do âmbito de ordem de longo alcance que iremos considerar.

### 3.6. Sistemas Experimentais

Nos materiais granulares magnéticos actualmente sob investigação dividem-se em sistemas com distribuições ordenadas ou desordenadas dos grânulos inseridos em matrizes isoladoras ou condutoras. O interesse no estudo dos materiais desordenados apareceu mais cedo, devido à maior facilidade de preparação, com a descoberta do efeito de GMR nos materiais com matriz metálica e TMR em matrizes isoladoras, enquanto que apenas recentemente a atenção se virou para as redes ordenadas, com o desenvolvimento de técnicas de preparação mais avançadas. Por outro lado, os modelos teóricos avançam no sentido inverso - pretendemos tornar mais realísticos os modelos de redes ordenadas, enquanto que ainda não existem modelos satisfatórios do comportamento magnético de materiais desordenados.

Entre os sistemas constituídos por redes planares de partículas magnéticas que os nossos modelos pretendem descrever, destacam-se os trabalhos de Cowburn [23], Evoy [24], Takzei [25] e Sun [26].

As experiências de Cowburn *et al.* são de particular relevância para o nosso trabalho. Os sistemas representados na figura 3.2 são redes rectangulares de discos circulares de “supermalloy”,  $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{14}\text{Mo}_5$ , com 60nm de diâmetro e 7nm de espessura. Um dos períodos da rede,  $Y$ , foi mantido constante, 180nm (o triplo do diâmetro das partículas), enquanto que o outro,  $X$ , foi variado, em redes diferentes, desde 180nm (rede quadrada) até 80nm, deixando apenas 20nm

### 3. Grânulos Magnéticos

entre partículas, tendo-se verificado o aparecimento de ordem ferromagnética ao chegar a aproximadamente  $X = 100\text{nm}$  ( $X/Y = 0.555$ ), a temperaturas desde a temperatura ambiente até cerca de  $600\text{K}$ . Para este sistema, a unidade natural de temperatura  $\mu^2/a^3$  ( $k_B = 1$ ) é aproximadamente  $318\text{K}$ . Este sistema difere da rede quadrada de dipolos pontuais em dois aspectos que iremos tratar nas secções seguintes - a assimetria da rede (rectangular) e o tamanho finito das partículas (discos).

Outro exemplo de sistemas com comportamento ferromagnético é o de Evoy *et al.* Neste caso, as redes eram constituídas por partículas de cobalto alongadas,  $80 \times 140\text{ nm}$ , com uma espessura variável entre 14 a 30 nm, em redes triangulares de lado 150 a 700 nm (figura 3.3).

Quando a espessura se aproxima de 30 nm, as partículas deixam de ser constituídas por um único domínio e para distâncias superiores a 400 nm são consideradas independentes. Como o objectivo deste trabalho era analisar a possibilidade de utilização destas estruturas como unidades de armazenamento de dados, as configurações mais favoráveis eram constituídas por redes de lado superior a 400 nm com partículas de espessura reduzida. Para distâncias grandes, o modelo de dipolos finitos unidimensionais que iremos considerar pode constituir uma boa aproximação a estes sistemas.

### 3.7. Aplicações Tecnológicas

O efeito de diminuição do tempo de relaxação ao ponto de ocorrerem várias inversões da magnetização dentro do tempo de medição é conhecido como limite superparamagnético, que pode vir a limitar o crescimento actual na densidade dos dispositivos de gravação magnética. Actualmente, já foram demonstradas densidades de  $20\text{ Gbits/in}^2$  embora os dispositivos actuais não cheguem a  $10\text{ Gbits/in}^2$ . Prevê-se que o limite se situe perto dos  $40\text{ Gbits/in}^2$ , atingido daqui a 5 ou 6 anos à taxa de crescimento actual, o que aumenta a necessidade de compreender melhor os mecanismos de relaxação superparamagnética, principalmente os efeitos das interacções e da anisotropia. Novos materiais com uma anisotropia mais elevada podem ser estáveis com grânulos mais pequenos mas requerem campos mais elevados para inverter a magnetização.

Outra solução poderá ser usar bits de um único grânulo em estruturas regulares

### 3. *Grânulos Magnéticos*

(figura 3.4) [27], de que são exemplo os trabalhos de descritos na secção anterior, o que requer técnicas de preparação mais sofisticadas. Estas estruturas podem também ser usadas, tal como as multicamadas, como memórias não voláteis [28] ou como ambiente para a implementação de computadores quânticos [29].

### 3. Grânulos Magnéticos

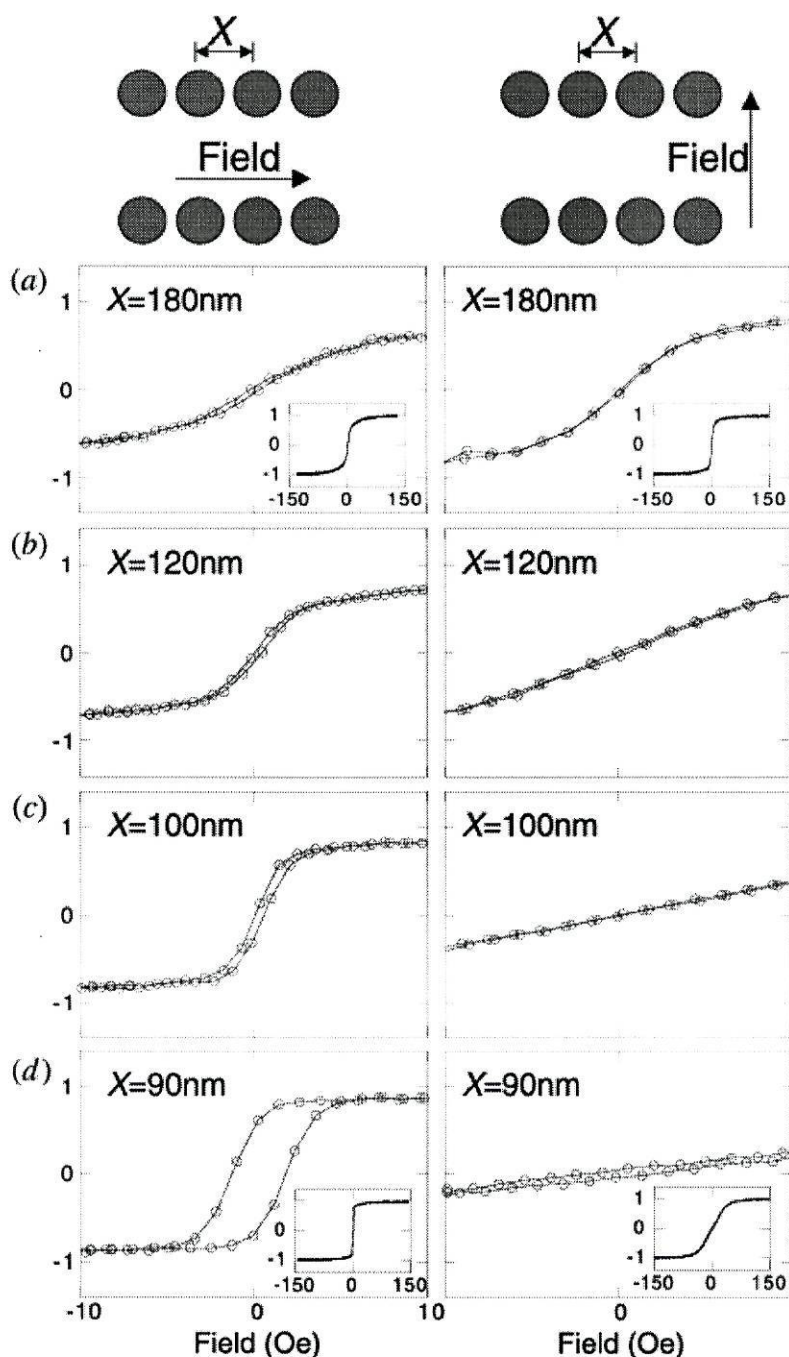


Figura 3.2.: Em cima, uma representação esquemática das redes de partículas magnéticas. Os ciclos de histerese, para duas direcções do campo aplicado, demonstram o aparecimento de ordem ferromagnética (painéis d), devida às interacções dipolares, à medida que diminui a distância entre grânulos, numa única direcção (no interior, os ciclos para toda a gama de valores do campo aplicado) [23].

### 3. Grânulos Magnéticos

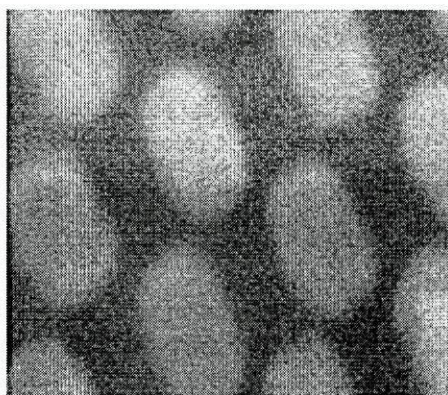


Figura 3.3.: Imagem por SEM (*Scanning Electron Microscopy*) de uma rede de nanoestruturas de cobalto de dimensões  $80 \times 140 \times 20$  nm numa rede triangular de lado 150 nm [24].

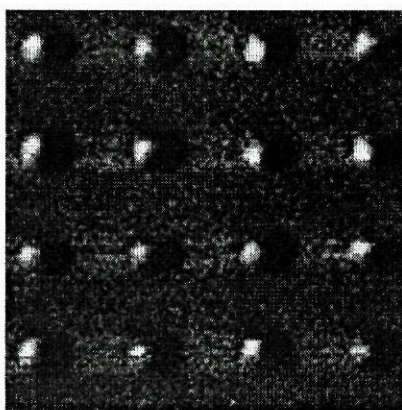


Figura 3.4.: Imagem por MFM (*Magnetic Force Microscopy*) de nanoestruturas de cobalto com dimensões  $80 \times 140 \times 17$  nm separadas por 600 nm numa rede quadrada [24].

## Parte II.

# Temperatura Nula - Energia do Estado Fundamental

## 4. Redes de Dipolos Pontuais

Como vimos, os cálculos dos tempos de relaxação dos modelos de Néel e Brown são válidos apenas em certas condições de anisotropia e mesmo assim de forma aproximada, particularmente no que diz respeito ao factor pré-exponencial. A situação complica-se quando as partículas não estão isoladas, que constitui o caso mais geral, onde existem interacções magnéticas dipolares e de troca para partículas em contacto. Como queremos tratar apenas de partículas bem separadas, não serão incluídas as interacções de troca. Além disso, como já vimos, os momentos magnéticos totais dos grânulos são muito grandes, da ordem de milhares de magnetões de Bohr, o que nos permite uma abordagem inteiramente clássica ao problema das interacções entre os dipolos magnéticos.

No que diz respeito às interacções dipolares, a energia de interacção

$$E = \sum_{\langle i,j \rangle} \left( (\boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{\mu}_j) - 3 (\boldsymbol{\mu}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}) (\boldsymbol{\mu}_j \cdot \hat{\mathbf{r}}) \right) / r^3 \quad (4.1)$$

(onde  $\langle i, j \rangle$  significa soma sobre pares, sem dupla contagem) só pode ser calculada em condições estáticas no caso de uma rede regular de partículas idênticas porque, noutra situação, as magnetizações relaxam de acordo com vários tempos de relaxação, relacionados com os volumes das partículas e as suas distribuições, o que faz com que o ângulo entre as magnetizações de duas partículas flutue com o tempo. Bastam pequenas variações no volume das partículas para induzir este efeito. A temperatura nula, para momentos clássicos, não há flutuação da magnetização e é possível determinar o estado fundamental minimizando a energia total (método de Luttinger e Tisza [30]). Este parece ser o único caso em que são válidos os cálculos de interacção dipolar sem considerar flutuações na magnetização.

### 4.1. Método de Luttinger e Tisza

O método de Luttinger e Tisza consiste em representar redes ordenadas, infinitas, de dipolos pontuais como vectores num espaço vectorial multidimensional. Considerando apenas configurações com um período igual ao dobro do parâmetro da rede  $a$ , a dimensionalidade do espaço é determinada pelo número de dipolos numa célula unitária e pelos graus de liberdade de cada momento (o termo configuração é usado aqui para descrever não só a posição dos dipolos mas também as orientações dos respectivos momentos). Note-se que a suposição de que o estado fundamental tem esta periodicidade, conhecida como hipótese de Luttinger e Tisza, não foi ainda provada exactamente.

Por exemplo, no caso de uma rede cúbica simples temos oito dipolos com três graus de liberdade, ou seja, um espaço com 24 dimensões. As soluções com igual norma do momento para todos os dipolos definem uma hipersuperfície de 16 dimensões. Uma configuração arbitrária pode ser considerada como uma sobreposição de configurações básicas e a energia de interacção dipolar é obtida a partir das energias destas configurações. Para calcular a energia de uma configuração é necessário conhecer o campo gerado pela configuração em todos os pontos da rede. Como o campo tem a mesma simetria das configurações, o conjunto de vectores que representa o campo em todos os pontos da rede será mais um vector do espaço vectorial das configurações. A operação que corresponde a cada configuração  $\mathbf{M}$  o seu campo  $\mathbf{F}$  pode ser escrita na forma  $\mathbf{F} = \mathcal{F}\mathbf{M}$ , onde  $\mathcal{F}$  é o operador de campo. A energia total é a soma das energias de cada um dos dipolos,  $-\mathbf{m} \cdot \mathbf{f}$ ,

$$\mathbf{f} = \frac{3\mathbf{r}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{r}) - \mathbf{m}r^2}{r^5}, \quad (4.2)$$

e pode ser escrita na forma

$$U = -\frac{1}{16}\mathbf{M} \cdot \mathbf{F} = -\frac{1}{16}\mathbf{M} \cdot \mathcal{F}\mathbf{M}, \quad (4.3)$$

em unidades adimensionais (com os momentos  $\mathbf{m}$  medidos em termos de um momento arbitrário  $\mu$  e comprimentos em termos do parâmetro da rede  $a$ , os campos são expressos em unidades de  $\mu/a^3$  e as energias em termos de  $\mu^2/a^3$ , unidades que serão utilizadas em tudo o que se segue). Esta forma quadrática pode ser diagonalizada (transformada numa soma de quadrados) através de uma rotação

#### 4. Redes de Dipolos Pontuais

do sistema de coordenadas. O novo sistema de coordenadas será dado pelos 24 vectores próprios de  $\mathcal{F}$ , sendo a energia de cada configuração básica o respectivo valor próprio, a partir dos quais se pode representar qualquer configuração e calcular a respectiva energia. Desta forma, o estado fundamental é dado por uma sobreposição de configurações básicas correspondentes ao máximo valor próprio de  $\mathcal{F}$ , com energia  $E = -2.676\mu^2/a^3$ . Uma configuração arbitrária  $\mathbf{M}$  do estado fundamental, para uma célula unitária de oito dipolos situados nos vértices de um cubo, é representada na forma

$$\begin{pmatrix} \mathbf{m}_1 \\ \mathbf{m}_2 \\ \mathbf{m}_3 \\ \mathbf{m}_4 \\ \mathbf{m}_5 \\ \mathbf{m}_6 \\ \mathbf{m}_7 \\ \mathbf{m}_8 \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \mathbf{i} + b \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \mathbf{j} + c \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \mathbf{k}, \quad (4.4)$$

ou seja, como uma sobreposição dos estados representados na figura 4.1.

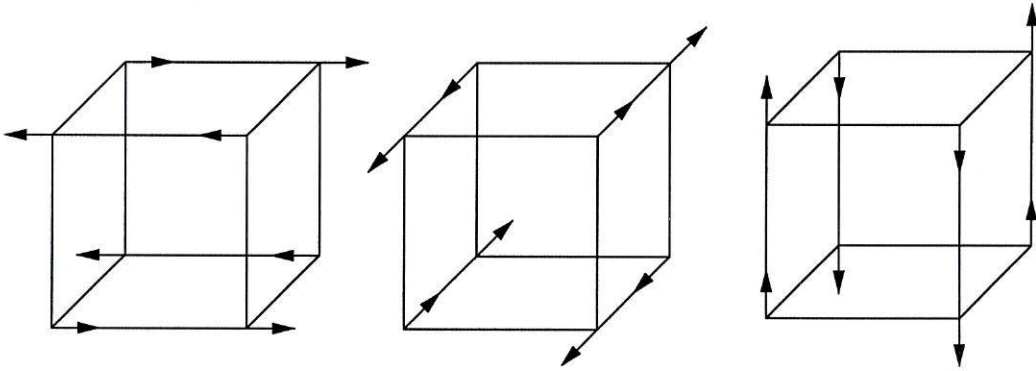


Figura 4.1.: Configurações básicas que permitem construir o estado fundamental de uma rede cúbica simples de dipolos pontuais.

Niemeyer [31] desenvolveu uma generalização deste método para sistemas quânticos de dipolos em redes de Bravais, com interações dipolares e de troca entre os átomos ou iões da rede, mas, como já vimos, o caso de pequenas partículas magnéticas é tratado classicamente.

## 4.2. Estado Fundamental Degenerado

Usando este método, Luttinger e Tisza concluíram que o estado fundamental para uma rede cúbica simples, correspondente ao valor próprio mais elevado, é antiferromagnético. Belobrov *et al.* [32] chegaram a uma solução mais geral, concluindo que o estado fundamental é continuamente degenerado em relação a dois parâmetros, sendo a configuração antiferromagnética um caso particular desta solução. O avanço em relação ao trabalho de Luttinger e Tisza consistiu em separar o número mínimo (quatro) de subredes de dipolos que permitisse uma configuração correspondente ao estado fundamental. Verificando que, na expressão 4.4, apenas quatro momentos em cada configuração básica são independentes (os dipolos situados ao longo das diagonais da célula unitária têm a mesma orientação), cada uma delas é descrita pelas orientações dos dipolos na face inferior da célula unitária, sendo o estado fundamental descrito por

$$\begin{pmatrix} \mathbf{m}_1 \\ \mathbf{m}_2 \\ \mathbf{m}_3 \\ \mathbf{m}_4 \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \mathbf{i} + b \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \mathbf{j} + c \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \mathbf{k}, \quad (4.5)$$

com as configurações básicas representadas na figura 4.2.

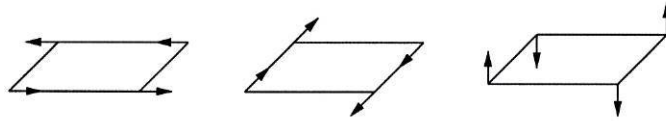


Figura 4.2.: Configurações básicas de menor dimensionalidade que permitem construir o estado fundamental de uma rede cúbica simples de dipolos pontuais.

Esta solução tem uma estrutura de vórtice esquematizada na figura 4.3, sendo os ângulos  $\psi$  e  $\chi$  arbitrários.

Numa rede quadrada de dipolos pontuais, o estado de micro-vórtice é descrito por uma direcção do momento  $\mathbf{m}$  em cada ponto da rede  $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$ ,  $n_1$  e  $n_2$  inteiros,

$$\mathbf{m}_{\mathbf{n},\chi}^{(MV)} = ((-1)^{n_2} \cos \chi, (-1)^{n_1} \sin \chi), \quad (4.6)$$

#### 4. Redes de Dipolos Pontuais

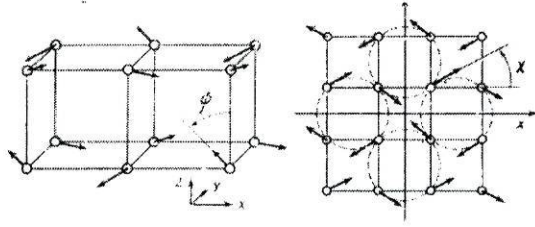


Figura 4.3.: Estado fundamental de uma rede cúbica de dipolos pontuais. Os ângulos  $\psi$  e  $\chi$  são parâmetros de degenerescência contínua [32].

( $\sin^2 \chi$  e  $\cos^2 \chi$  são os pesos de cada uma das duas primeiras configurações básicas da figura 4.2), e a energia por partícula (suposta situada na origem) é dada por

$$\begin{aligned}
 E^{(MV)} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} \left[ \frac{\mathbf{m}_{0,\chi} \cdot \mathbf{m}_{\mathbf{n},\chi}}{n^3} - 3 \frac{(\mathbf{m}_{0,\chi} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{m}_{\mathbf{n},\chi} \cdot \mathbf{n})}{n^5} \right] = \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{n_1, n_2} \left[ (-1)^{n_2} \frac{n_2^2 - 2n_1^2}{(n_1^2 + n_2^2)^{5/2}} \cos^2 \chi + (-1)^{n_1} \frac{n_1^2 - 2n_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)^{5/2}} \sin^2 \chi + \right. \\
 &\quad \left. -3 [(-1)^{n_1} + (-1)^{n_2}] \frac{n_1 n_2}{(n_1^2 + n_2^2)^{5/2}} \sin \chi \cos \chi \right]. \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

Para uma rede infinita, os coeficientes de  $\cos^2 \chi$  and  $\sin^2 \chi$  são iguais, enquanto que o coeficiente de  $\sin \chi \cos \chi$  é nulo. Sendo assim,

$$E^{(MV)} = \alpha \frac{\mu^2}{a^3}, \quad \text{com } \alpha = \frac{1}{2} \sum_{n_1, n_2} (-1)^{n_1} \frac{n_1^2 - 2n_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)^{5/2}} \simeq -2.55, \quad (4.8)$$

que é, de facto, independente do ângulo  $\chi$ . O estado ferromagnético tem energia

$$E^{(FM)} = -2.26 \frac{\mu^2}{a^3}, \quad (4.9)$$

isto é, uma diferença de  $0,29\mu^2/a^3$  que favorece o estado degenerado.

Será deste caso, de uma rede quadrada, que nos iremos ocupar, sendo esse também o que mais interesse suscita do ponto de vista das aplicações já referidas, mas o método de Luttinger e Tisza também foi aplicado pelos próprios a redes FCC e BCC e, desde então, a redes planares com um ângulo rômico arbitrário [33] e hexagonais (honeycomb) [34].

### 4.3. Condições para Levantamento da Degenerescência

A degenerescência do estado fundamental é, naturalmente, muito instável, podendo ser levantada ao reduzir a dimensionalidade dos sistemas, considerando sistemas finitos, incluindo efeitos de superfície ou com a aplicação de um campo [35]. Para um sistema bidimensional mantém-se a degenerescência em relação a um dos ângulos (no plano) enquanto que para um sistema unidimensional a degenerescência é completamente levantada.

Todos os cálculos anteriores consideraram redes infinitas mas as redes usadas nas simulações de Monte Carlo são finitas e até bastante pequenas, sendo necessário verificar até que ponto estes efeitos poderão alterar o comportamento termodinâmico dos sistemas. Outra solução seria, naturalmente, implementar condições de fronteira periódicas, sendo necessário recorrer ao método de somas de Ewald para tratar a interacção de longo alcance. No entanto, isto aumentaria em grande medida o peso computacional das simulações, não sendo ainda claro se não será mais eficaz continuar, simplesmente, a aumentar o tamanho dos sistemas.

No caso de redes quadradas planares, podemos observar os efeitos de considerar redes finitas na energia do estado fundamental calculado por Belobrov *et al.* [32] impondo uma configuração de vórtice no plano (figura 4.3) e calculando a energia em função do ângulo  $\chi$ . Em redes com um número par de partículas por lado, os termos proporcionais a  $\sin \chi \cos \chi$  não cancelam e a energia resulta proporcional a  $\sin 2\chi$  (figura 4.4) enquanto que nas redes com um número ímpar de dipolos por lado a energia não depende do ângulo  $\chi$ .

Da mesma forma, foram calculadas as diferenças entre as energias dos estado ferromagnético e antiferromagnético em função do tamanho da rede (figura 4.5). Como se pode ver, o estado antiferromagnético tem sempre uma energia inferior ao ferromagnético. A tracejado estão representados os valores calculados para redes infinitas, verificando-se uma convergência mais lenta no caso ferromagnético.

Como podemos ver, tanto a aplicação do método de Luttinger e Tisza à rede cúbica simples e à rede quadrada planar como o cálculo directo da energia na rede planar mostraram que o estado ferromagnético tem uma energia mais elevada do que o antiferromagnético. Por outro lado, como já vimos, experimentalmente verificou-se a existência de ferromagnetismo dipolar em redes planares de partí-

#### 4. Redes de Dipolos Pontuais

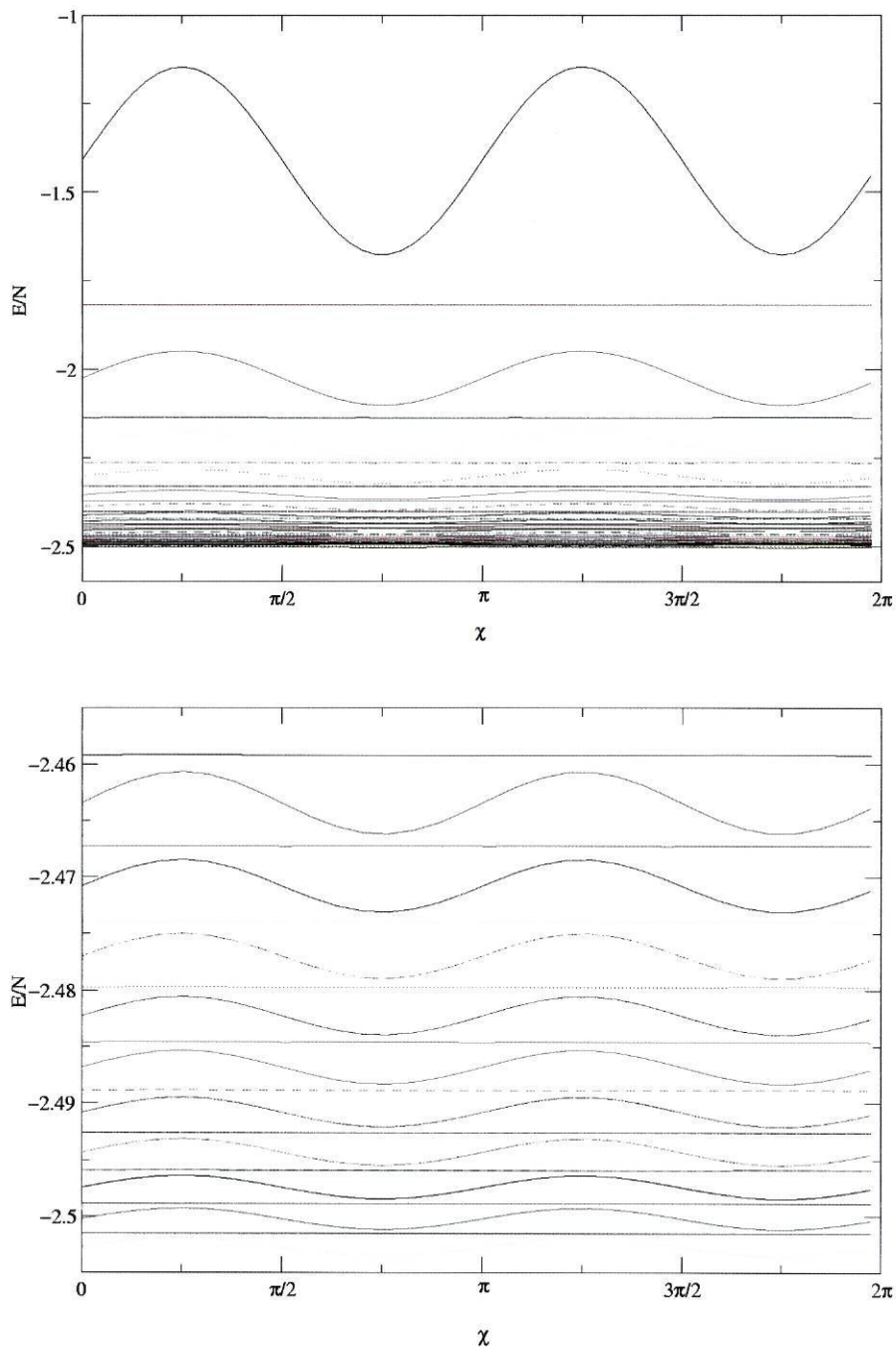


Figura 4.4.: Energia da configuração de vórtice planar para redes quadradas de lado 2 a 40, em função de  $\chi$ . O gráfico de baixo é uma ampliação do anterior, com as energias das redes de lado 21 a 40.

culas magnéticas, o que suscitou interesse no papel das correcções à aproximação de dipolos pontuais e da geometria da rede.

#### 4. Redes de Dipolos Pontuais

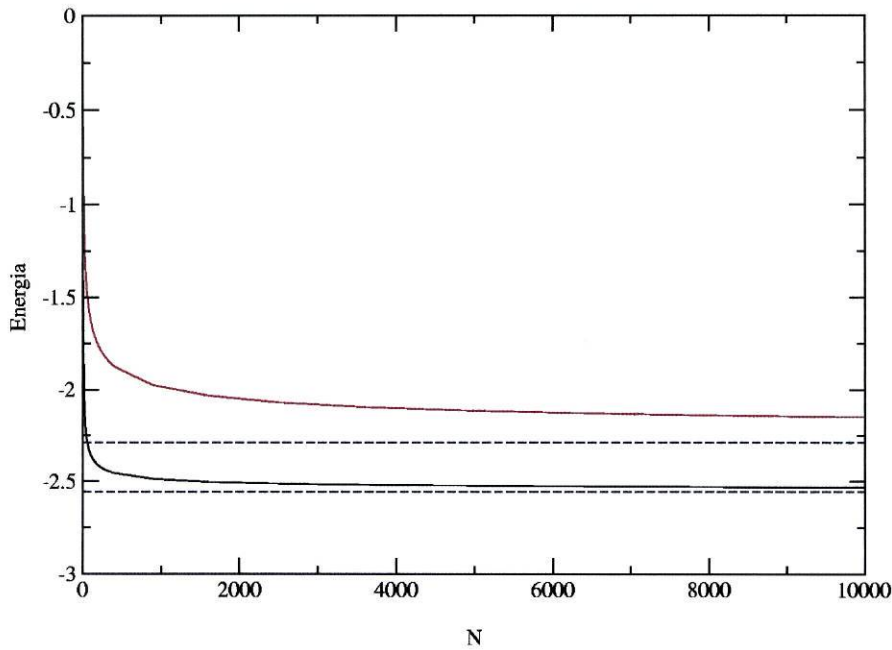


Figura 4.5.: Energia das configurações ferromagnética (a mais elevada) e antiferromagnética em função do número de dipolos numa rede quadrada.

#### 4.4. Redes Rectangulares

Calcular a diferença de energia entre os estados ferromagnético e antiferromagnético para uma rede quadrada é um procedimento simples, bastando somar diretamente as contribuições de pontos da rede dentro de um certo raio e substituir a soma sobre os pontos fora dessa região por um integral. Na verdade, para o cálculo da diferença de energia entre estes dois estados basta somar as contribuições das colunas alternadas que distinguem a configuração antiferromagnética da ferromagnética.

No limite em que um dos períodos é nulo a rede transforma-se numa sequência de fios infinitos que não produzem qualquer campo num ponto  $\mathbf{R}$  fora do fio,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dr (\mathbf{m} \cdot \nabla) \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} = 0, \quad (4.10)$$

pelo que não existe barreira energética entre os estados ferromagnético e antiferromagnético. No entanto, quando consideramos redes rectangulares (figura 4.6) com pontos  $r_i = (m_i, n_i\xi)$ , onde  $m_i$  e  $n_i$  são inteiros e  $0 < \xi < 1$ , não é tão simples definir os limites em cada uma das direcções de forma a garantir a convergência

#### 4. Redes de Dipolos Pontuais

das somas.

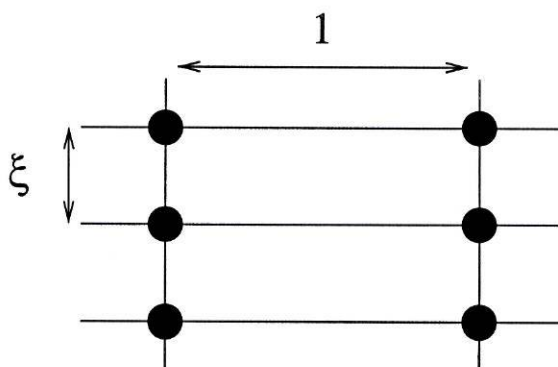


Figura 4.6.: Rede rectangular de dipolos pontuais, com assimetria  $\xi$ .

Para tal, foi usado em método semelhante ao utilizado para o cálculo de somas de Ewald, que permite calcular a soma até infinito da direcção com período  $\xi$ , tornando a soma segundo a direcção com período 1 rapidamente convergente.

A diferença de energia que pretendemos calcular é dada por

$$\Delta E(\xi) = 2 \sum_{m,n} \left( \frac{1}{((2m+1)^2 + \xi^2 n^2)^{3/2}} - 3 \frac{\xi^2 n^2}{((2m+1)^2 + \xi^2 n^2)^{5/2}} \right), \quad (4.11)$$

ou, com  $\xi' = \xi/(2m+1)$ ,

$$\Delta E(\xi) = 2 \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(2m+1)^3} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left( \frac{1}{(1 + \xi'^2 n^2)^{3/2}} - 3 \frac{\xi'^2 n^2}{(1 + \xi'^2 n^2)^{5/2}} \right). \quad (4.12)$$

Esta soma pode ser simplificada definindo

$$S(\xi) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(1 + \xi^2 n^2)^{3/2}} \quad (4.13)$$

e verificando que

$$\frac{dS(\xi)}{d\xi} = -3 \frac{\xi n^2}{(1 + \xi^2 n^2)^{5/2}}, \quad (4.14)$$

o que nos permite escrever a diferença de energia como

#### 4. Redes de Dipolos Pontuais

$$\Delta E(\xi) = 2 \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(2m+1)^3} \left( S(\xi') + \xi' \frac{dS(\xi')}{d\xi'} \right). \quad (4.15)$$

Usando a definição da função  $\Gamma$  de Euler e escrevendo

$$\frac{1}{r^3} = \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty e^{-r^2 u} \sqrt{u} du, \quad (4.16)$$

podemos representar a soma  $S(\xi')$  por um integral,

$$\begin{aligned} S(\xi') &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(1 + \xi'^2 n^2)^{3/2}} = \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty \sqrt{u} \left( \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-(1+\xi'^2 n^2)u} \right) du = \\ &= \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty \sqrt{u} e^{-u} \theta_3(e^{-\xi'^2 u}) du, \end{aligned} \quad (4.17)$$

onde

$$\theta_3(e^{-\xi'^2 u}) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (e^{-\xi'^2 u})^{n^2} \quad (4.18)$$

é a função elíptica Theta de Jacobi.

A derivada de  $S(\xi')$  pode ser escrita como

$$\xi' \frac{dS(\xi')}{d\xi'} = \frac{2}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty u^{3/2} e^{-u} \frac{\partial}{\partial u} (\theta_3(e^{-\xi'^2 u})) du \quad (4.19)$$

que pode ser integrada por partes, resultando em

$$S(\xi') + \xi' \frac{dS(\xi')}{d\xi'} = \frac{2}{\Gamma(3/2)} \left( \int_0^\infty (u-1) \sqrt{u} e^{-u} \theta_3(e^{-\xi'^2 u}) du \right), \quad (4.20)$$

expressão convergente e integrável numericamente. A diferença de energia, dada por

$$\Delta E(\xi) = 2 \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(2m+1)^3} \left( S(\xi/(2m+1)) + \xi \frac{dS(\xi/(2m+1))}{d\xi} \right) \quad (4.21)$$

é dominada pelo termo  $m = 0$ , ou seja,

$$\Delta E(\xi) \simeq \frac{4}{\Gamma(3/2)} \left( \int_0^\infty (u-1) \sqrt{u} e^{-u} \theta_3(e^{-\xi^2 u}) du \right). \quad (4.22)$$

#### 4. Redes de Dipolos Pontuais

Esta função é representada na figura 4.7, onde se vê que, para  $\xi = 1$ , reobtemos a barreira energética da rede quadrada  $\Delta E(1) = 0,29\mu^2/a^3$ .

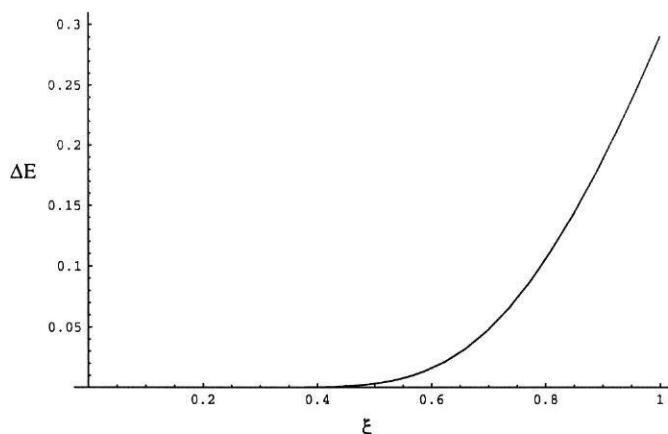


Figura 4.7.: Decaimento da diferença de energia entre o estado ferromagnético e antiferromagnético na rede rectangular com assimetria  $\xi$ .

O gráfico da figura 4.7 foi obtido integrando numericamente a expressão 4.22. Dividindo o integral de zero a infinito em  $1/\xi^2$  e utilizando, no intervalo  $[0, 1/\xi^2]$ , uma versão do método “Steepest Descent” no eixo real, verificou-se que, para  $\xi$  pequeno,

$$\Delta E \simeq \frac{16\pi^2}{\xi^{5/2}} e^{-\frac{2\pi}{\xi}}, \quad (4.23)$$

isto é, um comportamento não analítico no limite  $\xi \rightarrow 0$  mas que reproduz a curva obtida por integração numérica até  $\xi = 1$ .

Verifica-se, então, que o aumento a assimetria da rede faz com que a barreira de energia entre os estados ferromagnético e antiferromagnético decaia abruptamente, sendo já praticamente nula para  $\xi = 1/2$ , pelo que a aplicação de um campo magnético fraco é suficiente para seleccionar o estado ferromagnético. No sistema de Cowburn *et al.*, que vimos na secção anterior, os ciclos de histerese evidenciavam um comportamento ferromagnético a partir de  $\xi = 0.555$ , isto é, o aumento da assimetria da rede parece ser suficiente para o aparecimento de ordem ferromagnética, mesmo sem considerar os efeitos de tamanho finito das partículas, que iremos tratar no capítulo seguinte.

## 5. Para Além da Aproximação Pontual

No caso de partículas esféricas (figura 5.1), a energia de interacção magnetoestática entre elas é exactamente igual à energia de interacção entre dois dipolos pontuais [36] [37] mas a situação altera-se para qualquer outra forma das partículas.

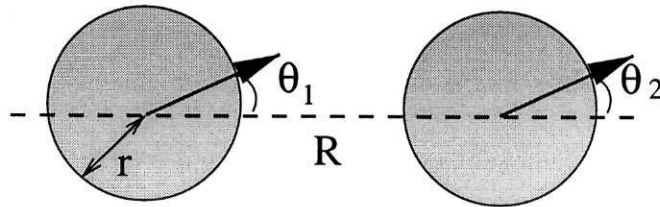


Figura 5.1.: Representação de duas esferas uniformemente magnetizadas.

A energia de interacção entre duas esferas magnetizadas uniformemente é dada por

$$E_{12} = \int_{V_1} d\mathbf{r}_1 \int_{V_2} d\mathbf{r}_2 \left[ \frac{\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2|^3} - 3 \frac{(\mathbf{m}_1 \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)) (\mathbf{m}_2 \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2))}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2|^5} \right] \quad (5.1)$$

$$= \int_{V_1} d\mathbf{r}_1 \int_{V_2} d\mathbf{r}_2 (\mathbf{m}_1 \cdot \nabla_1) (\mathbf{m}_2 \cdot \nabla_2) \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2|}. \quad (5.2)$$

onde  $\nabla_{1,2}$  designa os gradientes relativamente a  $\mathbf{r}_{1,2}$ . Integrando apenas em ordem a  $\mathbf{r}_1$  e usando o Teorema Generalizado de Stokes temos

$$\int_{V_1} d\mathbf{r}_1 (\mathbf{m}_1 \cdot \nabla_1) \frac{1}{|\mathbf{R}' - \mathbf{r}_1|} = \int_{S_1} \frac{\mathbf{m}_1 \cdot d\mathbf{S}_1}{|\mathbf{R}' - \mathbf{r}_1|} = \frac{M_1 \cos \theta}{R'^2}, \quad (5.3)$$

## 5. Para Além da Aproximação Pontual

exactamente o potencial escalar de um dipolo pontual, ou seja, o campo magnético produzido por uma esfera uniformemente magnetizada será igual ao campo dipolar arbitrariamente próximo da superfície, não apenas assintoticamente. O mesmo acontece quando integramos sobre a segunda esfera, pelo que recuperamos a energia de interacção entre dois dipolos pontuais

$$E_{12} = \frac{\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_2}{R^3} - 3 \frac{(\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{R})(\mathbf{M}_2 \cdot \mathbf{R})}{R^5} \quad (5.4)$$

com magnetização

$$\mathbf{M}_i = \int \mathbf{m}_i d\mathbf{r}_i. \quad (5.5)$$

Isto deve-se apenas à simetria esférica do problema, enquanto que nos modelos que iremos considerar, a uma ou duas dimensões, existem correcções à energia de interacção devido ao tamanho finito das partículas.

### 5.1. Dipolos Unidimensionais

O tamanho finito dos grânulos pode ser representado por diferentes modelos, como por exemplo elipsóides ou discos bidimensionais, cuja energia de interacção já apresenta correcções à energia de interacção entre dipolos pontuais. O modelo mais simples será considerar dipolos elementares, isto é, “polos” magnéticos separados por uma distância  $2d$  (figura 5.2).

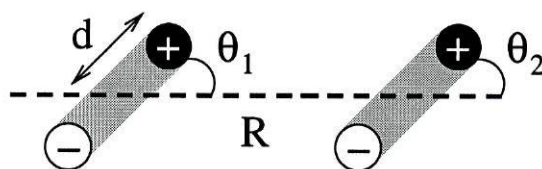


Figura 5.2.: Representação de dois dipolos finitos, com “polos”  $p_i = \pm 1$  e momento magnético  $\mu = 2d$ .

Neste caso, a energia de interacção é dada pelo integral unidimensional

$$\int_{-d}^d dr_1 \int_{-d}^d dr_2 (\mathbf{m}_1 \cdot \nabla_1) (\mathbf{m}_2 \cdot \nabla_2) \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2|}, \quad (5.6)$$

que, pelo teorema de Stokes, se reduz, simplesmente, ao potencial Coulombiano dos “polos”.

## 5. Para Além da Aproximação Pontual

Designando as projecções dos momentos por

$$\zeta_i = \frac{d}{R} \cos \theta_i, \quad \xi_i = \frac{d}{R} \sin \theta_i, \quad (5.7)$$

a energia de interacção é dada, exactamente, por

$$\begin{aligned} E = & \frac{1}{R} \frac{1}{\sqrt{1 - 2(\zeta_1 - \zeta_2) + (\zeta_1 - \zeta_2)^2 + (\xi_1 - \xi_2)^2}} \\ & + \frac{1}{R} \frac{1}{\sqrt{1 + 2(\zeta_1 - \zeta_2) + (\zeta_1 - \zeta_2)^2 + (\xi_1 - \xi_2)^2}} \\ & - \frac{1}{R} \frac{1}{\sqrt{1 - 2(\zeta_1 + \zeta_2) + (\zeta_1 + \zeta_2)^2 + (\xi_1 + \xi_2)^2}} \\ & - \frac{1}{R} \frac{1}{\sqrt{1 + 2(\zeta_1 + \zeta_2) + (\zeta_1 + \zeta_2)^2 + (\xi_1 + \xi_2)^2}}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

que pode ser expandida em série de Taylor, até quarta ordem em  $d$ ,

$$E = \frac{4}{R} [(\zeta_1 \zeta_2 + \xi_1 \xi_2) - 3\zeta_1 \zeta_2 \quad (5.9)$$

$$- 2\zeta_1 \zeta_2 (\zeta_1^2 + \zeta_2^2) - \frac{3}{4} \xi_1 \xi_2 (\xi_1^2 + \xi_2^2) + 3(\zeta_1 \zeta_2 (\xi_1^2 + \xi_2^2) + \xi_1 \xi_2 (\zeta_1^2 + \zeta_2^2))],$$

onde se identificam já os dois primeiros termos correspondentes à aproximação de dipolos pontuais. Esta expressão pode ser escrita ainda na forma de correcções à aproximação pontual em função do parâmetro  $\rho = d/R$ ,

$$\begin{aligned} E = & \frac{4}{R} \left[ (\zeta_1 \zeta_2 + \xi_1 \xi_2) \left( 1 - 3\rho^2 \left( 1 - 5 \frac{\cos^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_2}{2} \right) + \dots \right) \right. \\ & \left. - 3\zeta_1 \zeta_2 \left( 1 - 5\rho^2 \left( 1 - 7 \frac{\cos^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_2}{6} \right) + \dots \right) \right], \end{aligned} \quad (5.10)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} E = & \frac{m_1 \cdot m_2}{R^3} \left[ 1 - 3\rho^2 \left( 1 - 5 \frac{\cos^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_2}{2} \right) + \dots \right] \\ & - 3 \frac{m_{1z} m_{2z}}{R^3} \left[ 1 - 5\rho^2 \left( 1 - 7 \frac{\cos^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_2}{6} \right) + \dots \right]. \end{aligned} \quad (5.11)$$

A figura 5.3 apresenta uma comparação da energia calculada para a configura-

## 5. Para Além da Aproximação Pontual

ção ferromagnética “a” na figura 5.4 numa rede planar através da expansão para  $d$  pequeno, eq. 5.11, com o cálculo exacto, eq. 5.8.

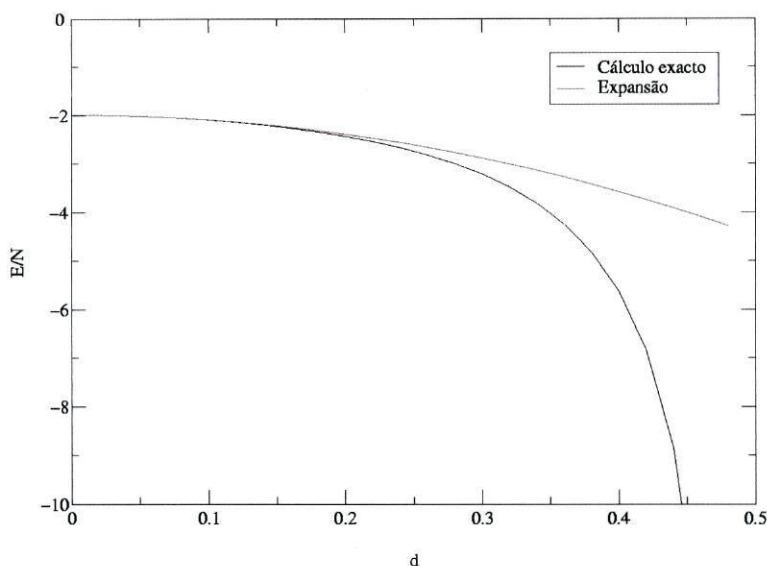


Figura 5.3.: Comparação da energia por partícula de uma rede quadrada ordenada ferromagneticamente calculada exactamente e na expansão para  $d$  pequeno.

O cálculo das energias de diversas configurações na rede planar mostra que estas correcções levantam, naturalmente, a degenerescência observada no caso de dipolos pontuais e diminuem significativamente a barreira energética entre os estados ferromagnético e antiferromagnético, o que irá determinar o comportamento do sistema quando sujeito a um campo externo.

Este modelo unidimensional para os dipolos não permite liberdade de rotação ao momento magnético, que pode ter apenas dois sentidos ao longo da direcção que une os dois polos. Sendo assim, as energias foram calculadas para um conjunto de configurações que pretendem caracterizar qualitativamente este modelo, configurações estas representadas na figura 5.4. Enquanto que nas configurações “a” e “b” as designações de estado ferromagnético e antiferromagnético têm o sentido tradicional, a configuração “c” representa um caso particular da configuração de micro-vórtice, considerada aqui como “antiferromagnético”, sendo o estado “ferro-

## 5. Para Além da Aproximação Pontual

magnético” caracterizado pela escolha do mesmo sentido dos momentos ao longo de um dos eixos da rede.

As diferenças de energia, em função de  $d$ , são apresentadas em cada gráfico 5.5 e 5.6, onde se pode ver que tendem a zero tanto na configuração “a” como na “b”, embora na configuração “b” o estado ferromagnético seja favorável para  $d$  pequeno. Este último caso é uma boa aproximação aos sistemas com comportamento ferromagnético estudados por Evoy *et al.*

É interessante verificar que na configuração “c”, derivada dos estados de microvórtice, a diferença de energia não se altera até  $d \simeq 0.5$ , divergindo rapidamente depois deste valor. Esta divergência deve-se ao facto de estarmos a considerar estruturas unidimensionais, sem espessura, pelo que a energia de interacção diverge próximo do contacto.

As energias da configuração “d” não foram calculadas, visto que nem é possível convencionar um estado ferromagnético e outro antiferromagnético como nas configurações anteriores. Esta configuração é composta por duas subredes de orientações perpendiculares e bastante independentes, visto que as interacções entre próximos vizinhos são nulas, pelo que pode constituir um modelo adequado a aplicações no campo da gravação magnética.

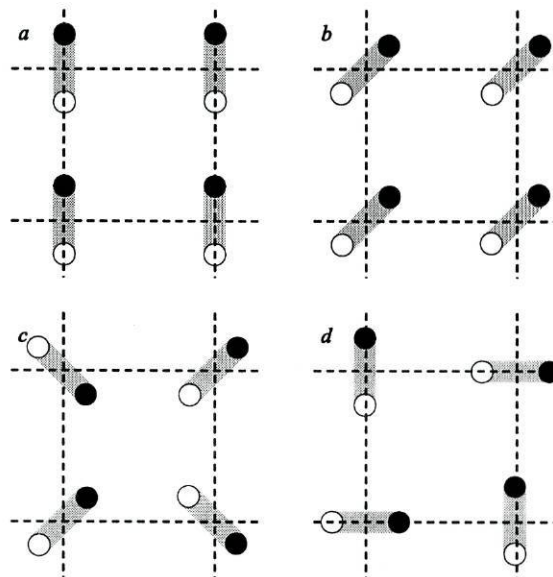


Figura 5.4.: Possíveis configurações das redes de dipolos elementares.

## 5. Para Além da Aproximação Pontual

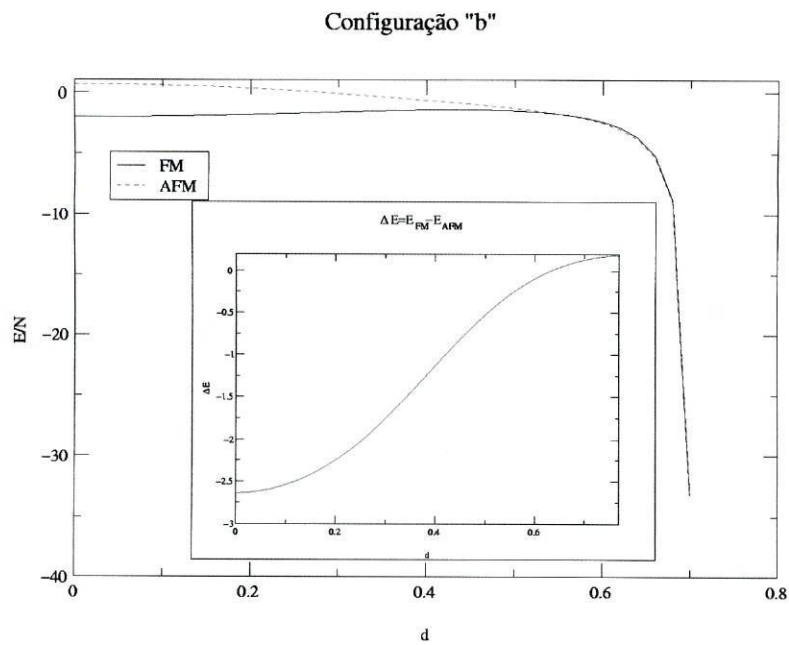
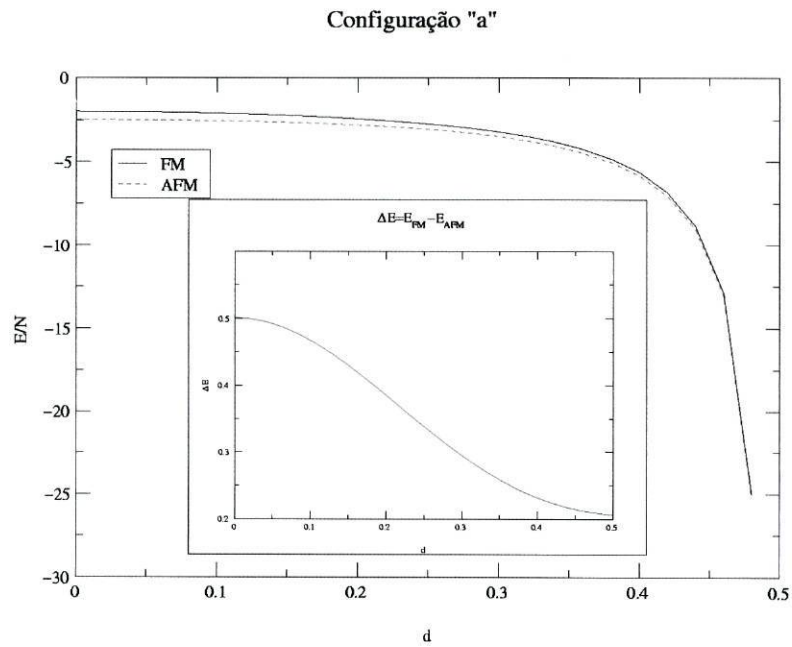


Figura 5.5.: Energia, em função do tamanho dos dipolos, das configurações "a" e "b", ordenadas ferro e antiferromagneticamente.

## 5. Para Além da Aproximação Pontual

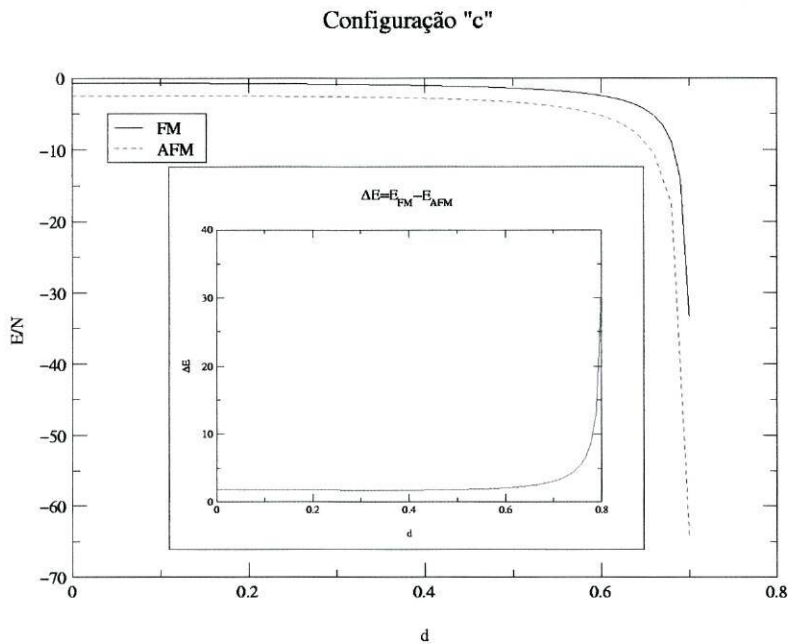


Figura 5.6.: Energias, em função do tamanho dos dipolos, da configuração "c" ordenada ferro e antiferromagneticamente.

### 5.2. Discos Bidimensionais

Outro modelo para pequenas partículas magnéticas consiste em considerar discos uniformemente magnetizados (figura 5.7), cuja energia de interação, ao contrário do que acontece no caso tridimensional das esferas magnéticas, apresenta também correcções à energia de interação entre dipolos pontuais.

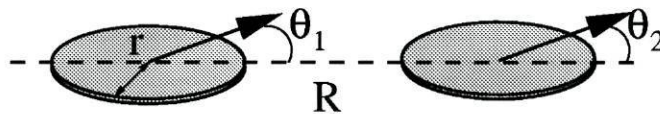


Figura 5.7.: Representação de dois discos uniformemente magnetizados.

## 5. Para Além da Aproximação Pontual

Considerando dois discos  $S_{1,2}$  de raio  $r$  e magnetizações  $\mathbf{m}_{1,2}$ , separados por  $\mathbf{R}$  ( $R > 2r$ ) a energia de interacção entre eles é dada por

$$E_{12} = \int_{S_1} d\mathbf{r}_1 \int_{S_2} d\mathbf{r}_2 \left[ \frac{\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2|^3} - 3 \frac{(\mathbf{m}_1 \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)) (\mathbf{m}_2 \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2))}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2|^5} \right] \quad (5.12)$$

Analogamente ao caso das esferas, esta expressão pode ser escrita em termos do potencial, na forma

$$E_{12} = \int_{S_1} d\mathbf{r}_1 \int_{S_2} d\mathbf{r}_2 (\mathbf{m}_1 \cdot \nabla_1) (\mathbf{m}_2 \cdot \nabla_2) \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2|}. \quad (5.13)$$

onde  $\nabla_{1,2}$  designa os gradientes relativamente a  $\mathbf{r}_{1,2}$ . O teorema de Stokes permite transformar os integrais sobre as áreas circulares  $S_{1,2}$  nos integrais angulares

$$E_{12} = \frac{m^2}{R} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \frac{\cos(\varphi_1 - \theta_1) \cos(\varphi_2 - \theta_2)}{\sqrt{1 - 2\rho(\cos\varphi_1 - \cos\varphi_2) + 2\rho^2[1 - \cos(\varphi_1 - \varphi_2)]}} \quad (5.14)$$

onde  $\varphi_{1,2}$  e  $\theta_{1,2}$  são os ângulos de  $\mathbf{R}$  com  $\mathbf{r}_{1,2}$  e  $\mathbf{m}_{1,2}$  respectivamente. Desta forma, a energia  $E_{12}$ , para determinadas direcções da magnetização, é uma função da razão  $\rho = r/R$ . Para discos suficientemente distantes, podemos considerar  $\rho$  um parâmetro pequeno e expandir, mais uma vez, o denominador em potências de  $\rho$ , desprezando os termos de ordem ímpar que não contribuem para o integral:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{1 - 2\rho(\cos\varphi_1 - \cos\varphi_2) + 2\rho^2[1 - \cos(\varphi_1 - \varphi_2)]}} = \\ & = 1 + \rho(\cos\varphi_1 - \cos\varphi_2) - \rho^2[1 - \cos(\varphi_1 - \varphi_2)] + \frac{3}{2}\rho^2(\cos\varphi_1 - \cos\varphi_2)^2 + \\ & + \frac{3}{2}\rho^4[1 - \cos(\varphi_1 - \varphi_2)]^2 - \frac{15}{2}\rho^4(\cos\varphi_1 - \cos\varphi_2)^2[1 - \cos(\varphi_1 - \varphi_2)] + \\ & + \frac{35}{8}\rho^4(\cos\varphi_1 - \cos\varphi_2)^4 + \dots \end{aligned} \quad (5.15)$$

A integração da Eq. 5.15 multiplicada por  $\cos(\varphi_1 - \theta_1) \cos(\varphi_2 - \theta_2)$  resulta

## 5. Para Além da Aproximação Pontual

na seguinte expansão para a energia de interacção

$$E_{12} = \frac{\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_2}{R^3} \left( 1 + \frac{3}{4}\rho^2 + \dots \right) - 3 \frac{(\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{R})(\mathbf{M}_2 \cdot \mathbf{R})}{R^5} \left( 1 + \frac{5}{4}\rho^2 + \dots \right) \quad (5.16)$$

onde  $M = \pi r^2 m$  é o momento magnético total do disco e os termos para além da unidade nas expressões entre parêntesis descrevem, mais uma vez, as correcções à aproximação de dipolos pontuais.

Já vimos que, numa rede quadrada, os termos correspondentes à aproximação pontual levam a um estado fundamental degenerado. Para verificarmos se a degenerescência do estado de micro-vórtice é levantada no caso de uma rede de discos magnéticos, consideramos a segunda correcção à energia do estado de micro-vórtice,

$$\begin{aligned} \Delta E^{(2)} &= \frac{3\rho^2}{4a^3} \sum_{\mathbf{n}} \left[ \frac{\mathbf{M}_0 \cdot \mathbf{M}_{\mathbf{n}}}{n^5} - 5 \frac{(\mathbf{M}_0 \cdot \mathbf{n})(\mathbf{M}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{n})}{n^7} \right] = \\ &= \frac{3\rho^2 M^2}{4a^3} \sum_{n_1, n_2} \left[ (-1)^{n_2} \frac{n_2^2 - 4n_1^2}{(n_1^2 + n_2^2)^{7/2}} \cos^2 \chi + (-1)^{n_1} \frac{n_1^2 - 4n_2^2}{(n_1^2 + n_2^2)^{7/2}} \sin^2 \chi + \right. \\ &\quad \left. + [(-1)^{n_1} + (-1)^{n_2}] \frac{n_1 n_2}{(n_1^2 + n_2^2)^{7/2}} \sin \chi \cos \chi \right]. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Esta correcção também se torna independente do ângulo  $\chi$  e o mesmo acontecerá com todas as correcções. Embora pareça que a degenerescência do estado de micro-vórtice se irá manter para qualquer valor de  $\rho < 1/2$ , isto não será verdade quando os discos estiverem perto de se tocarem, quando a distância  $\delta = 1 - 2\rho \ll 1$ .

Isto pode ser visto pelo comportamento assintótico da energia de interacção entre os discos no limite  $\delta \rightarrow 0$ . Neste caso, o termo mais importante é  $I \cos \theta_1 \cos \theta_2$  onde

$$I = \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \frac{\cos \varphi_1 \cos \varphi_2}{\sqrt{1 - 2\rho(\cos \varphi_1 - \cos \varphi_2) + 2\rho^2 [1 - \cos(\varphi_1 - \varphi_2)]}}, \quad (5.18)$$

que, devido à contribuição de  $\varphi_1 \approx 0$ ,  $\varphi_2 \approx \pi$ , diverge lentamente,  $\propto \ln 1/\delta$ . Isto pode ser visto através do cálculo do integral, figura 5.8, ou através de uma aproximação simples

$$I_{\delta \rightarrow 0} \rightarrow 4 \int_0^1 dx \int_0^x \frac{dy}{\sqrt{\delta^2 + y^2}} \approx 4 \ln \frac{2}{\delta}. \quad (5.19)$$

## 5. Para Além da Aproximação Pontual

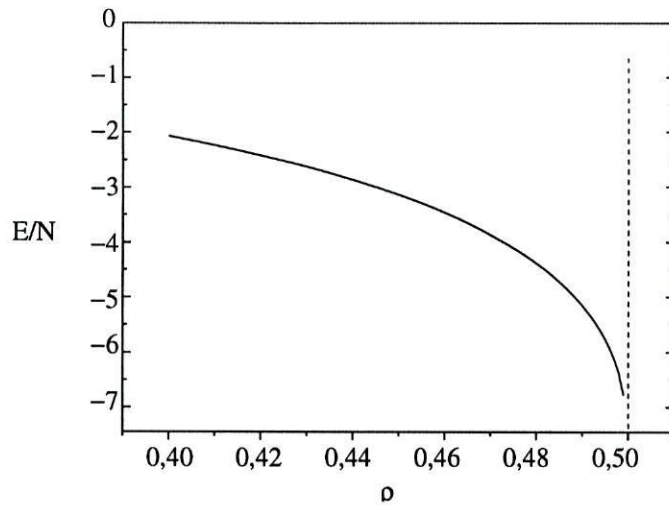


Figura 5.8.: Comportamento assintótico da energia de interacção dipolar entre dois discos magnetizados perto de se tocarem.

Esta contribuição é não analítica em  $1 - 2\rho$  e, por isso, não pode ser obtida somando a expansão em potências de  $\rho$ . No entanto, são estas contribuições que dominam a energia total entre os discos para  $\rho \rightarrow 1/2$ . Neste limite, podemos desprezar todas as interacções para além dos próximos vizinhos separados pelos vectores  $\Delta$  com  $|\Delta| = a$ :

$$E \approx -I \sum_{\mathbf{n}, \Delta} (\mathbf{m}_{\mathbf{n}} \cdot \Delta) (\mathbf{m}_{\mathbf{n}+\Delta} \cdot \Delta). \quad (5.20)$$

O estado fundamental para este regime é degenerado entre os estados de microvórtice e os estados ferromagnéticos

$$\mathbf{M}_{\mathbf{n}, \chi}^{(\text{FM})} = M (\cos \chi, \sin \chi), \quad (5.21)$$

mas esta degenerescência é rapidamente levantada com um campo magnético  $\mathbf{H}$  arbitrariamente pequeno, seleccionando um único estado ferromagnético orientado segundo  $\mathbf{H}$ .

Desta forma, concluímos que, nos sistemas estudados por Cowburn *et al.*, tanto o aumento da assimetria da rede como a utilização de discos circulares contribuem para o desaparecimento da barreira energética que separa os estados antiferromagnéticos ou degenerados do estado ferromagnético.

## Parte III.

# Temperaturas Baixas - Ondas Magnetoestáticas

## 6. Espectro de Excitações Magnéticas

Além da comparação directa das energias de diversas configurações, e ainda antes de ser necessária a aplicação de métodos de Monte Carlo, é possível obter mais informações sobre o comportamento destes sistemas, a baixas temperaturas, através da análise do espectro de excitações magnéticas.

No caso dos modelos tradicionais com interacção de troca, a forte correlação entre as direcções dos spins leva à existência de um tipo especial de modo colectivo em cristais ordenados - uma perturbação na direcção de um momento é propagada a todo o cristal na forma de um modo de movimento oscilatório. Estas ondas de spin foram descobertas por Bloch, propagam-se tanto a temperatura nula como finita e são caracterizadas por uma determinada dependência da frequência (energia) no vector de onda,

$$\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k}). \quad (6.1)$$

Para um ferromagnete tradicional (com interacção de troca) a dispersão é quadrática (a três dimensões - a duas dimensões é linear), para vectores de onda pequenos,

$$\varepsilon_{FM}(\mathbf{k}) \simeq I(ak)^2 \quad (6.2)$$

enquanto que um antiferromagnete isotrópico é caracterizado por dois modos, ambos com dispersão linear,

$$\varepsilon_{AFM}^{iso}(\mathbf{k}) \simeq Iak \quad (6.3)$$

e um antiferromagnete anisotrópico (com constante de anisotropia  $D$ ) por um

modo linear e outro quadrático,

$$\varepsilon_{AFM}^{aniso}(\mathbf{k}) \simeq \begin{cases} Iak \\ \sqrt{ID} + I(ak)^2 \end{cases} \quad (6.4)$$

Embora a interacção de troca tenha uma magnitude muito superior à interacção magnetoestática, a importância desta última pode ser verificada, por exemplo, nos filmes finos magnéticos, onde os efeitos da coexistência das duas interacções se fazem sentir no espectro de excitações e na definição do estado fundamental. Nos materiais granulares, por serem descontínuos, não existe interacção de troca entre os grânulos, o que suscitou interesse em caracterizar as ondas de spin em sistemas apenas sujeitos à interacção magnetoestática.

Pogorelov ([38]) calculou o espectro de excitações numa rede quadrada planar de dipolos pontuais, partindo do estado fundamental de Luttinger e Tisza com a degenerescência levantada através da aplicação de um pequeno campo magnético. Aqui apresentamos uma descrição desse trabalho e, depois, um tratamento semelhante, partindo de uma energia de interacção entre partículas com correcções à aproximação pontual proporcionais a  $\rho^2$  e de um estado fundamental ordenado ferromagneticamente.

## 6.1. Dipolos Pontuais

Pogorelov considerou uma rede quadrada em que cada ponto  $\mathbf{n} = a(n_x, n_y, 0)$  contém um grânulo esférico (dipolo pontual) com um momento magnético  $\mu_n$  (todos os momentos iguais e muito superiores a  $\mu_B$ ). A energia é dada pela soma do termo de Zeeman

$$E_Z = -\mathbf{H} \cdot \sum_n \mu_n \quad (6.5)$$

com a energia dipolar

$$E_d = \frac{1}{2} \sum_{n, \delta \neq 0} \left( (\mu_n \cdot \mu_{n+\delta}) - 3 (\mu_n \cdot \hat{\delta}) (\mu_{n+\delta} \cdot \hat{\delta}) \right) / \delta^3 \quad (6.6)$$

onde  $n$  e  $\delta$  percorrem os pontos da rede ( $\delta = a(\delta_x, \delta_y, 0)$  e  $\hat{\delta} = \delta/\delta$ ). Pogorelov partiu de um estado fundamental baseado na configuração de micro-vórtice de Belobrov *et al.*, com a degenerescência levantada por um campo magnético aplicado segundo o eixo  $x$  (figura 6.1), segundo o tratamento de Prakash e Henley [35].

## 6. Espectro de Excitações Magnéticas

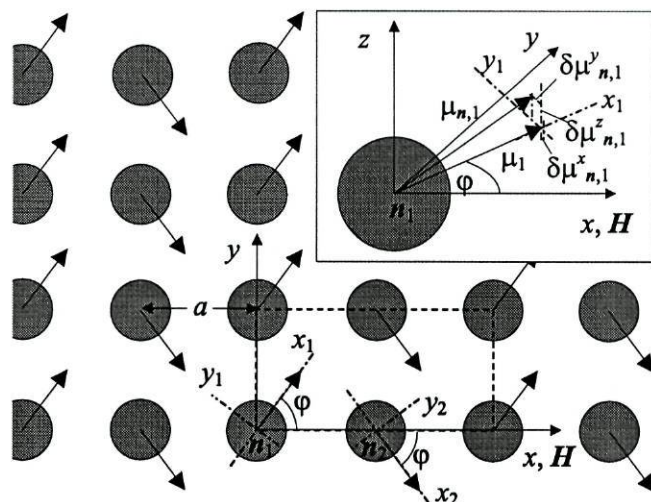


Figura 6.1.: Estado fundamental de dipolos magnéticos da célula unitária  $\mathbf{n}$  de uma rede quadrada sob campo aplicado segundo o eixo  $x$  e pequenos desvios à orientação do estado fundamental.

Desta forma, os momentos permanecem no plano e dividem-se em duas subredes ( $\alpha = 1, 2$ ), correspondendo a valores pares e ímpares de  $n_x$ , com orientações

$$\boldsymbol{\mu}_\alpha = \mu(\cos \varphi, (-1)^{\alpha-1} \sin \varphi, 0). \quad (6.7)$$

Minimizando a energia em ordem a  $\varphi$ , temos

$$\cos \varphi = h = H/H_s, \quad (6.8)$$

até ser atingido o campo de saturação  $H_s \simeq 0.589$ , correspondente ao aparecimento do estado ferromagnético  $\varphi = 0$ .

Considerando pequenos desvios  $\delta\mu_{n,\alpha}^y$  e  $\delta\mu_{n,\alpha}^z$  de cada momento em torno da direcção original, com a correspondente variação de

$$\delta\mu_{n,\alpha}^x = -((\delta\mu_{n,\alpha}^y)^2 + (\delta\mu_{n,\alpha}^z)^2)/2 \quad (6.9)$$

(por conveniência definimos  $\boldsymbol{\delta\mu}_n = (\delta\mu_n^x, \delta\mu_n^y, \delta\mu_n^z)$ ), podemos escrever a nova energia  $E = E_Z + E_d$  na forma  $E = -N\varepsilon_0 + E_{exc}$  (agrupando em  $E_{exc}$  os termos que incluem os desvios). Os desvios podem ser descritos por amplitudes de precessão complexas (adimensionais)  $\mu_{n,\alpha} e^{i\theta_{n,\alpha}}$  e expandidos em séries de Fourier,

## 6. Espectro de Excitações Magnéticas

$$\delta\mu_{n,\alpha}^y = \sqrt{2/N} \sum_k \psi_{\alpha,k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}_\alpha}, \quad \delta\mu_{n,\alpha}^z = \sqrt{2/N} \sum_k \zeta_{\alpha,k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}_\alpha}, \quad (6.10)$$

onde as amplitudes  $\psi$  e  $\zeta$  descrevem, respectivamente, desvios dentro e fora do plano.

A energia por partícula do estado fundamental,  $\varepsilon_0$  (figura 6.2), é quadrática no campo reduzido  $h$  para  $h < 1$ ,

$$\varepsilon_0(h < 1) = \varepsilon_d + h^2\varepsilon_s/2 \quad (6.11)$$

e linear no estado ferromagnético,

$$\varepsilon_0(h > 1) = \varepsilon_d + (h - 1/2)\varepsilon_s \quad (6.12)$$

( $\varepsilon_d \simeq 2.55$  e  $\varepsilon_s = \mu H_s \simeq 0.589$ ).

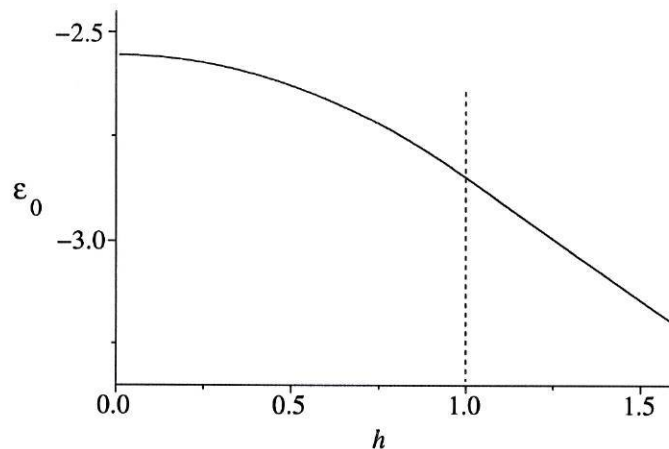


Figura 6.2.: Levantamento da degenerescência do estado fundamental por um campo aplicado - a energia é quadrática em  $h$  para  $h < 1$  e linear para  $h > 1$ .

Considerando apenas termos até segunda ordem em  $\delta\mu_n^y$  e  $\delta\mu_n^z$ , a energia de excitação é dada por

$$E_{exc} = \sum_{k,\alpha,\alpha'} \left( \psi_{\alpha,k}^* A_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) \psi_{\alpha',k} + \zeta_{\alpha,k}^* B_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) \zeta_{\alpha',k} \right), \quad (6.13)$$

## 6. Espectro de Excitações Magnéticas

com

$$\hat{A}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \Omega_k & \Sigma_k \\ \Sigma_k & \Omega_k \end{pmatrix}, \quad \hat{B}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \Theta_k & \Xi_k \\ \Xi_k & \Theta_k \end{pmatrix}, \quad (6.14)$$

$$\begin{aligned} \Omega_k &= \omega_{1k} + \omega_{2k} \cos^2 \varphi & \Theta_k &= \theta_{1k} + \theta_{2k} \cos^2 \varphi \\ \Sigma_k &= \sigma_{1k} - \sigma_{2k} \cos^2 \varphi & \Xi_k &= \sigma_{2k} \end{aligned} \quad (6.15)$$

e

$$\begin{aligned} \omega_{1k} &= \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \left[ \left( 3 \frac{n_{1x}^2}{n_1^5} - \frac{1}{n_1^3} \right) (1 - \gamma_{\mathbf{n}1, \mathbf{k}}) + \frac{3}{n_1^3} \right] - \sum_{\mathbf{n}} \left( 6 \frac{n_{2y}^2}{n_2^5} + \frac{1}{n_2^3} \right), \\ \omega_{2k} &= \frac{\varepsilon_s}{2} + 3 \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \left( 2 \frac{n_{1x}^2}{n_1^5} - \frac{1}{n_1^3} \right) (1 - \gamma_{\mathbf{n}1, \mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{n_2^3}, \\ \theta_{1k} &= \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \left( \frac{2 + \gamma_{\mathbf{n}1, \mathbf{k}}}{n_1^3} - 3 \frac{n_{1x}^2}{n_1^5} \right) - \sum_{\mathbf{n}} \left( 3 \frac{n_{2y}^2}{n_2^5} - \frac{1}{n_2^3} \right), \end{aligned} \quad (6.16)$$

$$\theta_2 = 3 \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \frac{n_{1x}^2 - n_{1y}^2}{n_1^5} + \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{n_2^3},$$

$$\sigma_{1\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{n}} \left( 3 \frac{n_{2x}^2}{n_2^5} - \frac{1}{n_2^3} \right) \gamma_{\mathbf{n}2, \mathbf{k}}, \quad \sigma_{2\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{n}} \frac{\gamma_{\mathbf{n}2, \mathbf{k}}}{n_2^3}, \quad \gamma_{\mathbf{n}\alpha, \mathbf{k}} = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_\alpha).$$

As energias dos quatro modos normais  $\varepsilon_y^\pm(\mathbf{k})$  ( $\psi_k^\pm = \psi_{1k} \pm \psi_{2k}$ ) e  $\varepsilon_z^\pm(\mathbf{k})$  ( $\zeta_k^\pm = \zeta_{1k} \pm \zeta_{2k}$ ) são dadas pelos valores próprios das matrizes  $\hat{A}(\mathbf{k})$  e  $\hat{B}(\mathbf{k})$ , respectivamente, ou seja

$$\varepsilon_y^\pm(\mathbf{k}) = \Omega_k \pm \Sigma_k, \quad \varepsilon_z^\pm(\mathbf{k}) = \Theta_k \pm \Xi_k. \quad (6.17)$$

As curvas de dispersão para  $\varepsilon_{y,z}(\mathbf{k}) \equiv \varepsilon_{y,z}^-(\mathbf{k})$  ( $\varepsilon_{y,z}^+(\mathbf{k}) = \varepsilon_{y,z}^-(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ ,  $\mathbf{Q} = (1, 0, 0)\pi/a$ ) são apresentadas na figura 6.4, para diferentes valores do campo aplicado. Entre as principais características encontra-se a existência de dois pontos nodais (não variam com o campo aplicado) e a forma peculiar das curva no centro da zona de Brillouin (figura 6.3).

## 6. Espectro de Excitações Magnéticas

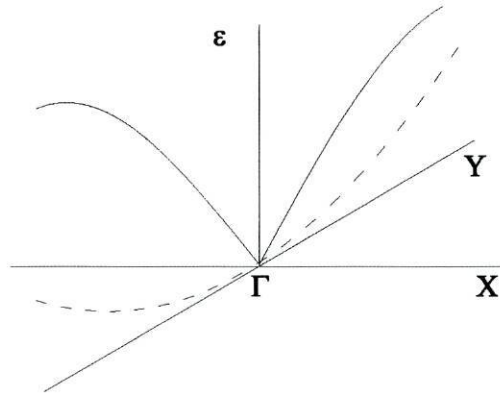


Figura 6.3.: No limite  $k \rightarrow 0$ ,  $\varepsilon_k^y$  é linear na direção  $\Gamma - X$  e quadrática na direção  $\Gamma - Y$ .

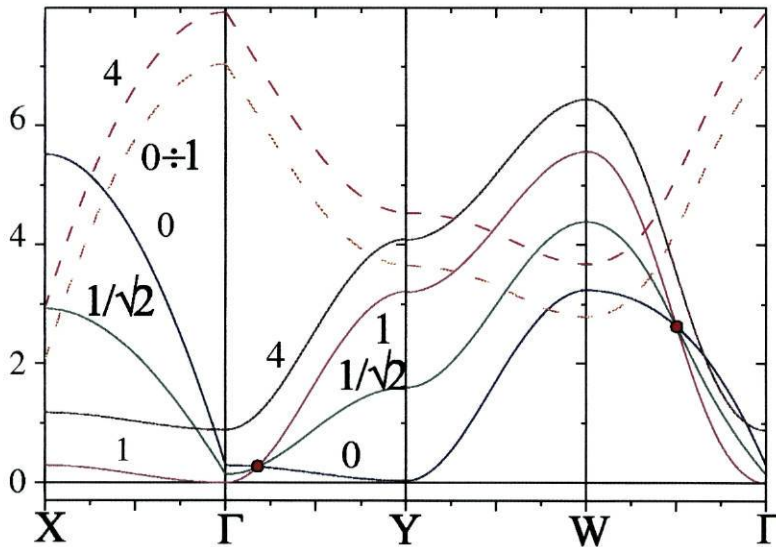


Figura 6.4.: Curvas de dispersão para os modos “no plano” (linhas sólidas) e “fora do plano” (tracejado) para diferentes valores do campo  $h$ .

## 6.2. Grandezas Termodinâmicas

Partindo da energia  $E = -N\varepsilon_0 + E_{exc}$ , podemos escrever a função de partição

$$Z = \int d\psi_k d\zeta_k e^{-\beta E} \quad (6.18)$$

na forma

$$Z = e^{\beta N\varepsilon_0} \int d\psi_k d\zeta_k e^{-\beta E_{exc}} = e^{\beta N\varepsilon_0} \prod_k \int d\psi_k d\zeta_k e^{-\beta(\varepsilon_k^y \psi_k^2 + \varepsilon_k^z \zeta_k^2)}. \quad (6.19)$$

## 6. Espectro de Excitações Magnéticas

Para temperaturas suficientemente baixas, tais que  $\varepsilon_k^j \gg \beta^{-1}$ ,  $j = y, z$ , integramos em  $d\psi_k$  e  $d\zeta_k$ , tal que

$$Z = e^{N(\beta\varepsilon_0 + \ln \pi)} \prod_{k,j} (\beta\varepsilon_k^j)^{-1/2}, \quad (6.20)$$

enquanto que a energia livre por grânulo é dada por

$$f = -(N\beta)^{-1} \ln Z = -\varepsilon_0 + (\beta)^{-1} \ln \pi - \frac{1}{2}(N\beta)^{-1} \sum_{k,j} \ln (\beta\varepsilon_k^j), \quad (6.21)$$

o que resulta na expressão para a magnetização normalizada por grânulo

$$m = -\frac{1}{\varepsilon_s} \frac{\partial f}{\partial H} = h - \frac{1}{N\beta\varepsilon_s} \sum_{k,j} \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial h} \frac{1}{\varepsilon_{j(\mathbf{k})}}. \quad (6.22)$$

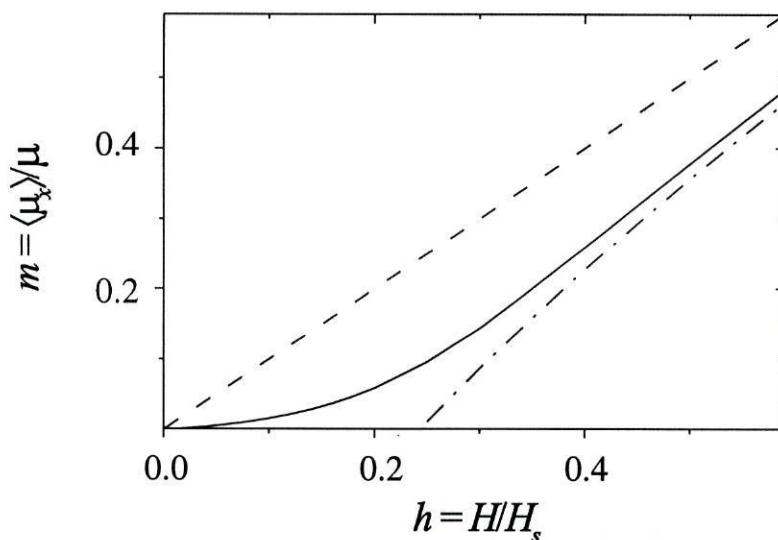


Figura 6.5.: Magnetização em função do campo aplicado e da temperatura.

A linha a tracejado na figura 6.5 refere-se a temperatura nula, ou seja,  $m = h$ . Neste caso, a susceptibilidade é dada por

$$\chi = \frac{dm}{dH} = \frac{1}{H_s}. \quad (6.23)$$

As curvas sólida e “ponto-traço” referem-se a  $\beta^{-1} = 0.01$ , tendo esta última sido calculada para  $h \rightarrow 1$  e a linha sólida resolvendo a equação 6.22 de forma auto-

## 6. Espectro de Excitações Magnéticas

consistente, para  $m \ll h$ . Esta expressão permitiu chegar à seguinte expressão para a susceptibilidade inversa em função da temperatura,

$$\chi^{-1} \simeq H_s + 4\pi\alpha T \ln \frac{\alpha_x}{T} \quad (6.24)$$

(com  $\alpha = 10.6$  e  $\alpha_x = 0.3$ ).

Depois de calculada a magnetização  $m$ , o parâmetro de ordem de longo alcance, é necessário considerar o parâmetro de ordem de curto alcance,

$$C_\delta = \frac{\langle \boldsymbol{\mu}_n \cdot \boldsymbol{\mu}_{n+\delta} \rangle}{\mu^2}, \delta = a. \quad (6.25)$$

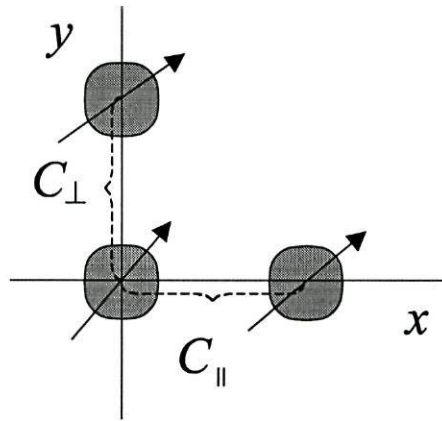


Figura 6.6.: Correlações transversais e longitudinais.

Relativamente à direção do campo, distinguimos as correlações transversais e longitudinais (figura 6.6), que podem ser calculadas multiplicando os termos  $\boldsymbol{\mu}_n \cdot \boldsymbol{\mu}_{n+\delta}$  com  $\delta_x, \delta_y = \pm a$  pelos factores auxiliares  $1 + \eta_{\perp, \parallel}$  (no resultado final faremos  $\eta_i = 0$ ) e escrevendo

$$C_i = -\frac{\partial f}{\partial \eta_i}, i = \perp, \parallel, \quad (6.26)$$

$$C_{\parallel, \perp} = \left( 1 - (N\beta)^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 \mp \cos(ak_{y,x})}{\varepsilon_y(\mathbf{k})} \right) C_{\perp, \parallel}^{(0)}, \quad (6.27)$$

$$C_{\perp}^{(0)} = 1, \quad C_{\parallel}^{(0)} = -1 + 2h^2.$$

Na figura 6.7 o estilo das curvas corresponde às mesmas temperaturas e métodos que na figura 6.5. Quando  $h \rightarrow 1$  a diferença entre  $C_{\perp}$  e  $C_{\parallel}$  desaparece.

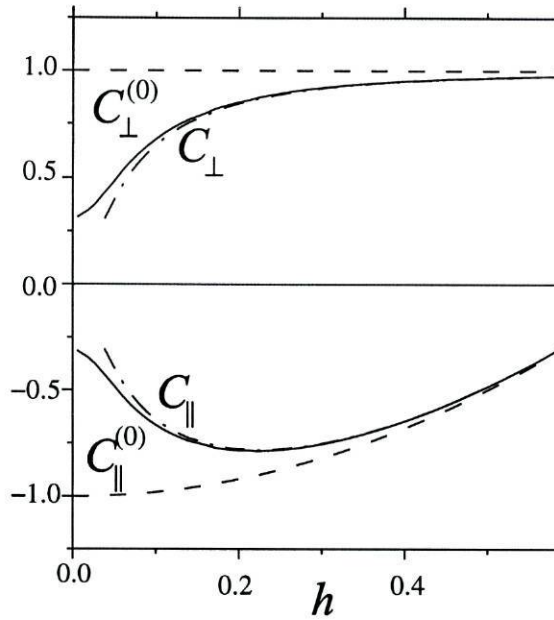


Figura 6.7.: Correlações transversais e longitudinais em função do campo aplicado e da temperatura.

### 6.3. Dipolos Finitos

Antecipando a possibilidade de determinada forma das partículas e/ou geometria da rede vencerem por completo a barreira de energia, tornando o estado ferromagnético mais favorável mesmo a campo nulo, a análise anterior foi continuada para partículas não pontuais.

Incluído os factores de correcção à energia de interacção dipolar entre as partículas,

$$E_d = \frac{1}{2} \sum_{n, \delta \neq 0} \left( (\boldsymbol{\mu}_n \cdot \boldsymbol{\mu}_{n+\delta}) (1 - \alpha\rho^2) - 3 (\boldsymbol{\mu}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\delta}}) (\boldsymbol{\mu}_{n+\delta} \cdot \hat{\boldsymbol{\delta}}) (1 - \beta\rho^2) \right) / \delta^3, \quad (6.28)$$

e supondo  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\rho$  tais que a energia do estado ferromagnético seja inferior à do estado antiferromagnético, partimos de um estado fundamental ordenado ferromagneticamente e calculamos a nova energia de excitação.

Neste caso, ao contrário do tratamento anterior, não existem subredes, pelo que o cálculo torna-se mais simples. Considerando, mais uma vez, pequenos desvios  $\delta\mu_n^y$  e  $\delta\mu_n^z$  de cada momento em torno da direcção original, com a correspondente variação de  $\delta\mu_n^x = -((\delta\mu_n^y)^2 + (\delta\mu_n^z)^2)/2$  escrevemos a nova energia  $E = E_Z + E_d$ ,

## 6. Espectro de Excitações Magnéticas

com

$$E_Z = -\mathbf{H} \cdot \sum_n (\boldsymbol{\mu}_n + \boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\mu}_n) \quad (6.29)$$

e

$$E_d = \frac{1}{2} \sum_{n, \delta \neq 0} [((\boldsymbol{\mu}_n + \boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\mu}_n) \cdot (\boldsymbol{\mu}_{n+\delta} + \boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\mu}_{n+\delta})) (1 - \alpha\rho^2) / \delta^3 - 3 ((\boldsymbol{\mu}_n + \boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\mu}_n) \cdot \hat{\boldsymbol{\delta}}) ((\boldsymbol{\mu}_{n+\delta} + \boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\mu}_{n+\delta}) \cdot \hat{\boldsymbol{\delta}}) (1 - \beta\rho^2) / \delta^3] \quad (6.30)$$

na forma

$$E = -N\varepsilon_0 + E_{exc} \quad (6.31)$$

(agrupando em  $E_{exc}$  os termos que incluem os desvios), onde

$$-N\varepsilon_0 = -NH + \frac{N}{2} \sum_{\delta \neq 0} (1 - \alpha\rho^2) / \delta^3 - 3\delta_x^2 (1 - \beta\rho^2) / \delta^5 \quad (6.32)$$

e

$$E_{exc} = -H \sum_n \delta\mu_n^x + \frac{1}{2} \sum_{n, \delta \neq 0} [((\delta\mu_n^x + \delta\mu_{n+\delta}^x) + \boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\mu}_n \cdot \boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\mu}_{n+\delta}) * (1 - \alpha\rho^2) - 3 ((\boldsymbol{\mu}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\delta}}) (\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\mu}_{n+\delta} \cdot \hat{\boldsymbol{\delta}}) + (\boldsymbol{\mu}_{n+\delta} \cdot \hat{\boldsymbol{\delta}}) (\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\mu}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\delta}}) + (\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\mu}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\delta}}) (\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\mu}_{n+\delta} \cdot \hat{\boldsymbol{\delta}})) (1 - \beta\rho^2)] / \delta^3. \quad (6.33)$$

Os desvios são expandidos em séries de Fourier,

$$\delta\mu_n^y = \sqrt{1/N} \sum_k \psi_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}}, \quad \delta\mu_n^z = \sqrt{1/N} \sum_k \zeta_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}}. \quad (6.34)$$

e, considerando apenas termos até segunda ordem em  $\delta\mu_n^y$  e  $\delta\mu_n^z$ , a energia de excitação é dada por

$$E_{exc} = \sum_k (\varepsilon_k^y \psi_k^2 + \varepsilon_k^z \zeta_k^2), \quad (6.35)$$

## 6. Espectro de Excitações Magnéticas

com

$$\varepsilon_k^y = \sum_{\delta \neq 0} \left( (e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} - 1) (1 - \alpha\rho^2) / \delta^3 - 3 (e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} - 1) \delta_y^2 (1 - \beta\rho^2) / \delta^5 \right) - H \quad (6.36)$$

e

$$\varepsilon_k^z = \sum_{\delta \neq 0} \left( (e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} - 1) (1 - \alpha\rho^2) / \delta^3 + 3\delta_y^2 (1 - \beta\rho^2) / \delta^5 \right) - H. \quad (6.37)$$

As curvas de dispersão são apresentadas nas figuras 6.8 e 6.9, para diferentes valores de  $\rho$  e com  $\alpha$  e  $\beta$  fixos, escolhidos de forma a garantir um estado fundamental ferromagnético para  $\rho_0 < 1/2$ . Para  $\rho_0$  menor do que um certo valor crítico, a energia  $\varepsilon_k^y$  é negativa na direcção  $\Gamma - Y$ , acusando uma instabilidade em relação ao estado fundamental escolhido, pelo que o valor crítico pode ser encontrado a partir do desaparecimento desta instabilidade.

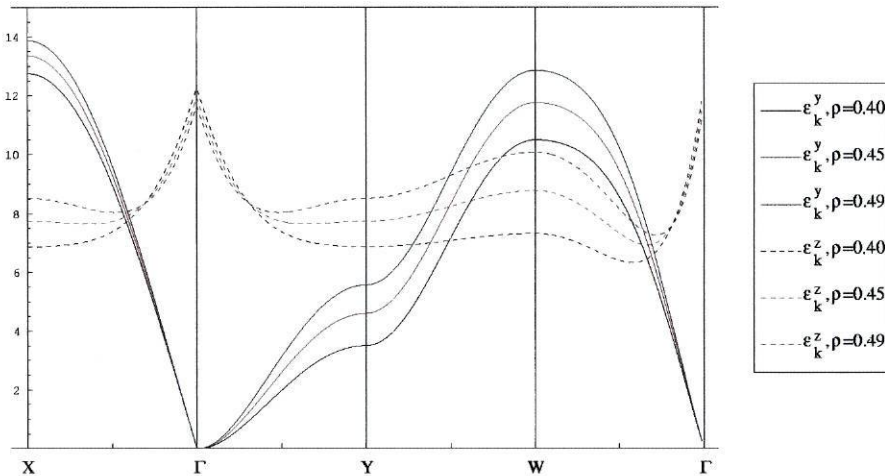


Figura 6.8.: Curvas de dispersão para  $\alpha = 5, \beta = 1$  e  $\rho = 0.4, 0.45, 0.49$ .

Como se pode ver na figura 6.8, o espectro das excitações no plano torna-se mais estável com o aumento de  $\rho$ . Na figura 6.9 podemos ver a forma particular da superfície energética de  $\varepsilon_k^y$ , que apresenta um “vinco” ao longo direcção  $\Gamma - Y$  (a derivada da energia é descontínua para qualquer direcção diferente de  $\Gamma - Y$ ), que também se tinha verificado no caso da rede de dipolos pontuais.

Uma análise completa das propriedades termodinâmicas será feita uma vez encontrados os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  mais relevantes para o estudo das redes de partículas magnéticas de tamanho finito.

6. Espectro de Excitações Magnéticas

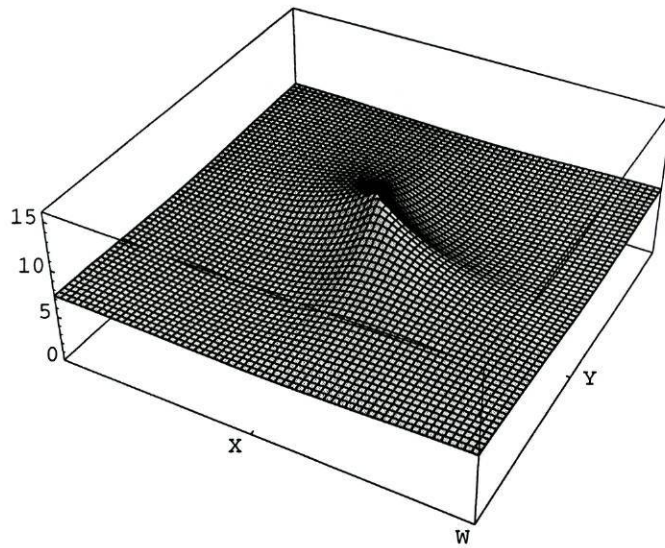
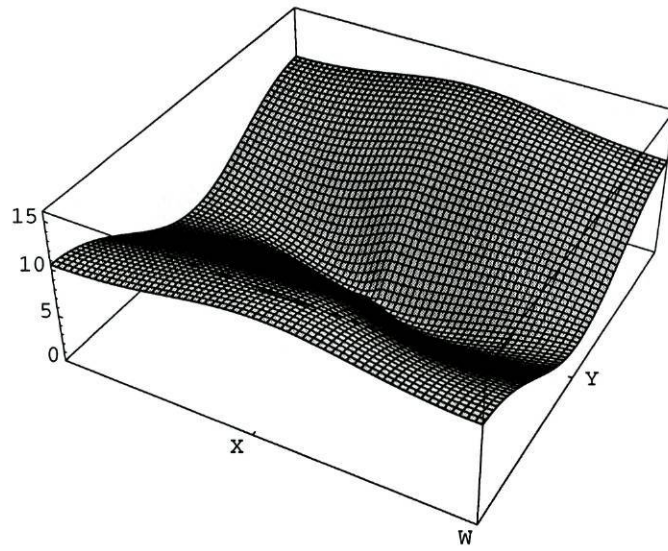


Figura 6.9.:  $\epsilon_k^y$  e  $\epsilon_k^z$  para  $\alpha = 5, \beta = 1$  e  $\rho = 0.4$ .

## Parte IV.

# Temperatura Genérica - Simulações de Monte Carlo

# 7. Revisão de Métodos de Monte Carlo

Usar simulações de Monte Carlo para estudar estes sistemas de pequenas partículas magnéticas com interacção dipolar revela-se mais problemático do que poderia parecer à primeira vista. Para começar, a interacção é de longo alcance e anisotrópica e, como os momentos podem ter qualquer orientação, o espectro de energias é contínuo. No entanto, a maior dificuldade prende-se com o aparecimento de uma fase do tipo vidro de spin que, à partida, tanto pode ser física, consequência do comportamento superparamagnético que descrevemos, como pode não passar de uma deficiência do algoritmo utilizado na amostragem do espaço de fase.

## 7.1. Introdução

A Física Estatística de sistemas em equilíbrio baseia-se no conceito de função de partição, que contém toda a informação essencial sobre um determinado sistema. A forma geral da função de partição de um sistema clássico é

$$Z = \sum e^{-\beta\mathcal{H}} \quad (7.1)$$

( $\beta = 1/k_B T$ ,  $\mathcal{H} = \text{Hamiltoniano}$ ).

Esta soma compreende todos os estados possíveis do sistema e, por isso, depende do tamanho do sistema e do número de graus de liberdade, o que implica que só pode ser calculada exactamente para sistemas pequenos ou com interacções muito simples entre as partículas.

A probabilidade de um sistema se encontrar num determinado estado  $C$  é determinada pela função de partição,

## 7. Revisão de Métodos de Monte Carlo

$$P_C = \frac{e^{-\beta E_C}}{Z}, \quad (7.2)$$

assim como propriedades termodinâmicas derivadas da energia livre,

$$F = -\beta^{-1} \ln Z. \quad (7.3)$$

O objectivo comum de uma simulação de Monte Carlo de um sistema em equilíbrio térmico é o cálculo de um valor médio  $\langle Q \rangle$  de uma determinada observável  $Q$  (Energia, Magnetização, etc.). Estes cálculos envolvem a avaliação de somas ou integrais em espaços de fase multidimensionais intratáveis por métodos numéricos não probabilísticos. É necessário limitar o espaço a uma amostra estatística que conduza a uma boa estimativa para o valor da soma. Os métodos de integração de Monte Carlo escolhem os pontos a considerar aleatoriamente, quer com uma distribuição uniforme quer com uma distribuição que permita visitar com maior probabilidade os pontos que mais contribuem para o resultado final (“importance sampling”). As simulações de Monte Carlo baseiam-se na mesma ideia mas, neste caso, a simulação percorre o espaço de fase de acordo com uma determinada dinâmica, uma regra para transições entre estados que garante que cada estado seja visitado, no limite assintótico, com a probabilidade desejada. No entanto, como iremos ver, a dinâmica que permite encontrar as configurações mais relevantes pode impedir a simulação de encontrar outras configurações.

### 7.2. Cadeias de Markov

A forma de estabelecer a dinâmica tal que cada estado seja visitado com a probabilidade desejada baseia-se no conceito de processos de Markov, onde cada estado proposto é gerado a partir do anterior de acordo com uma probabilidade de transição que depende da diferença de energia entre os estados inicial e final. Isto dá origem a uma evolução “temporal” que pode ser descrita pela equação mestra

$$\frac{\partial p_C(t)}{\partial t} = - \sum_{C \neq C'} (p_C(t)W_{C \rightarrow C'} - p_{C'}(t)W_{C' \rightarrow C}), \quad (7.4)$$

onde  $p_C(t)$  é a probabilidade do sistema se encontrar num estado  $C$  no instante  $t$  e  $W_{C \rightarrow C'}$  é a taxa de transição do estado  $C$  para  $C'$ . Se esta taxa de transição

## 7. Revisão de Métodos de Monte Carlo

respeitar o princípio de “detailed balance”

$$p_C(t)W_{C \rightarrow C'} = p_{C'}(t)W_{C' \rightarrow C}. \quad (7.5)$$

existirá uma solução de equilíbrio

$$\frac{\partial p_C(t)}{\partial t} = 0 \quad (7.6)$$

no limite  $t \rightarrow \infty$ . Quando escolhermos

$$W_{C \rightarrow C'} = \begin{cases} \frac{p_{C'}}{p_C} & p_{C'} > p_C \\ 1 & p_{C'} < p_C \end{cases} \quad (7.7)$$

o princípio de “detailed balance” é automaticamente satisfeito e  $p$  será a distribuição assintótica gerada pela cadeia de Markov.

Em qualquer simulação por “importance sampling”, o valor médio de uma determinada grandeza  $Q$  será dado por

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum Q_C p_C^{-1} e^{-\beta E_C}}{\sum p_C^{-1} e^{-\beta E_C}} \quad (7.8)$$

e o problema reside em encontrar uma distribuição  $p_C$  que nos dê a melhor estimativa de  $\langle Q \rangle$  com um número finito de estados visitados.

### 7.3. Algoritmo de Metropolis

A escolha mais intuitiva e, em muitos aspectos, mais acertada é fazer a probabilidade  $p_C$  igual ao peso de Boltzmann ( $\exp(-\beta E_C)$ ) do estado  $C$ . Esta escolha, além de simplificar a expressão para  $\langle Q \rangle$ , limita a simulação a uma região pequena do espaço de fase do sistema mas garante que a frequência relativa com que os estados são escolhidos corresponde exactamente ao tempo que o sistema real passaria nesses estados.

A taxa de transição escolhida por Metropolis que satisfaz a equação 7.5 e conduz a uma distribuição assintótica igual ao peso de Boltzmann foi

$$W_{C \rightarrow C'} = \begin{cases} \tau_0^{-1} e^{-\Delta E/k_B T} & \Delta E > 0 \\ \tau_0^{-1} & \Delta E < 0 \end{cases} \quad (7.9)$$

## 7. Revisão de Métodos de Monte Carlo

( $\tau_0$  é o tempo necessário para tentar uma nova configuração e é normalmente tomado como igual à unidade).

Durante a execução do algoritmo, os novos estados são propostos aleatoriamente e escolhidos de acordo com esta taxa, que só garante que estamos efectivamente a usar  $p_C = \exp(-\beta E_C)$  no limite em que o número de iterações é infinito. No tempo disponível para executar a simulação, resta-nos esperar que a simulação evolua para a região de energias definida pela temperatura escolhida para a simulação, processo que designamos por termalização. Os principais problemas do algoritmo de Metropolis prendem-se com uma amostragem demasiado lenta do espaço de fase e com a dificuldade de verificar a termalização da simulação devido à existência de mínimos locais no espaço de fase, isto é, a simulação pode ficar presa numa região limitada do espaço de fase, o que faz com que configurações com a mesma energia não sejam visitadas com a mesma probabilidade. Este problema de quebra de ergodicidade depende da dinâmica da simulação e tem sido alvo de intensa investigação, tendo sido propostos vários algoritmos para o ultrapassar, alguns mais apropriados a uma dada classe de sistemas do que outros, não sendo ainda claro o melhor caminho a seguir para os sistemas que nos interessam.

### 7.4. Variações do Algoritmo de Metropolis

No caso do modelo de Ising,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (7.10)$$

(onde  $\sigma = \pm 1$  e a soma é feita apenas sobre próximos vizinhos), a implementação do algoritmo de Metropolis é particularmente simples, visto que cada spin só tem duas orientações possíveis e as diferenças de energia são fixas. No entanto, mesmo neste caso, o algoritmo de Metropolis apresenta dificuldades de convergência quando se aproxima de uma transição de fase, um efeito conhecido como “critical slowing down”. Algumas das primeiras tentativas para melhorar o algoritmo de Metropolis consistiam em alterar mais de uma partícula em cada passo (Cluster algorithms, Swendsen-Wang [39]), continuando a existir estados muito mais prováveis do que outros mas resolvendo o problema de abrandamento crítico.

O modelo de Ising serve, há muito tempo, como modelo de teste para novos

## 7. Revisão de Métodos de Monte Carlo

métodos teóricos e técnicas de simulação e existem vários modelos derivados deste com complexidades adicionais, como o aumento do alcance da interacção e do número de estados possíveis. De particular relevância para o nosso estudo são os modelos de relógio, onde os spins podem apontar para uma de  $n$  possíveis direcções num relógio com  $n$  horas, tendo como limite um modelo contínuo quando  $n \rightarrow \infty$ , e os modelos de Ising para vidros de spin. Neste último caso, um dos mais simples modelos de vidros de spin, a constante de troca  $J$  entre próximos vizinhos é substituída por uma distribuição  $P(J_{ij})$ , cujas formas mais comuns são  $P(J_{ij}) = \pm J$ , aleatoriamente, ou a distribuição Gaussiana de Edwards-Anderson [40],

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\Delta J_{ij})^2}} e^{-(J_{ij} - \bar{J}_{ij})^2 / (2(\Delta J_{ij})^2)}, \quad (7.11)$$

também usada no modelo de Sherrington e Kirkpatrick [41] mas com interacção de longo alcance.

Nestes modelos, a competição entre as interacções resulta, a partir de uma determinada temperatura numa desordem “congelada”, semelhante ao que acontece num vidro normal. No caso do modelo de Edwards-Anderson,

$$kT_c = \sqrt{\frac{2}{9} \sum_{ij} \langle J_{ij}^2 \rangle}. \quad (7.12)$$

Isto deve-se a uma “frustração” das interacções, isto é, não é possível encontrar uma configuração do estado fundamental que satisfaça todas as ligações entre os spins (figura 7.1).

As simulações de Monte Carlo de vidros de spin são muito difíceis de efectuar devido à existência de muitos estados com baixas energias [42] [43]. Um dos métodos de simulação de vidros de spin, baseado nos algoritmos de minimização do tipo Simulated Annealing, consiste em efectuar simulações a temperaturas diferentes permitindo trocas de configurações entre elas (Simulated e Parallel Tempering, Parisi-Marinari [44] [45]), o que permite uma mais eficiente exploração do espaço de fase mas pode exigir um enorme esforço computacional.

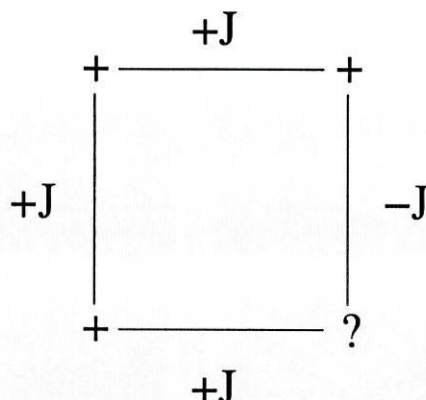


Figura 7.1.: Exemplo simples de frustração das interações num modelo de Ising para vidros de spin.

## 7.5. Métodos Avançados

A escolha de um  $p_C$  diferente do peso de Boltzmann pode permitir uma exploração mais eficiente do espaço de fase e reduzir em grande medida, chegando mesmo a eliminar, a necessidade de efectuar simulações adicionais (Umbrella sampling, Torrie-Valleau [46]) mas pode também diminuir drasticamente a frequência com que estados importantes para as médias são visitados.

A modificação artificial de  $p_C$  para uma distribuição mais abrangente em termos de energias e mais eficaz na sobreposição de barreiras é muito eficiente a temperaturas médias e altas e pode mesmo permitir o acesso a estados “raros” do sistema mas não garante que, a uma dada temperatura, a região de energias correspondente tenha sido visitada com a frequência necessária para calcular médias.

Neste contexto, a escolha mais utilizada para  $p_C$  é  $1/n(E_C)$  (Multicanonical Method [47] e Entropic Sampling [48]), sendo  $n(E)$  a densidade de estados, que conduz a uma probabilidade uniforme de visitar diferentes energias (histogramas “planos”). Os algoritmos baseados nesta ideia diferem, essencialmente, no método usado para conhecer, aproximadamente, a densidade de estados.

De facto, quando formos calcular médias a uma determinada temperatura, a escolha  $p_C = 1/n(E_C)$  implica que a simulação tanto visita energias para as quais o factor de Boltzmann é relevante como uma gama muito superior de energias para as quais este factor é ínfimo, o que torna a simulação ineficiente em termos de tempo de computação. No entanto, são precisamente estes estados de altas

energias que nos garantem a ergodicidade da simulação.

Por outro lado, como a densidade de estados é independente da temperatura, podemos calcular valores médios a qualquer temperatura com uma única simulação.

Na prática, os vários métodos propostos não procuram estimar directamente a densidade de estados mas sim a entropia,  $S(E) = \ln n(E)$ . Desta forma,

$$p_C = \frac{1}{n(E_C)} = e^{-S(E_C)}, \quad (7.13)$$

e a expressão para o valor médio fica

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum Q_C e^{S(E_C) - \beta E_C}}{\sum e^{S(E_C) - \beta E_C}}. \quad (7.14)$$

## 7.6. Multicanonical Ensemble

À luz deste formalismo, vemos que a taxa de transição de Metropolis, eq. 7.9, não é mais do que

$$W_{C \rightarrow C'} = \min [1, e^{-(S(E') - S(E))}] \quad (7.15)$$

com  $S(E) = \beta E$ . Berg e Neuhaus modificaram a taxa de transição parametrizando a entropia na forma

$$S(E) = \beta(E)E - \alpha(E), \quad (7.16)$$

sendo  $\beta(E)$  e  $\alpha(E)$  calculados recursivamente de forma a que o histograma de estados visitados por energia seja plano. Enquanto que na distribuição canónica  $S(E) = \beta E$ , ou seja, é usada uma temperatura (inversa)  $\beta$  para todos os valores de  $E$ , o método de Berg e Neuhaus atribui muitas “temperaturas inversas”  $\beta(E)$ , muitas distribuições canónicas, a certas regiões limitadas de  $E$  - daí a denominação de amostragem multicanónica.

Em termos da densidade de estados, a primeira simulação é efectuada com  $n^0(E) = 1$  e, como  $p_C^0 = 1/n^0(E_C)$  esta escolha é equivalente a simular a temperatura infinita, ou seja, aceitar todas as configurações propostas, e o primeiro histograma, que é uma aproximação à probabilidade de obter uma dada energia

## 7. Revisão de Métodos de Monte Carlo

$P(E) = n(e)p_C$ , será igual a

$$H^0(E) = n(E)p_C^0 = n(E)\frac{1}{n^0(E)}. \quad (7.17)$$

Esta relação permite-nos construir uma nova estimativa à densidade de estados,

$$n^1(E) = n^0(E)H^0(E), \quad (7.18)$$

ou, de forma equivalente,

$$S^{i+1}(E) = S^i(E) + \ln H^i(E). \quad (7.19)$$

A principal desvantagem deste algoritmo prende-se com a necessidade de discretizar a energia e com a forma como os parâmetros  $\beta(E)$  e  $\alpha(E)$  são calculados - é utilizada uma relação entre os valores de  $H(E)$  para energias vizinhas que introduz um erro elevado quando são consideradas energias pouco visitadas. No caso particular da primeira estimativa à densidade de estados,

$$\beta(E) = \frac{\ln H(E + dE) - \ln H(E)}{dE} \quad (7.20)$$

e

$$\alpha(E - dE) = \alpha(E) + (\beta(E - dE) - \beta(E)) E. \quad (7.21)$$

As estimativas posteriores incorporam a informação anterior com um peso definido de forma a minimizar as flutuações de  $\beta(E)$  nos limites da região explorada, onde os valores de  $H(E)$  em 7.20 são praticamente nulos. Este processo torna-se particularmente ineficiente em sistemas com espectros de energia contínuos. Como é necessário discretizar a energia, a escolha de  $dE$  pode voltar a aumentar as flutuações nos histogramas a baixas energias e limitar o progresso da simulação.

### 7.7. Novo Algoritmo Multicanónico

Lopes [49] propôs uma nova forma de calcular a entropia baseando-se no facto de, numa simulação Metropolis, a função  $P(E)$  ter um máximo apertado em torno de um valor  $E_0$ , determinado por

## 7. Revisão de Métodos de Monte Carlo

$$\left. \frac{dP(E)}{dE} \right|_{E_0} = 0 \Rightarrow \left. \frac{dS(E)}{dE} \right|_{E_0} = \beta \quad (7.22)$$

o que nos permite expandir a entropia em torno dessa energia

$$S(E_0 + \delta E) = S(E_0) + \beta \delta E + a_2 (\delta E)^2 + a_3 (\delta E)^3 + \dots \quad (7.23)$$

Visto que  $E$  e  $S(E)$  são grandezas extensivas, (proporcionais ao número de partículas  $N$ ), a razão entre termos de ordem consecutiva é

$$\frac{a_{i+1}}{a_i} \sim N^{-1}, \quad (7.24)$$

pelo que podemos desprezar termos de ordem superior a 2 e escrever

$$P(E) = e^{S(E) - \beta E} = e^{a_2 (E - E_0)^2} \quad \text{com} \quad a_2 = -\frac{1}{2\sigma_\beta^2}. \quad (7.25)$$

Desta forma, medindo o valor médio  $E_0$  e variância  $\sigma$  do histograma numa simulação de Metropolis, podemos aproximar a entropia na vizinhança de  $E_0$ . Como no Multicanonical Ensemble, a escolha mais natural é começar a  $\beta = 0$  e medir  $E_0$  e  $\sigma$ , que são afectados por um erro muito menor do que as relações recursivas usadas por Berg e Neuhaus.

O que estamos a fazer, basicamente, é aproximar a entropia por uma função quadrática na energia, enquanto que a escolha de Metropolis usa uma aproximação linear. Podemos combinar as duas técnicas definindo a entropia por ramos, da seguinte forma:

$$S(E) = \begin{cases} \beta_i E + S(E_i) & E < E_i \\ S(E_{i-1}) - \frac{1}{2\sigma_{i-1}^2} (E - E_{i-1})^2 + \beta_{i-1} (E - E_{i-1}) & E_i < E < E_{i-1} \\ \dots & \dots \\ S(E_0) - \frac{1}{2\sigma_0^2} (E - E_0)^2 + \beta_0 (E - E_0) & E_1 < E < E_0 \\ 0 & E > E_0 \end{cases} \quad (7.26)$$

A escolha dos limites dos ramos pode ser feita, por exemplo, escolhendo

$$E_i = E_{i-1} - f * \sigma_{i-1}, \quad (7.27)$$

## 7. Revisão de Métodos de Monte Carlo

de forma a que o intervalo escolhido para a aproximação à entropia está relacionado com a largura do histograma por um factor  $f$ , o que implica

$$\beta_i = \beta_{i-1} + \frac{f}{\sigma_{i-1}}. \quad (7.28)$$

O factor  $f$  determina, em unidades de  $\sigma_{i-1}$  (a largura da gaussiana anterior), o intervalo de energia para o qual será feita a aproximação quadrática à entropia baseada na largura da gaussiana da simulação anterior. Pode tomar qualquer valor, tendo em conta que um valor mais pequeno leva a uma melhor aproximação para a entropia, que é aproximada por um número elevado de ramos e permite o acumular de mais entradas para o cálculo de médias. Um valor maior acelera a progressão da simulação para energias mais baixas. Naturalmente,  $f$  nunca deverá ser tão grande de tal forma que a energia  $E_i$  nem sequer tenha sido visitada no “Run” anterior, pelo que é aconselhável um valor no intervalo ]0, 5].

Repare-se que no limite inferior voltamos a usar a escolha de Metropolis, resultando no comportamento gaussiano que nos permite voltar a construir a aproximação quadrática (figura 7.2). Na região onde é feita a aproximação quadrática à entropia ( $\beta$  linear), o histograma é plano, regressando ao comportamento gaussiano quando a aproximação à entropia é linear ( $\beta$  constante).

Como já vimos, este tipo de método não nos permite controlar de forma eficiente a frequência com que os estados mais relevantes para o cálculo de médias de grandezas termodinâmicas são visitados. Uma solução possível para este problema poderá ser limitar as simulações a uma pequena região de energias, que de outra forma cobririam todo o espectro, e implementar um algoritmo do estilo Parallel Tempering. O custo computacional seria muito reduzido comparativamente com o do Parallel Tempering com simulações Metropolis visto que os histogramas gerados por cada simulação seriam mais largos, reduzindo o número de simulações, sendo necessário apenas controlar essa largura em função da diminuição da frequência com que os estados são visitados.

### 7.8. Métodos de Histogramas

A ideia de usar histogramas para extrair informação de simulações de Monte Carlo não é nova mas foi pela primeira vez aplicada com sucesso ao estudo de fenómenos críticos por Ferrenberg e Swendsen [50], que construíram um ou mais histogra-

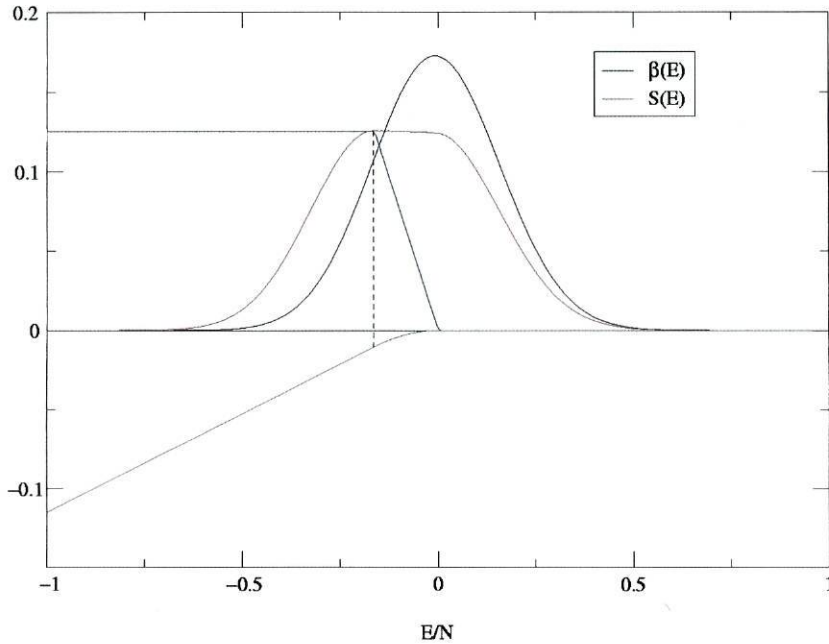


Figura 7.2.: Primeiro e segundo histogramas de uma simulação multicanónica. A entropia  $S(E)$ , construída a partir do primeiro histograma, é quadrática ( $\beta(E)$  linear) até um dado valor de  $E$ , região onde o segundo histograma é plano, e linear ( $\beta(E)$  constante) para energias mais baixas, onde o histograma volta à distribuição gaussiana.

mas a partir de simulações do tipo Metropolis, ou seja, usando a distribuição de Boltzmann. Esta técnica tende a gerar histogramas cada vez mais estreitos à medida que o tamanho do sistema aumenta. Oliveira *et al.* [51] criaram um algoritmo conhecido como Broad Histogram Method que tenta gerar histogramas que cubram uma leque de energias mais extenso baseando o processo de Markov numa dinâmica de passeio aleatório para substituir a distribuição de Boltzmann por uma distribuição uniforme na energia. No entanto, a implementação original deste método parece não estar correcta e tem sido posto em questão se o método, nas suas várias formas, obedece por completo o princípio de “detailed balance”. De qualquer forma, os casos de sucesso destes métodos limitam-se, em grande medida, a modelos de Ising ou de Potts, continuando ainda por verificar até que ponto, e com que modificações, os podemos aplicar a sistemas mais complexos.

## 7.9. Outros Métodos de Simulação Computacional

Embora os métodos de Monte Carlo sejam muito úteis em diversos problemas de Física Estatística, existem sistemas para os quais não são apropriados e até problemas que simplesmente não podem ser tratados por métodos estocásticos, quando se pretende estudar propriedades dependentes do tempo regidas por equações de movimento determinísticas. Neste caso, usam-se métodos de integração de equações de movimento conhecidos genericamente como métodos de dinâmica molecular, que são aplicados a sistemas de pequenas partículas magnéticas, por exemplo, nos trabalhos de Chantrell *et al.* [52]. Nalguns casos de métodos de Monte Carlo com baixas taxas de aceitação, é possível usar métodos de dinâmica molecular para melhorar a eficácia da exploração do espaço de fase.

## 8. Simulações

Como já dissemos, o nosso estudo incidiu em redes planares quadradas de grânulos magnéticos (figura 8.1), numa matriz isoladora e, portanto, sujeitos apenas à interação dipolar, que podem ser representados de várias formas.

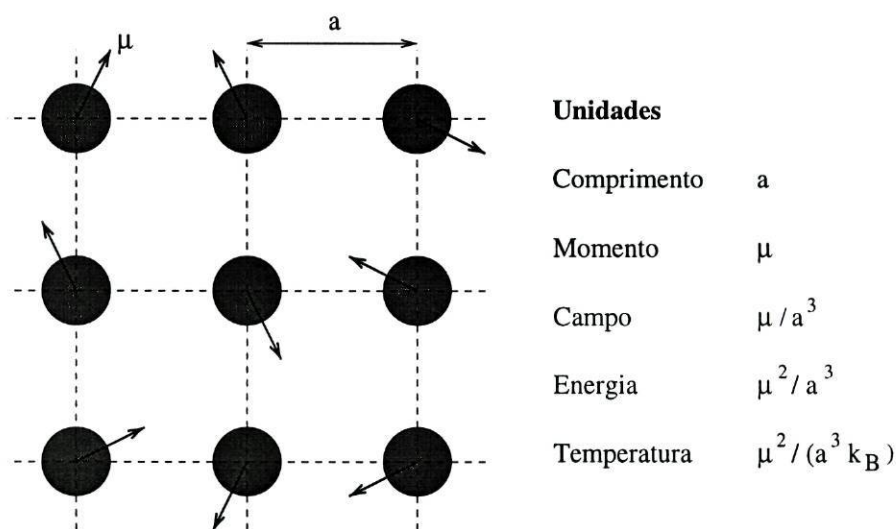


Figura 8.1.: Representação esquemática das redes e parâmetros usados nas simulações computacionais.

O modelo mais simples consiste em aproximar os grânulos a dipolos magnéticos pontuais, sendo a energia dada apenas pela interação dipolar entre eles,

$$E_D^{(i,j)} = \frac{\boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{\mu}_j}{R_{ij}^3} - 3 \frac{(\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{R}_{ij})(\boldsymbol{\mu}_j \cdot \mathbf{R}_{ij})}{R_{ij}^5}, \quad (8.1)$$

mais, eventualmente, o acoplamento com o campo aplicado,

$$E_H^{(i)} = -\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{H}. \quad (8.2)$$

## 8. Simulações

A partir deste modelo, é simples adicionar termos ao Hamiltoniano que introduzam os efeitos da anisotropia de forma, que no caso de anisotropia uniaxial será

$$E_A^{(i)} = -KV \left( \frac{\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{n}_i}{|\boldsymbol{\mu}_i|} \right)^2 \quad (8.3)$$

(onde os versores  $\mathbf{n}_i$  indicam as direcções dos eixos de anisotropia), ou dos tamanhos finitos dos grânulos

$$E_C^{(i,j)} = -\alpha\rho^2 \frac{\boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{\mu}_j}{R_{ij}^3} + 3\beta\rho^2 \frac{(\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{R}_{ij})(\boldsymbol{\mu}_j \cdot \mathbf{R}_{ij})}{R_{ij}^5} \quad (8.4)$$

e medir os efeitos destas correcções no comportamento de grandezas termodinâmicas como a susceptibilidade e o calor específico. Caso todos os termos fossem incluídos, a energia total seria dada por

$$E = \sum_i E_A^{(i)} + \sum_i E_H^{(i)} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} (E_D^{(i,j)} + E_C^{(i,j)}). \quad (8.5)$$

No entanto, as simulações efectuadas até ao momento incluem apenas o termo de interacção dipolar pontual.

### 8.1. Simulações Metropolis

Uma simples simulação Metropolis de uma rede quadrada de dipolos pontuais permite constatar, observando a evolução da energia, as limitações do algoritmo. Com os momentos magnéticos todos iguais e constantes, os dois graus de liberdade de cada momento ( $\chi$  e  $\cos\psi$ ) foram discretizados na esfera unitária e as candidatas a novas orientações foram escolhidas aleatoriamente (por oposição a pequenas variações). Efectuando duas simulações com condições iniciais (orientação dos momentos) diferentes por temperatura vemos que, à medida que baixamos a temperatura, aumenta a probabilidade de a evolução não tender para o mesmo estado equilíbrio (figura 8.2). À medida que baixamos mais a temperatura, e se esperarmos mais tempo, é possível verificar que a simulação pode saltar de um mínimo local para outro, criando patamares nas curvas de energia, mas só no limite de tempo infinito está garantida a convergência das simulações.

## 8. Simulações

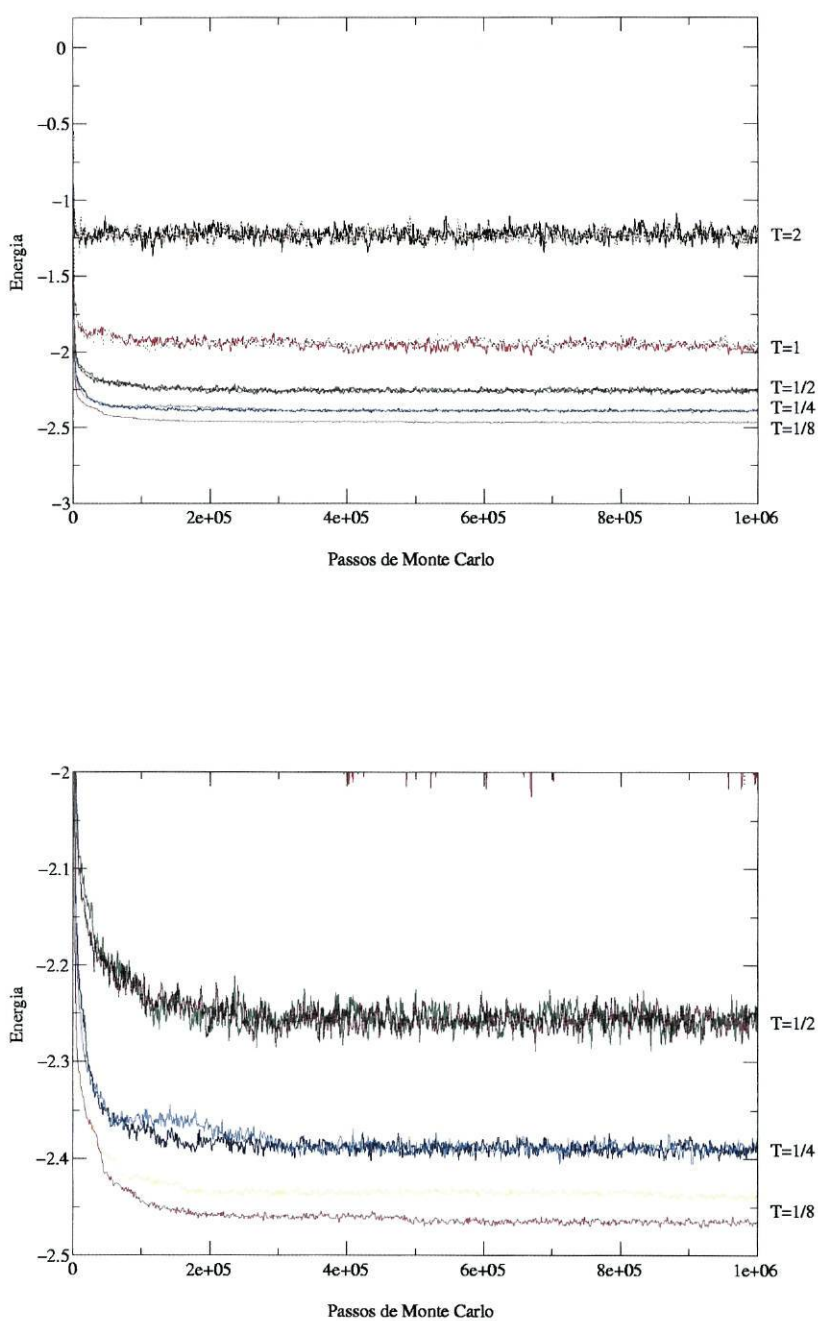


Figura 8.2.: Em cima, simulações Metropolis de uma rede quadrada ( $25 \times 25$ ) de dipolos pontuais para diferentes temperaturas (duas curvas por temperatura). O gráfico de baixo é uma ampliação do anterior - as duas últimas curvas correspondem à mesma temperatura de  $1/8\mu^2/\alpha^3$ , com condições iniciais diferentes, e convergem para diferentes estados de equilíbrio.

## 8. Simulações

Mesmo com estas limitações, podemos explorar com simulações de Metropolis a questão do estado fundamental. Embora conheçamos as energias dos estados de micro-vórtice para redes de diversos tamanhos, só podemos afirmar que o estado antiferromagnético é o estado de mais baixa energia no caso de redes infinitas. Numa tentativa de encontrar estados de energia mais baixa do que a das configurações de micro-vórtice, foram efectuadas simulações de Metropolis a temperatura nula (isto é, uma simples rotina de minimização da energia) e, de facto, existem estados com energia inferior, visto que, numa rede com 25 dipolos por lado, a energia do estado antiferromagnético ou de vórtice planar é aproximadamente  $-2.474\mu^2/a^3$  (figura 4.4) e uma das simulações chegou a uma energia inferior,  $-2.497\mu^2/a^3$  (figura 8.3).

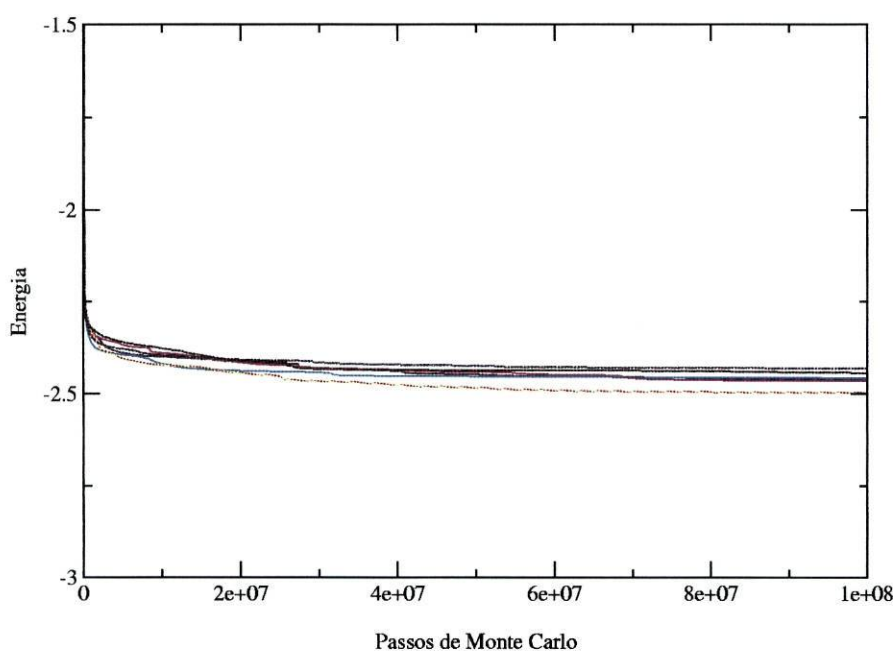


Figura 8.3.: Simulações Metropolis a temperatura nula de uma rede quadrada planar com 25 dipolos por lado.

No entanto, encontrar estados de energia cada vez mais baixa através de simulações Metropolis é uma questão de mero acaso, pois depende fortemente das condições iniciais, como já vimos. Os algoritmos Multicanónicos permitem percorrer todo o espectro de energias e avançar para energias mais baixas de uma forma mais sistemática e fiável.

## 8.2. Simulações Multicanónicas

Com o objectivo de comparar os dois métodos multicanónicos descritos e procurar as configurações de mais baixa energia em redes de tamanho finito, foram efectuadas simulações com um número não muito elevado de passos de Monte Carlo por “Run”, visto que é necessário apenas construir uma densidade de estados aproximada e não calcular médias de grandezas termodinâmicas.

Cada simulação é iniciada a temperatura infinita ( $n(E) = 1$ ), o que gera um histograma gaussiano centrado em  $E = 0$ . Quer pela aplicação da relação recursiva de Berg ao histograma quer pela medição da largura da gaussiana é possível construir uma nova densidade de estados que na vizinhança de  $E = 0$  é uma boa aproximação à densidade de estados real. Como o “Run” seguinte usa como probabilidade de amostragem o inverso desta densidade de estados, o histograma seguinte será razoavelmente plano nessa região e chegará a energias ainda não visitadas, o que permite repetir todo o processo.

A figura 8.5 apresenta os sucessivos histogramas gerados por cada uma das simulações, onde se vê que a construção analítica da entropia permite avançar de forma mais eficaz na energia (além de que este avanço pode ser regulado através do factor  $f$  na eq. 7.27). Embora no início (figura 8.4) os histogramas não apresentem grande diferença para além do ruído já mencionado no caso do método de Berg, à medida que são efectuados mais “Runs” verificamos que o novo método permite explorar mais rapidamente as energias mais baixas, com o mesmo número de passos.

O gráfico (figura 8.6) da entropia  $S(E)$  permite constatar que os dois métodos constroem, de facto, a mesma densidade de estados. Na região de energias explorada, ambos os métodos constroem a mesma entropia, embora o novo método seja mais eficiente. Na região de energias não explorada, a entropia é constante no método de Berg ( $\beta(E) = 0$ ), o que limita a progressão da simulação, enquanto que no novo método a entropia é linear ( $\beta(E) = \text{const.}$ ). De qualquer forma, fica ainda por fazer uma comparação mais detalhada dos dois algoritmos, no que diz respeito ao escalonamento do tempo de simulação com o tamanho do sistema, tempos de correlação, erros estatísticos, etc.

A configuração de energia mais baixa encontrada com o novo método multicanónico é apresentada na figura 8.7, onde se pode reconhecer o estado de microvórtice previsto por Belobrov *et al.* em cada célula unitária mas, neste caso, o

## 8. Simulações

estado não é uniforme, devido ao tamanho finito da rede. Enquanto que numa rede infinita todos os micro-vórtices são descritos por um único ângulo, arbitrário, neste caso verificamos que o ângulo é máximo,  $\pi/4$ , no centro e nas fronteiras os momentos alinham-se na direcção das mesmas, para evitar o aparecimento de cargas magnéticas.

Estes sistemas são obviamente muito pequenos, sendo necessário estudar os efeitos de fronteira com o aumento do tamanho do sistema e com a forma de amostra. Por exemplo, em sistemas maiores esta deformação dos micro-vórtices pode vir a limitar-se a uma zona próxima da fronteira, com o interior descrito por um estado de micro-vórtice uniforme.

Os gráficos permitem-nos verificar, também, o carácter substancialmente diferente das redes de lado ímpar e par, sendo o estado de lado par simétrico e de magnetização praticamente nula.

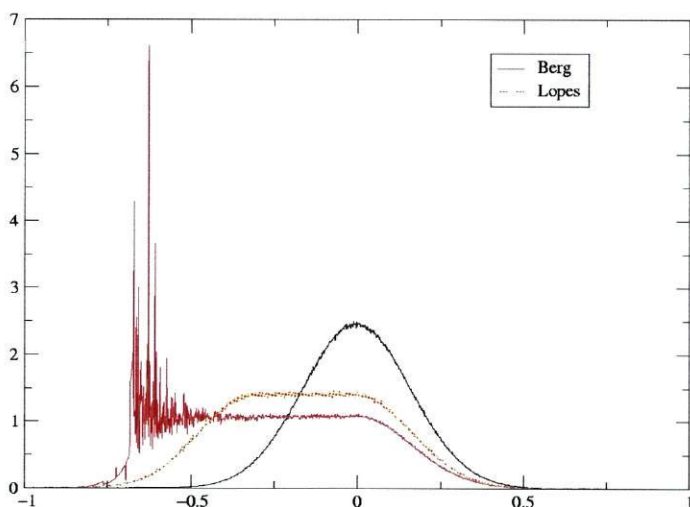


Figura 8.4.: Comparação dos primeiros histogramas gerados por cada algoritmo multicanónico. Note-se o ruído no hitograma gerado pelo método de Berg.

## 8. Simulações

### Algoritmos Multicanónicos

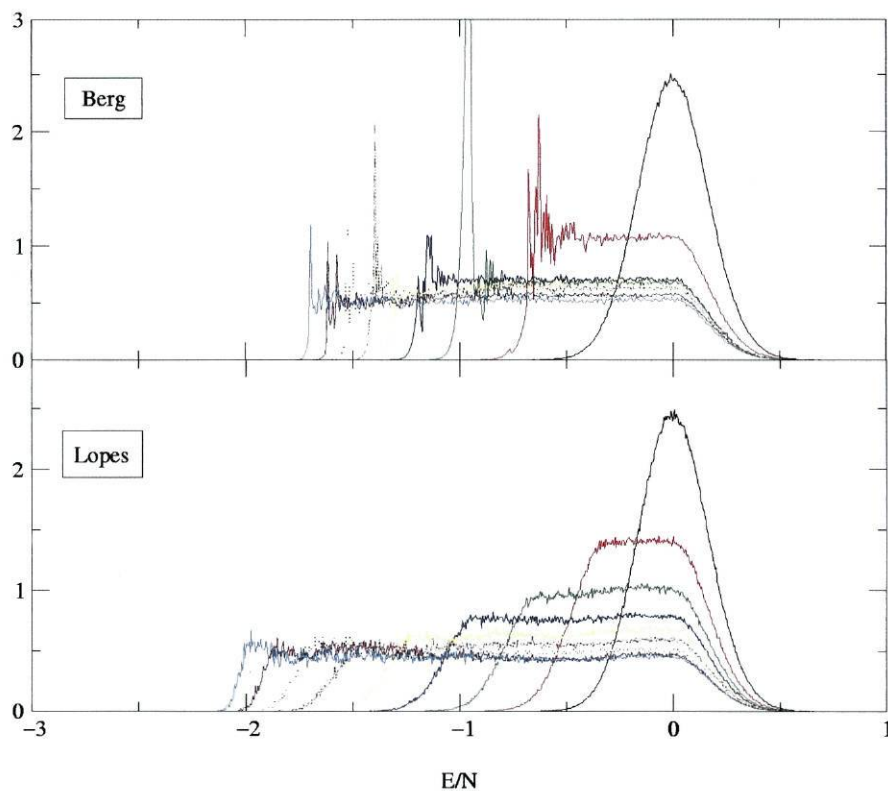


Figura 8.5.: Comparação dos histogramas gerados pelos dois tipos de simulação multicanónica. Com o mesmo número de passos por Run, os histogramas gerados pelo novo método são mais planos e chegam a energias mais baixas do que o método de Berg.

## 8. Simulações

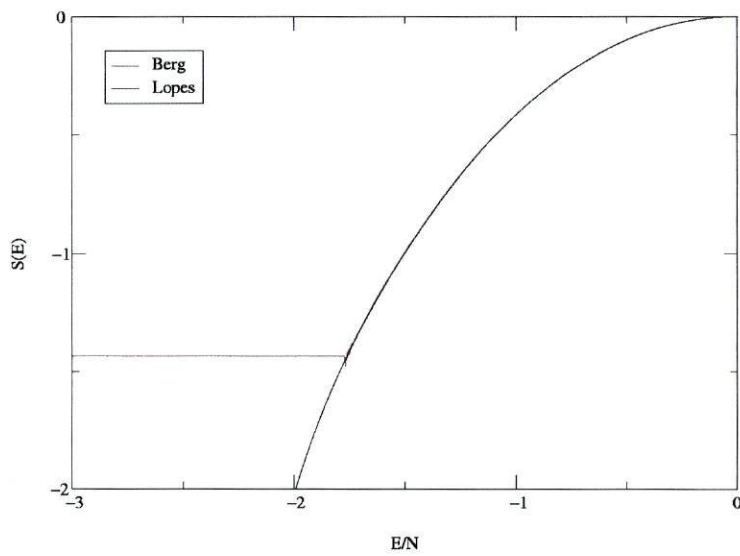


Figura 8.6.: Comparação das construções da entropia  $S(E)$  pelos dois tipos de simulação multicanônica. Na região de energias não explorada, a entropia é constante no método de Berg ( $\beta(E) = 0$ ), o que limita a progressão da simulação, enquanto que no novo método a entropia é linear ( $\beta(E) = \text{const.}$ ).

## 8. Simulações

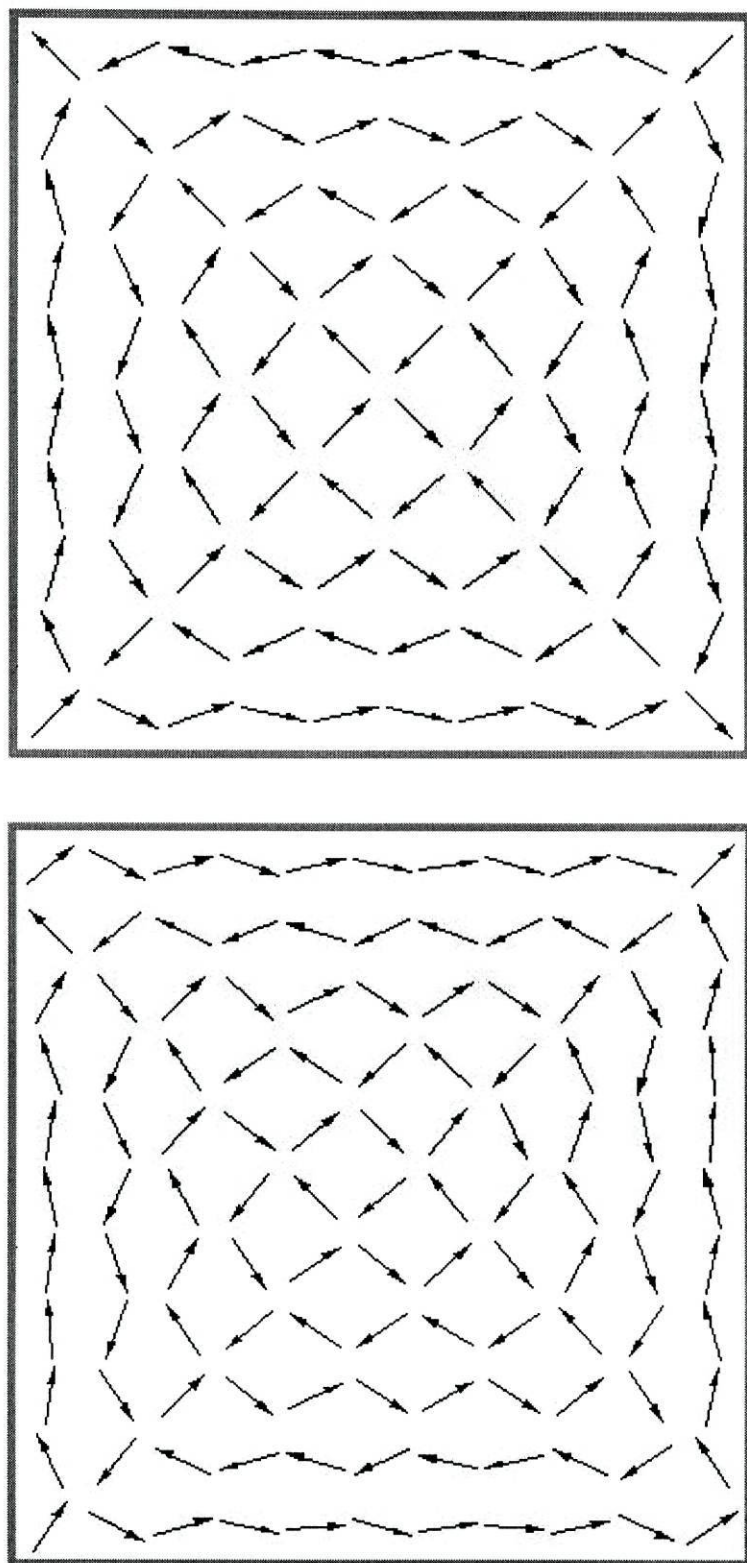


Figura 8.7.: Estado de mais baixa energia obtido por uma simulação multicanónica, numa rede de lado par ( $10 \times 10$ ), em cima, e de lado ímpar ( $11 \times 11$ ), em baixo.

### 8.3. Médias de Grandezas Termodinâmicas

Como já vimos, a utilização de um  $P(E)$  diferente do peso de Boltzmann implica que a média de uma determinada grandeza termodinâmica deixa de ser a simples média aritmética que calculamos numa simulação Metropolis a uma determinada temperatura. De facto, numa simulação multicanónica não está definida, à partida, nenhuma temperatura. É necessário acumular histogramas das grandezas desejadas em função da energia  $e$ , depois, repesar os histogramas para cada temperatura, sendo a média de uma determinada grandeza  $Q$  dada por

$$\langle Q(\beta) \rangle = \frac{\sum Q_C e^{S(E_C) - \beta E_C}}{\sum e^{S(E_C) - \beta E_C}}. \quad (8.6)$$

Desta forma, todos os valores acumulados, a qualquer energia, contribuem para a média canónica à temperatura desejada, embora a maior contribuição se deva à gama de energias  $E$  tais que  $\beta \simeq \beta(E)$ .

No entanto, é neste ponto que se levanta um problema que já referimos na descrição dos métodos multicanónicos - a dificuldade de garantir que todos os histogramas contém entradas suficientes para o cálculo das médias. Nos resultados que se seguem, foi efectuada uma simulação, para cada tamanho da rede, limitada a  $\beta = 30$ , nas quais o número de passos por "Run" apenas na região de energias não explorada no "Run" anterior é de um milhão de passos por partícula para as redes de 49, 64 e 81 partículas (figuras 8.8, 8.9 e 8.10), cem mil passos por partícula para  $N = 100, 121$  e  $144$  e dez mil passos por partícula nas restantes.

Neste último caso torna-se evidente, particularmente nas flutuações da curva do calor específico a baixas temperaturas, que o número de passos é já insuficiente, mas foi necessário limitar o número de passos para controlar o tempo de simulação. Para cada uma das curvas de susceptibilidade e calor específico apresentadas na secção seguinte foi necessário, em média, correr a simulação durante uma semana num processador a 800 MHz. O tempo de simulação pode ser diminuído, por exemplo, considerando apenas um grau de liberdade (ângulo de rotação no plano) por momento. De qualquer forma, a simulação de sistemas maiores implica, forçosamente, a divisão em regiões separadas do espectro energético a correr em paralelo. É importante salientar que esta divisão não acarreta nenhum problema de fundo, visto que basta coleccionar os histogramas gerados por cada uma das simulações antes de efectuar a repesagem.

## 8. Simulações

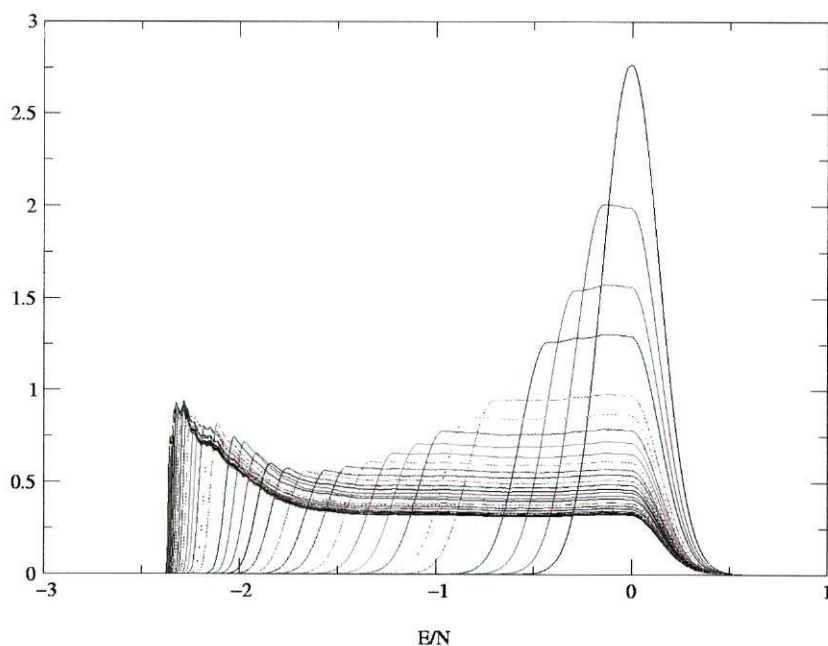


Figura 8.8.: Gráfico dos histogramas, normalizados, gerados pela simulação final, com um milhão de passos por partícula por “Run” na região de energia ainda não explorada, de uma rede de 64 partículas. Os sucessivos histogramas correspondem a “Runs” da simulação que permitem alargar cada vez mais a região de energias amostrada com probabilidade uniforme.

## 8. Simulações

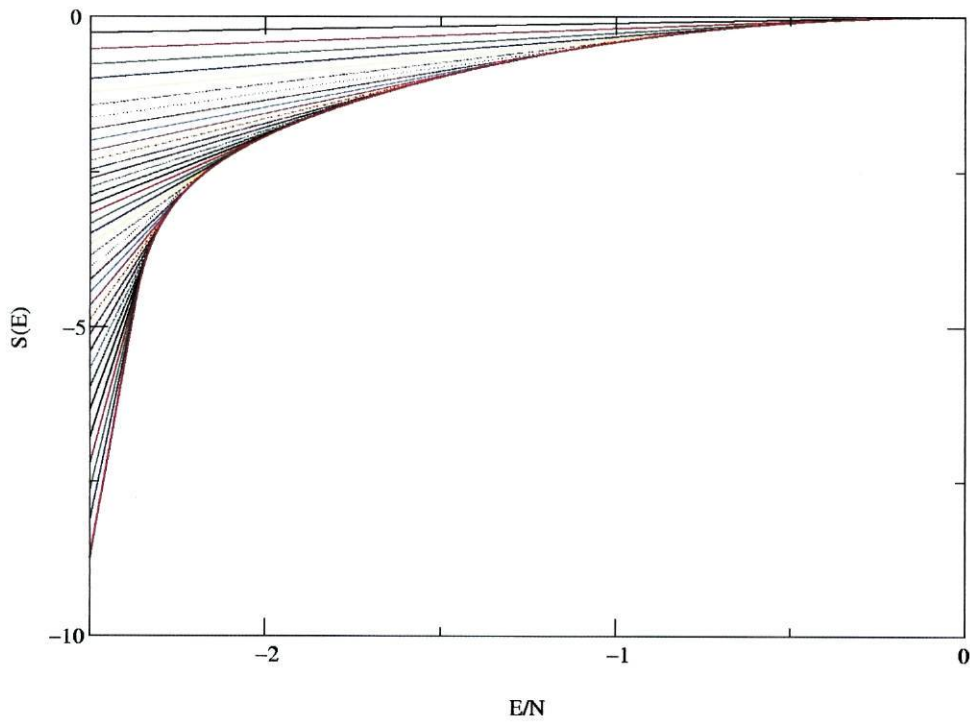


Figura 8.9.: Gráfico da entropia  $S(E)$  gerada pela simulação representada na figura anterior. As linhas dentro do gráfico correspondem à aproximação linear à entropia na região não explorada de cada “Run”.

## 8. Simulações

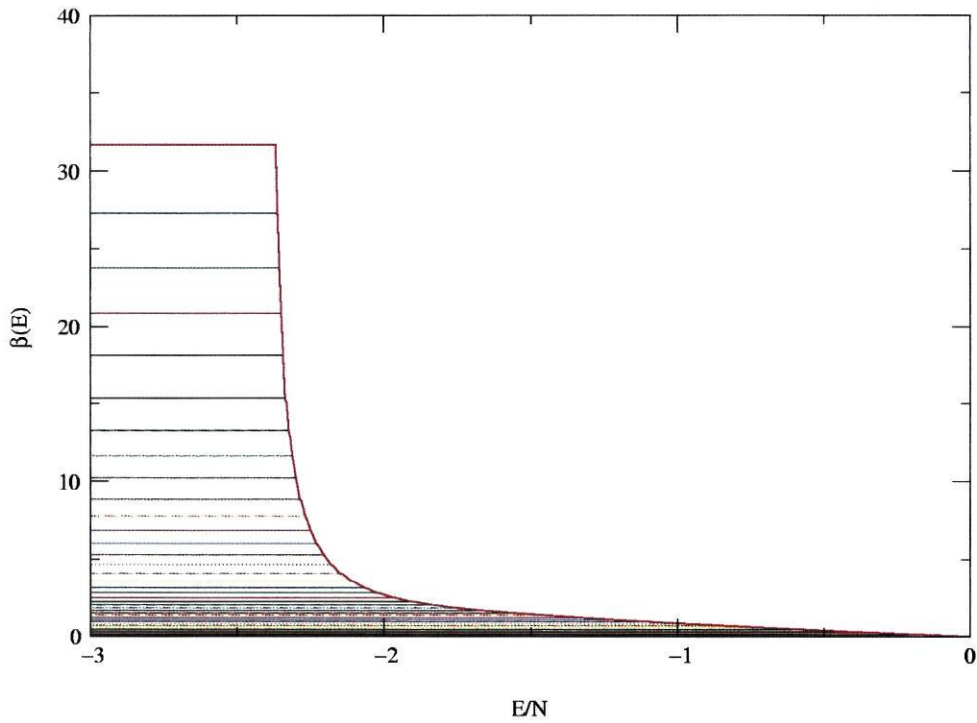


Figura 8.10.: Gráfico da temperatura inversa  $\beta(E)$ , derivada da entropia  $S(E)$  representada na figura anterior. As linhas horizontais correspondem às regiões não exploradas de cada "Run", o que faz com que a amostragem nessa região seja dada pela taxa de Metropolis.

## 8.4. Susceptibilidade Magnética

A susceptibilidade magnética [53]

$$\chi = \frac{dM}{dH} = \beta(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)/N \quad (8.7)$$

apresenta dois comportamentos distintos a baixas temperaturas (figura 8.11), conforme o número de partículas por lado da rede é par ou ímpar. Este comportamento, à partida estranho, pode ser compreendido à luz das considerações anteriores sobre a degenerescência do estado fundamental.

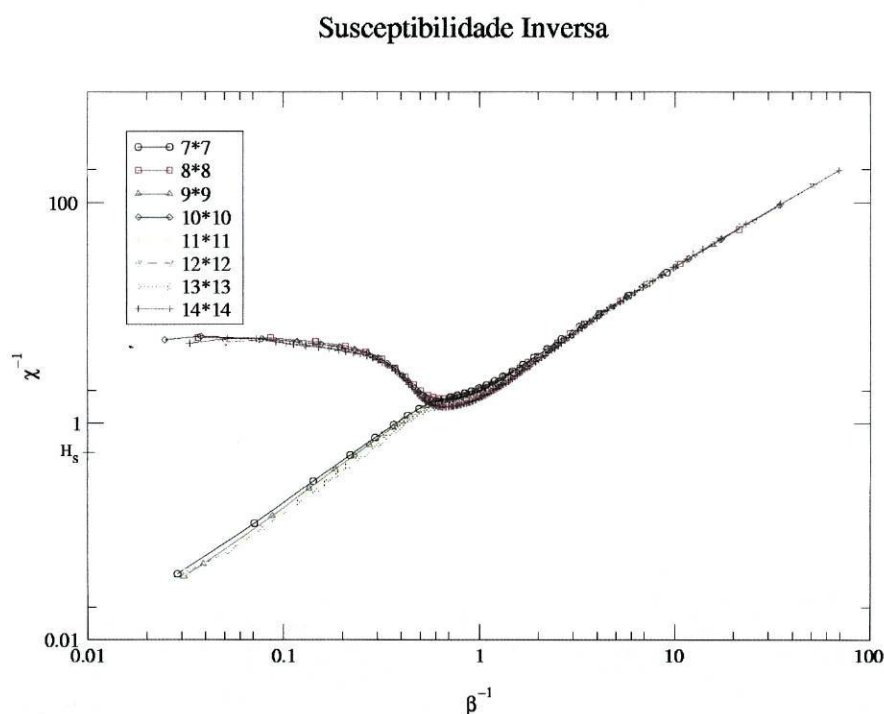


Figura 8.11.: Inverso da susceptibilidade magnética em função da temperatura, a campo nulo, para redes de 49, 64, 81, 100, 121, 144, 169 e 196 partículas. Os dois comportamentos distintos correspondem a redes com número de partículas par ou ímpar.

Como vimos no capítulo 5, a energia do estado de micro-vórtice numa rede com um número ímpar de dipolos por lado não varia com o ângulo  $\theta$  que caracteriza este estado, enquanto que numa rede de lado par a energia é proporcional a  $\sin 2\theta$ .

## 8. Simulações

Paralelamente, enquanto que a rede de lado par permite que a magnetização total se anule, tal não é possível numa rede de lado ímpar. Desta forma, a divergência da susceptibilidade para as redes de lado ímpar poderia ser explicada pelo facto de um campo arbitrariamente pequeno seleccionar um dos estados degenerados, induzindo uma magnetização finita, enquanto que na rede par a magnetização dos estados de mais baixa energia é nula.

No entanto, este efeito deveria desaparecer com o aumento do tamanho do sistema mas, para os tamanhos simulados, a susceptibilidade das redes de lado ímpar afasta-se ainda mais da susceptibilidade das redes de lado par.

A altas temperaturas ( $T \gg 1$ ), todas as curvas convergem para a lei de Curie-Weiss,

$$\chi^{-1} = T - T_{CW}, \quad (8.8)$$

com as temperaturas de Curie-Weiss para cada tamanho da rede apresentadas na tabela 8.1.

Tabela 8.1.: Temperaturas de Curie-Weiss

$N$	49	64	81	100	121	144	169	196
$T_{CW}$	0.53	0.57	0.63	0.65	0.71	0.71	0.77	0.76

A baixas temperaturas ( $T \ll 1$ ) a susceptibilidade inversa das redes com lado ímpar segue uma lei de potência, com expoente entre aproximadamente 5/4 e 4/3,

$$\chi_{49}^{-1} = 3.3488T^{1.2437} \quad \chi_{81}^{-1} = 3.3195T^{1.2822} \quad (8.9)$$

$$\chi_{121}^{-1} = 3.1621T^{1.2918} \quad \chi_{169}^{-1} = 2.9668T^{1.2784},$$

enquanto nas redes com lado par a susceptibilidade tende a um valor de saturação  $\chi_s^{-1} \simeq 6$ . O valor da susceptibilidade inversa obtido para uma rede infinita a partir do espectro de excitações, no limite de temperatura nula (eq. 6.23), foi  $\chi_s^{-1} = H_s = 0.589$ , e aumenta com a temperatura (eq. 6.24), pelo que, no limite termodinâmico, todas as curvas deverão convergir para este valor.

## 8.5. Calor Específico

O calor específico [53]

$$C = \frac{dE}{dT} = \beta^2(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)/N \quad (8.10)$$

apresenta, como principal característica, um máximo pronunciado quando a temperatura é da ordem da energia de interação dipolar (figura 8.12), precisamente na região onde parece existir uma saturação da susceptibilidade antes de surgirem os dois comportamentos diferentes a temperaturas mais baixas (figura 8.13).

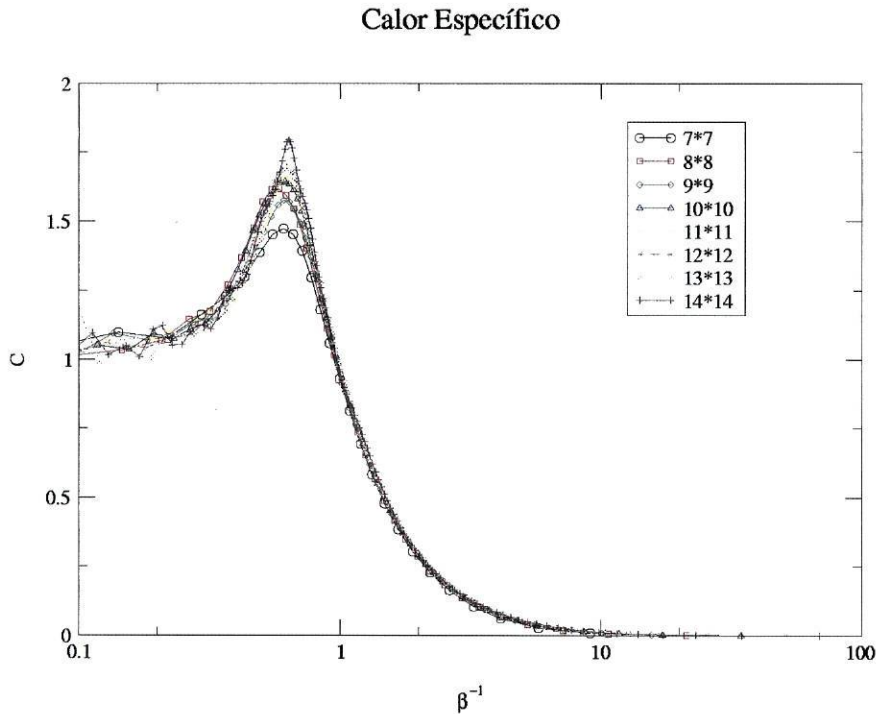


Figura 8.12.: Calor específico em função da temperatura, para redes de 49, 64, 81, 100, 121, 144, 169 e 196 partículas.

Esta temperatura foi interpretada como uma temperatura de congelamento (por comparação com as diferentes susceptibilidades medidas experimentalmente por arrefecimento com campo (FC) ou sem campo (ZFC) aplicado), a partir da qual, no sentido de temperaturas decrescentes, se começam a sentir os efeitos de

## 8. Simulações

frustração da interacção dipolar, responsáveis também pelos problemas de quebra de ergodicidade encontrados nas simulações tradicionais de Monte Carlo.

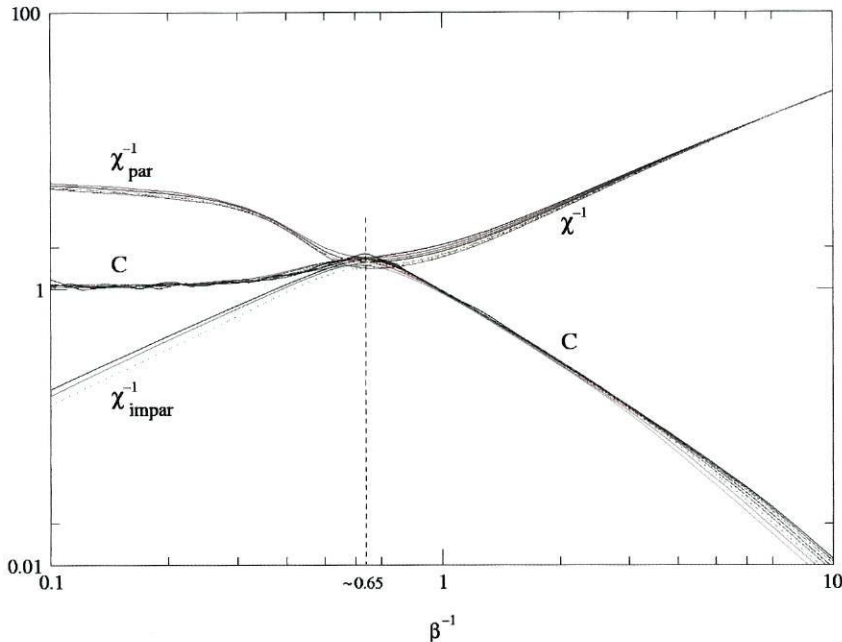


Figura 8.13.: Susceptibilidade e Calor Específico na rede quadrada de dipolos pontuais.

No entanto, com o aumento do tamanho da rede o máximo do calor específico parece tornar-se mais pronunciado mas como não foi possível simular sistemas muito maiores, não é possível decidir se se trata de uma divergência indicativa de uma transição de fase próximo de  $T = 1$ . No limite  $T \rightarrow 0$ , o calor específico tende para  $k_B$  (igual a 1, nas unidades utilizadas).

Com o objectivo de diminuir o tempo de execução, foram efectuadas simulações (preliminares) limitando o movimento dos momentos ao plano da rede, isto é, permitindo apenas um grau de liberdade de rotação. Qualitativamente, o comportamento tanto da susceptibilidade (figura 8.14) como do calor específico (figura 8.15) é o mesmo mas a temperatura “crítica” é um pouco superior, mais próxima de 1, e o calor específico tende para  $1/2$ , no limite de temperatura nula, como seria de esperar pelo princípio de equipartição de energia.

## 8. Simulações

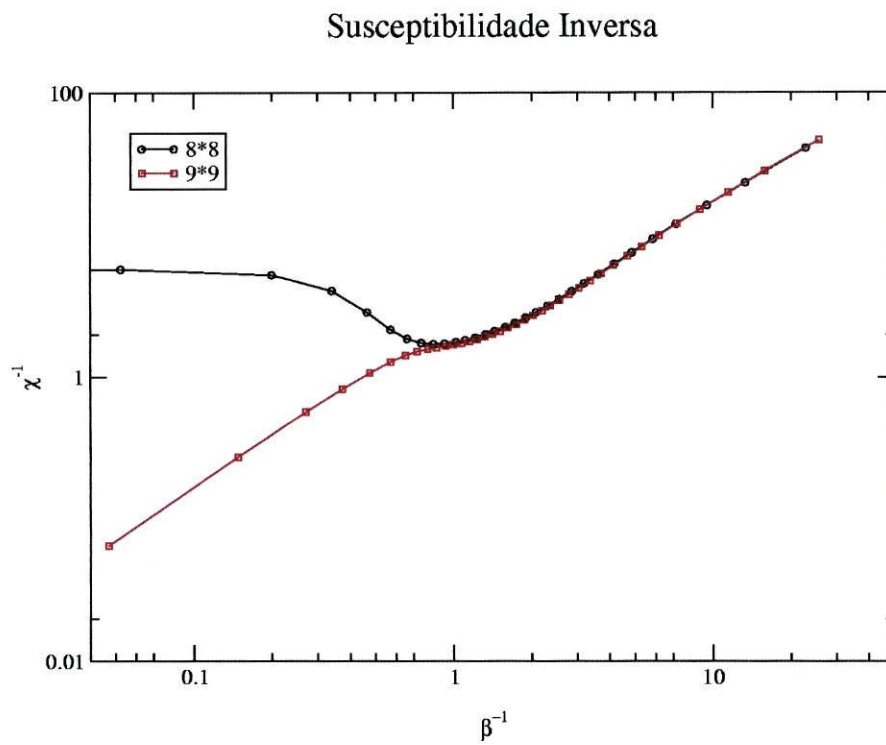


Figura 8.14.: Inverso da susceptibilidade magnética em função da temperatura, a campo nulo, para redes de 64 e 81, com os momentos confinados ao plano da rede (um único grau de liberdade rotacional).

## 8. Simulações

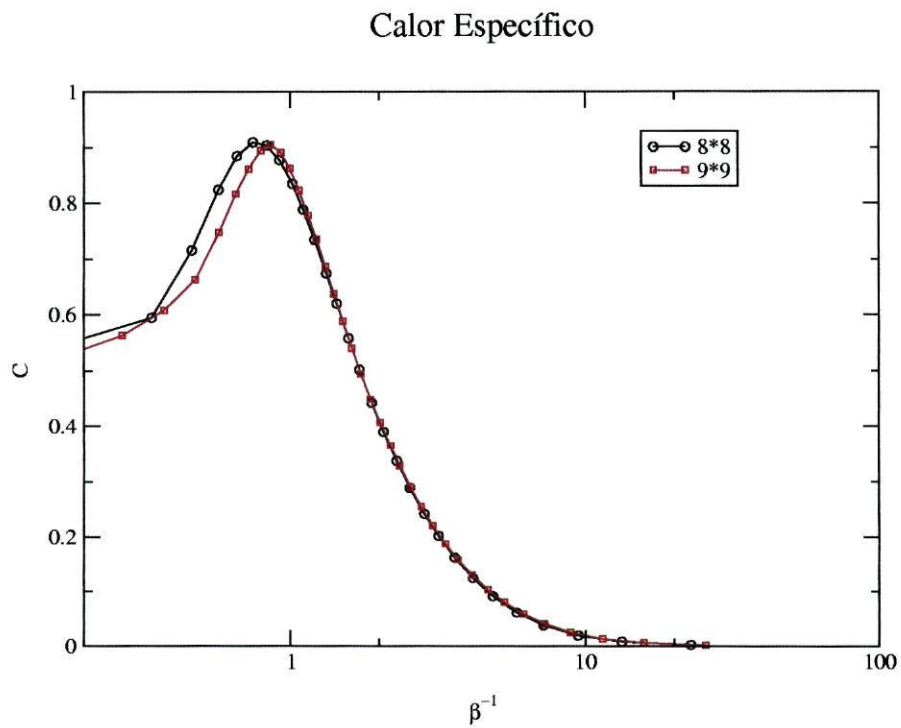


Figura 8.15.: Calor específico em função da temperatura, a campo nulo, para redes de 64 e 81, com os momentos confinados ao plano da rede (um único grau de liberdade rotacional).

## 9. Perspectivas de Trabalhos Futuros

Naturalmente, por falta de tempo, muito ficou por fazer. No que diz respeito aos modelos de tamanho finito para as partículas, é necessário estudar em pormenor os efeitos das correcções à energia de interacção na aproximação pontual e da assimetria da rede, particularmente através da análise das excitações magnéticas, iniciada na secção 7.2, e das simulações de Monte Carlo, que podem ser facilmente modificadas de forma a incluir estas correcções. A partir destes modelos deverão ser introduzidos factores de desordem nos sistemas, desde diferentes tamanhos das partículas, variação das distâncias entre elas e, para os modelos não isotrópicos, diferentes direcções de anisotropia.

Mesmo no caso da rede quadrada de dipolos pontuais, é imperativo incluir o cálculo de erros estatísticos [54] e medir funções de correlação, além de, se necessário e viável, adicionar condições de fronteira periódicas através do método de somas de Ewald para a interacção dipolar magnética [55], de forma a chegar a uma resposta conclusiva sobre a existência de uma transição de fase neste sistema (porventura análoga à de Kosterlitz-Thouless [56], embora no nosso caso as interacções sejam de longo alcance).

As características de simetria peculiares do estado fundamental encontrado para a rede quadrada finita de dipolos pontuais sugerem uma análise generalizada da termodinâmica do ponto de vista de simetrias do Hamiltoniano microscópico dipolar e a elaboração e construção de soluções analíticas de um modelo fenomenológico contínuo, como nos modelos fenomenológicos tradicionais com interacção de troca.

## 10. Conclusões

Dos resultados obtidos ao longo deste trabalho, destacam-se duas secções distintas. Por um lado, a identificação de diferentes mecanismos de redução da barreira energética que se opõe ao estabelecimento de ordem ferromagnética, nomeadamente através da inclusão de correcções de tamanho finito e da consideração de redes assimétricas. Foram calculadas correcções à energia de interacção entre dipolos elementares, unidimensionais, e discos, bidimensionais, verificando-se em ambos os casos, o levantamento da degenerescência do estado de micro-vórtice e a redução da diferença de energia entre os estados de micro-vórtice e estados ferromagnéticos. Mesmo em redes de dipolos pontuais, verificou-se que, em redes rectangulares, esta diferença de energia colapsa a zero com o aumento da assimetria da rede. No estudo das ondas magnetoestáticas, que estabeleceu a ligação entre a análise do estado fundamental e as simulações de Monte Carlo, esta barreira de energia manifestou-se na instabilidade da energia de excitação em relação ao estado fundamental ferromagnético.

No campo computacional, destaca-se a implementação bem sucedida, na eficácia e na concordância com os resultados analíticos, de um novo método de simulação multicanónica, permitindo superar os problemas inerentes à simulação computacional de sistemas com espaços de fase complexos. Este método permitiu atingir estados de baixa energia muito próximos do estado fundamental de Luttinger e Tisza e estimar grandezas termodinâmicas numa região de temperaturas onde as características da interacção dipolar dificultavam em grande medida o cálculo de médias através das simulações de Monte Carlo tradicionais. Verificou-se que a susceptibilidade magnética, a baixas temperaturas, é muito sensível às fronteiras das redes, enquanto que o máximo pronunciado do calor específico levanta a questão de uma transição de fase neste sistema.

# Lista de Figuras

- 2.1. Imagem HRTEM (*High Resolution Transmission Electron Microscopy*) de uma multicamada Co (0.8nm) / Pt (1.4nm) : Página de Internet do *Oxford Centre for Advanced Materials and Composites*. . . . . 12
- 2.2. Representação esquemática do mecanismo de magneto-resistência gigante. Os sinais + e - representam electrões com spins + e -1/2 [2]. 14
- 2.3. Multicamada descontínua (Co(2nm)/SiO<sub>2</sub>(3,5nm))<sub>20</sub>. Imagem por TEM (*Transmission Electron Microscopy*): Página de Internet do *Commissariat à l'Energie Atomique - Département de Recherche Fondamentale sur la Matière Condensée*. . . . . 15
- 3.1. Em cima, energia de uma partícula em função da direcção da magnetização no modelo de Stoner-Wohlfarth. Em baixo, curvas de magnetização  $M$  de uma partícula com campo aplicado  $H$ : (a) paralelo o eixo de anisotropia, (b) perpendicular ao eixo de anisotropia e (c) a um ângulo arbitrário com o eixo de anisotropia ( $M_s = \mu$  e  $H_K = KV/\mu$ )[15]. . . . . 20
- 3.2. Em cima, uma representação esquemática das redes de partículas magnéticas. Os ciclos de histerese, para duas direcções do campo aplicado, demonstram o aparecimento de ordem ferromagnética (painéis d), devida às interacções dipolares, à medida que diminui a distância entre grânulos, numa única direcção (no interior, os ciclos para toda a gama de valores do campo aplicado) [23]. . . . . 26
- 3.3. Imagem por SEM (*Scanning Electron Microscopy*) de uma rede de nanoestruturas de cobalto de dimensões 80x140x20 nm numa rede triangular de lado 150 nm [24]. . . . . 27

## Lista de Figuras

3.4. Imagem por MFM ( <i>Magnetic Force Microscopy</i> ) de nanoestruturas de cobalto com dimensões 80x140x17 nm separadas por 600 nm numa rede quadrada [24]. . . . .	27
4.1. Configurações básicas que permitem construir o estado fundamental de uma rede cúbica simples de dipolos pontuais. . . . .	31
4.2. Configurações básicas de menor dimensionalidade que permitem construir o estado fundamental de uma rede cúbica simples de dipolos pontuais. . . . .	32
4.3. Estado fundamental de uma rede cúbica de dipolos pontuais. Os ângulos $\psi$ e $\chi$ são parâmetros de degenerescência contínua [32]. . .	33
4.4. Energia da configuração de vórtice planar para redes quadradas de lado 2 a 40, em função de $\chi$ . O gráfico de baixo é uma ampliação do anterior, com as energias das redes de lado 21 a 40. . . . .	35
4.5. Energia das configurações ferromagnética (a mais elevada) e antiferromagnética em função do número de dipolos numa rede quadrada.	36
4.6. Rede rectangular de dipolos pontuais, com assimetria $\xi$ . . . . .	37
4.7. Decaimento da diferença de energia entre o estado ferromagnético e antiferromagnético na rede rectangular com assimetria $\xi$ . . . . .	39
5.1. Representação de duas esferas uniformemente magnetizadas. . . .	40
5.2. Representação de dois dipolos finitos, com “polos” $p_i = \pm 1$ e momento magnético $\mu = 2d$ . . . . .	41
5.3. Comparação da energia por partícula de uma rede quadrada ordenada ferromagneticamente calculada exactamente e na expansão para $d$ pequeno. . . . .	43
5.4. Possíveis configurações das redes de dipolos elementares. . . . .	44
5.5. Energia, em função do tamanho dos dipolos, das configurações “a” e “b”, ordenadas ferro e antiferromagneticamente. . . . .	45
5.6. Energias, em função do tamanho dos dipolos, da configuração “c” ordenada ferro e antiferromagneticamente. . . . .	46
5.7. Representação de dois discos uniformemente magnetizados. . . . .	46
5.8. Comportamento assintótico da energia de interacção dipolar entre dois discos magnetizados perto de se tocarem. . . . .	49

*Lista de Figuras*

6.1.	Estado fundamental de dipolos magnéticos da célula unitária $\mathbf{n}$ de uma rede quadrada sob campo aplicado segundo o eixo $x$ e pequenos desvios à orientação do estado fundamental. . . . .	53
6.2.	Levantamento da degenerescência do estado fundamental por um campo aplicado - a energia é quadrática em $h$ para $h < 1$ e linear para $h > 1$ . . . . .	54
6.3.	No limite $k \rightarrow 0$ , $\varepsilon_k^y$ é linear na direcção $\Gamma - X$ e quadrática na direcção $\Gamma - Y$ . . . . .	56
6.4.	Curvas de dispersão para os modos “no plano” (linhas sólidas) e “fora do plano” (tracejado) para diferentes valores do campo $h$ . . .	56
6.5.	Magnetização em função do campo aplicado e da temperatura. . .	57
6.6.	Correlações transversais e longitudinais. . . . .	58
6.7.	Correlações transversais e longitudinais em função do campo aplicado e da temperatura. . . . .	59
6.8.	Curvas de dispersão para $\alpha = 5, \beta = 1$ e $\rho = 0.4, 0.45, 0.49$ . . . . .	61
6.9.	$\varepsilon_k^y$ e $\varepsilon_k^z$ para $\alpha = 5, \beta = 1$ e $\rho = 0.4$ . . . . .	62
7.1.	Exemplo simples de frustração das interações num modelo de Ising para vidros de spin. . . . .	69
7.2.	Primeiro e segundo histogramas de uma simulação multicanónica. A entropia $S(E)$ , construída a partir do primeiro histograma, é quadrática ( $\beta(E)$ linear) até um dado valor de $E$ , região onde o segundo histograma é plano, e linear ( $\beta(E)$ constante) para energias mais baixas, onde o histograma volta à distribuição gaussiana. . .	74
8.1.	Representação esquemática das redes e parâmetros usados nas simulações computacionais. . . . .	76
8.2.	Em cima, simulações Metropolis de uma rede quadrada (25x25) de dipolos pontuais para diferentes temperaturas (duas curvas por temperatura). O gráfico de baixo é uma ampliação do anterior - as duas últimas curvas correspondem à mesma temperatura de $1/8\mu^2/a^3$ , com condições iniciais diferentes, e convergem para diferentes estados de equilíbrio. . . . .	78
8.3.	Simulações Metropolis a temperatura nula de uma rede quadrada planar com 25 dipolos por lado. . . . .	79

*Lista de Figuras*

8.4. Comparação dos primeiros histogramas gerados por cada algoritmo multicanónico. Note-se o ruído no hitograma gerado pelo método de Berg. . . . .	81
8.5. Comparação dos histogramas gerados pelos dois tipos de simulação multicanónica. Com o mesmo número de passos por Run, os histogramas gerados pelo novo método são mais planos e chegam a energias mais baixas do que o método de Berg. . . . .	82
8.6. Comparação das construções da entropia $S(E)$ pelos dois tipos de simulação multicanónica. Na região de energias não explorada, a entropia é constante no método de Berg ( $\beta(E) = 0$ ), o que limita a progressão da simulação, enquanto que no novo método a entropia é linear ( $\beta(E) = const.$ ). . . . .	83
8.7. Estado de mais baixa energia obtido por uma simulação multicanónica, numa rede de lado par (10x10), em cima, e de lado ímpar (11x11), em baixo. . . . .	84
8.8. Gráfico dos histogramas, normalizados, gerados pela simulação final, com um milhão de passos por partícula por "Run" na região de energia ainda não explorada, de uma rede de 64 partículas. Os sucessivos histogramas correspondem a "Runs" da simulação que permitem alargar cada vez mais a região de energias amostrada com probabilidade uniforme. . . . .	86
8.9. Gráfico da entropia $S(E)$ gerada pela simulação representada na figura anterior. As linhas dentro do gráfico correspondem à aproximação linear à entropia na região não explorada de cada "Run". . . . .	87
8.10. Gráfico da temperatura inversa $\beta(E)$ , derivada da entropia $S(E)$ representada na figura anterior. As linhas horizontais correspondem às regiões não exploradas de cada "Run", o que faz com que a amostragem nessa região seja dada pela taxa de Metropolis. . . . .	88
8.11. Inverso da susceptibilidade magnética em função da temperatura, a campo nulo, para redes de 49, 64, 81, 100, 121, 144, 169 e 196 partículas. Os dois comportamentos distintos correspondem a redes com número de partículas par ou ímpar. . . . .	89
8.12. Calor específico em função da temperatura, para redes de 49, 64, 81, 100, 121, 144, 169 e 196 partículas. . . . .	91

*Lista de Figuras*

8.13. Susceptibilidade e Calor Específico na rede quadrada de dipolos pontuais. . . . .	92
8.14. Inverso da susceptibilidade magnética em função da temperatura, a campo nulo, para redes de 64 e 81, com os momentos confinados ao plano da rede (um único grau de liberdade rotacional). . . . .	93
8.15. Calor específico em função da temperatura, a campo nulo, para redes de 64 e 81, com os momentos confinados ao plano da rede (um único grau de liberdade rotacional). . . . .	94

# Bibliografia

- [1] Baibich M.N., Broto J.M., Fert A., Nguyen Van Dau F., Petroff F., Etienne P., Creuzet G., Friederich A., and Chazelas J., "Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 61, p. 2472, 1988.
- [2] Fert A., Grunberg P., Barthélemy A., and Petroff F., "Layered magnetic structures: Interlayer exchange coupling and giant magnetoresistance," *J. Magn. Magn. Mat.*, vol. 140, p. 1, 1995.
- [3] Dieny B., Speriosu V.S., and Parkin S.S.P., "Giant magnetoresistive in soft ferromagnetic multilayers," *Phys. Rev. B*, vol. 43, p. 1297, 1991.
- [4] Moodera J.S., Kinder L.R., Wong T.M., and Meservey R., "Large magnetoresistance at room temperature in ferromagnetic thin film tunnel junctions," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 74, p. 3273, 1995.
- [5] Kakazei G.N., Freitas P.P., Cardoso S., Lopes A.M.L., Pereira de Azevedo M.M., Pogorelov Yu.G., and Sousa J.B., "Transport Properties of Discontinuous Co<sub>80</sub>Fe<sub>20</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Multilayers, repared by Ion Beam Sputtering," *IEEE Trans. Magn.*, vol. 35, no. 5, p. 2895, 1999.
- [6] Dieny B., Sankar S., McCartney M.R., Smith D.J., Bayle-Guillemaud P., and Berkowitz A.E., "Spin-dependent tunneling in discontinuous metal/insulator multilayers," *J. Magn. Magn. Mat.*, vol. 185, p. 283, 1998.
- [7] Sankar S., Berkowitz A., and Smith D., "Spin-dependent tunneling in discontinuous Co-SiO<sub>2</sub> magnetic tunnel junctions," *App. Phys. Lett.*, vol. 73, p. 535, 1998.

## Bibliografia

- [8] Parker M.A., Coffey K.R., Howard J.K., Tsang C.H., Fontana R.E., and Hylton T.L., "Overview of Progress in Giant Magnetoresistive Sensors Based on NiFe/Ag Multilayers," *IEEE Trans. Magn.*, vol. 32, no. 1, p. 142, 1996.
- [9] Dormann J.L. and Fiorani D., eds., *Magnetic Properties of Fine Particles*. Amsterdam: North Holland, 1992.
- [10] Xiao J.Q., Jiang J.S., and Chien C.L., "Giant magnetoresistance in nonmultilayer magnetic systems," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 68, p. 3794, 1992.
- [11] Berkowitz A.E., Mitchell J.R., Carey M.J., Young A.P., Zhang S., Spada F.E., Parker F.T., Hutten A., and Thomas G., "Giant magnetoresistance in heterogeneous Cu-Co alloys," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 68, p. 3745, 1992.
- [12] Gittleman J.I., Goldstein Y., and Bozowski S., "Magnetic Properties of Granular Nickel Films," *Phys. Rev. B*, vol. 5, p. 3609, 1972.
- [13] Pogorelov Y.G., Azevedo M.P., and Sousa J.B., "Microscopic theory of magnetoresistance in granular materials," *Phys. Rev. B*, vol. 58, p. 425, 1998.
- [14] Stoner E.C. and Wohlfarth E.P., "A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys," *Phil. Trans. Roy. Soc.*, vol. A240, p. 599, 1948.
- [15] Jiles D., *Introduction to Magnetism and Magnetic Materials*. London: Chapman & Hall, 2 ed., 1998.
- [16] Néel L., "Théorie du traînage magnétique des ferromagnétiques en grains fins avec applications aux terres cuites," *Ann. Geophys. (C.N.R.S.)*, vol. 5, p. 99, 1949.
- [17] Jacobs I.S. and Bean C.P., *Magnetism*, vol. III, ch. 6. New York: Academic Press, 1963.
- [18] Brown W.F. Jr., "Thermal Fluctuations of Fine Ferromagnetic Particles," *IEEE Trans. Magn.*, vol. 15, p. 1196, 1979.
- [19] Stamp P.C.E., Chudnovsky E.M., and Barbara B., "Quantum tunneling of the magnetization in solids," *Int. J. Mod. Phys.*, vol. 6, p. 1355, 1992.

## Bibliografia

- [20] Coffey W.T., Garanin D.A., Kachkachi H., and McCarthy D.J., "Interpolation formulae between axially symmetric and non-axially symmetric Kramers' escape rates for single-domain ferromagnetic particles in the intermediate to high-damping limit," *J. Mag. Mag. Mat.*, vol. 221, p. 110, 2000.
- [21] Morup S. and Tronc E., "Superparamagnetic relaxation of weakly interacting particles," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 72, p. 3278, 1994.
- [22] Dormann J.L., Bessais L., and Fiorani D., "A dynamic study of small interacting particles : superparamagnetic model and spin-glass laws," *J. Phys. C*, vol. 21, p. 2015, 1988.
- [23] Cowburn R.P., Adeyeye A.O., and Welland M.E., "Controlling magnetic ordering in coupled nanomagnet arrays," *New Journal of Physics*, vol. 1, p. 16.1, 1999.
- [24] Evoy S., Carr D.W., Sekaric L., Suzuki Y., Parpia J.M., and Craighead H.G., "Thickness dependent binary behaviour of elongated single-domain cobalt nanostructures," *J. Appl. Phys.*, vol. 87, p. 404, 2000.
- [25] Takzei G.A., Gun'ko L.P., Sych I.I., Surzhenko A.B., Cerepov S.V., Troshchenkov Yu.N., and Mirebeau I., "Onset of long-range ferromagnetic order in a system of ferromagnetic particles with giant magnetic moments," *J. Exp. Theor. Phys.*, vol. 87, no. 5, p. 1003, 1998.
- [26] Sun S., Murray C.B., Weller D., Folks L., and Moser A., "Monodisperse FePt Nanoparticles and Ferromagnetic FePt Nanocrystal Superlattices," *Science*, vol. 287, p. 1989, 2000.
- [27] White R.L., New R.M.H., and Pease R.F.W., "Patterned Media: A Viable Route to 50 Gbit/in.2 and Up for Magnetic Recording?," *IEEE Trans. Magn.*, vol. 33, p. 990, 1997.
- [28] Prinz G.A., "Magnetoelectronics," *Science*, vol. 282, p. 1660, 1998.
- [29] Averin D.V., "Solid-state qubits under control," *Nature*, vol. 398, p. 748, 1999.
- [30] Luttinger J.M. and Tisza L., "Theory of Dipole Interaction in Crystals," *Phys. Rev.*, vol. 70, p. 954, 1946.

## Bibliografia

- [31] Niemeyer Th., "On the ground state of crystals with dipole-dipole and exchange interactions," *Physica*, vol. 57, p. 281, 1972.
- [32] Belobrov P.I., Geht R.S., and Ignatchenko V.A., "Ground State in systems with dipole interaction," *Sov. Phys. JETP*, vol. 57, p. 636, 1983.
- [33] Brankov J.G. and Danchev D.M., "Ground state of an infinite two-dimensional system of dipoles on a lattice with arbitrary rhombicity angle," *Physica A*, vol. 144, p. 128, 1986.
- [34] Zimmerman G.O., Ibrahim A.K., and Wu F.Y., "Planar classical dipolar system on a honeycomb lattice," *Phys. Rev. B*, vol. 37, p. 2059, 1988.
- [35] Prakash S. and Henley C.L., "Ordering due to disorder in dipolar magnets on two-dimensional lattices," *Phys. Rev. B*, vol. 42, p. 6574, 1990.
- [36] Jackson J.D., *Classical Electrodynamics*, pp. 198–201. New York: John Wiley & Sons, 3rd ed., 1999.
- [37] Aharoni A., "Magnetic Interaction Between Spheres," *IEEE Trans. Magn.*, vol. 23, no. 3, p. 1853, 1987.
- [38] Pogorelov Yu.G., "Long- and Short-Range Order in Granular Arrays with Dipolar Coupling," *Mat. Science Forum*, 2001.
- [39] Swendsen R.H. and Wang J.S., "Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 58, p. 86, 1987.
- [40] Edwards S.F. and Anderson P.W., "Theory of spin glasses," *J. Phys. F: Metal Phys.*, vol. 5, p. 965, 1975.
- [41] Kirkpatrick S. and Sherrington D., "Infinite-ranged models of spin-glasses," *Phys. Rev. B*, vol. 17, no. 11, p. 4384, 1978.
- [42] Landau D.P. and Binder K., *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [43] Newman M.E.J. and Barkema G.T., *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. New York: Oxford University Press, 1999.

## Bibliografia

- [44] Marinari E. and Parisi G., "Simulated Tempering: A New Monte Carlo Scheme," *Europhys. Lett.*, vol. 19, p. 451, 1992.
- [45] Marinari E., Parisi G., and Ruiz-Lorenzo J.J., "Numerical Simulations of Spin Glass Systems," *World Scientific*, pp. 59–98, 1998.
- [46] Torrie G.M. and Valleau J.P., "Nonphysical sampling distributions in Monte Carlo free energy estimation: Umbrella sampling," *J. Comp. Phys.*, vol. 23, p. 187, 1977.
- [47] Berg B. and Neuhaus T., "Multicanonical ensemble: A new approach to simulate first-order phase transitions," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 68, p. 9, 1992.
- [48] Lee J., "New Monte Carlo algorithm: Entropic sampling," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 71, p. 211, 1993.
- [49] Lopes J.M.V.P., Lopes dos Santos J.M.B., and Costa M.D., "A new algorithm for simulation of continuous systems by the multicanonical method." por publicar, 2001.
- [50] Ferrenberg A.M. and Swendsen R.H., "New Monte Carlo technique for studying phase transitions," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 61, p. 2635, 1988.
- [51] Oliveira P.M.C., Penna T.J.P., and Herrmann H.J., "Broad Histogram Method," *Braz. J. Phys.*, vol. 26, p. 677, 1996.
- [52] El-Hilo M., Chantrell R.W., and O'Grady K., "A model of interaction effects in granular magnetic solids," *J. Appl. Phys.*, vol. 84, no. 9, p. 5114, 1998.
- [53] Lage E.J.S., *Física Estatística*. Lisboa: Fund. Calouste Gulbenkian, 1995.
- [54] Ferrenberg A.M., Landau D.P., and Swendsen R.H., "Statistical errors in histogram reweighting," *Phys. Rev. E*, vol. 51, p. 5092, 1995.
- [55] Fujiki N.M., De'Bell K., and Geldart D.J.W., "Lattice sums for dipolar systems," *Phys. Rev. B*, vol. 36, no. 16, p. 8512, 1987.
- [56] Kosterlitz J.M. and Thouless D.J., "Ordering, metastability, and phase transitions in two-dimensional systems," *J. Phys. C*, vol. 6, p. 1181, 1973.

# Apêndice: Código Fonte

Subrotinas que diferenciam a simulação Multicanônica da simulação Metropolis

---

## dipolos.h - parâmetros

---

```
#define Dim      8
#define Npart    64
#define Pi       3.141592653589793
#define Hext     0.0000000000000000
#define Ntrig    720
#define Nintv    ( 10*Npart )
#define Nintv_b  ( Npart )
#define minimum  ( - 3. - Hext)
#define Delta_e  ( (-minimum + 1.)/Nintv)
#define Delta_e_b ( (-minimum + 1.)/Nintv_b)
#define eg(i)    ( minimum + ((1.*i)*Delta_e)*Npart
#define eg_b(i) ( minimum + ((1.*i)*Delta_e_b)*Npart
#define jj(i)    ( (int) (((i)/Npart-minimum)/Delta_e) )
#define jj_b(i) ( (int) (((i)/Npart-minimum)/Delta_e_b) )
#define Npassos ( 100000*Npart )
#define Nruns   100
#define f       2.

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>

void seed(unsigned);
double drandom();
long lrandom();
void criar_amostra();
```

```

double energia_total();
void campo();
void troca(int);
void distr();
double entropia(double);
double beta(double);
void medias();
void grafico();
void saida();

```

---

### dipolos.c - subrotina principal

---

```

#include "dipolos.h"

double r3[Npart*(Npart-1)/2];
double ux[Npart*(Npart-1)/2], uy[Npart*(Npart-1)/2], uz[Npart*(Npart-1)/2];
double mx[Npart], my[Npart], mz[Npart];
double Hx[Npart], Hy[Npart], Hz[Npart];
double mxtot, mytot, mztot;
double energia;
double s[Ntrig], c[Ntrig];
double E_med[Nintv], E2_med[Nintv];
double E[Nruns+1], Sigma[Nruns+1], Sigma2[Nruns+1], Beta[Nruns+1], Entropia[Nruns+1];
double Mx_med[Nintv], Mx2_med[Nintv];
double Mx_med_b[Nintv_b], Mx2_med_b[Nintv_b];
double E_med_b[Nintv_b], E2_med_b[Nintv_b];
double Norm[Nintv], Norm_b[Nintv_b];
double susc[Nintv_b], ce[Nintv_b];
double minima = - 2.4;
long long int Histograma[Nintv];
long long int i;
int Run;
FILE *fhist, *fentropia, *fbeta;

int main()
{
    long long int u, v;
    double deltaE, deltaE2, e_med, e2_med;

    seed(123456);

    fhist = fopen("hist.dat", "w");

```

```
fentropia = fopen("entropia.dat", "w");
fbeta = fopen("beta.dat", "w");
```

```
for (i = 0; i < Nintv; i++)
{
    Histograma[i] = 0;
    Norm[i] = 0.;
    Mx_med[i] = 0.;
    Mx2_med[i] = 0.;
    E_med[i] = 0.;
    E2_med[i] = 0.;
}
```

```
Run = 0;
E[0] = 0.;
Beta[0] = 0.;
Entropia[0] = 0.;
```

```
criar_amostra();
```

```
while ( (Run < Nruns) )
{
    i = 0;
    u = 0;
    v = 0;
    e_med = 0.;
    e2_med = 0.;
    deltaE = 0.;
    deltaE2 = 0.;
```

```
for (i = 0; i < Nintv_b; i++)
{
    Norm_b[i] = 0.;
    Mx_med_b[i] = 0.;
    Mx2_med_b[i] = 0.;
    E_med_b[i] = 0.;
    E2_med_b[i] = 0.;
}
```

```
while (v < Npassos)
{
```

```

int ip =(int) (drandom()*Npart);

troca(ip);

i++;

Histograma[jj(energia)]++;

if (i%Npart == 0)
{
E_med[jj(energia)]++;
E2_med[jj(energia)]++;

Mx_med[jj(energia)] += mxtot;
Mx2_med[jj(energia)] += mxtot*mxtot;

Norm[jj(energia)]++;
}

if (Run == 0)
{
e_med += energia;
e2_med += energia*energia;
u++;
}

if (energia < E[Run])
{
deltaE += E[Run]-energia;
deltaE2 += (E[Run]-energia)*(E[Run]-energia);
v++;
}

if (energia/Npart < minima)
grafico();
}

if (Run == 0)
{
e_med /= u;
e2_med /= u;
}

```

```

    E[Run] = e_med;
    Sigma2[Run] = e2_med - pow(e_med, 2.);
    Sigma[Run] = sqrt(Sigma2[Run]);
}
else
{
    deltaE /= v;
    deltaE2 /= v;
    Sigma2[Run] = deltaE2;
    Sigma[Run] = sqrt(Sigma2[Run]);
}

E[Run+1] = eg(jj(E[Run] - f*Sigma[Run]));

Beta[Run+1] = Beta[Run] + f/Sigma[Run];

Entropia[Run+1] = Entropia[Run] -
1./(2.*Sigma2[Run])*(E[Run+1]-E[Run])*(E[Run+1]-E[Run]) +
Beta[Run]*(E[Run+1]-E[Run]);

    Run++;

    medias();

    saida();
}
exit(0);
}

```

---

### entropia.c

---

```

#include "dipolos.h"

double entropia(double eng)
{
    auto int r;
    extern int Run;
    extern double E[Nruns+1], Sigma2[Nruns+1], Beta[Nruns+1], Entropia[Nruns+1];

    if ( (Run == 0) || (eng > E[0]) )
        return 0.;
}

```

```

for (r = 0; r < Run; r++)
  if (eng > E[r+1])
    return (Entropia[r] - 1./(2.*Sigma2[r])*(eng-E[r])*(eng-E[r])+Beta[r]*(eng-E[r]));

return (Entropia[Run] + Beta[Run]*(eng-E[Run]));
}

```

---

### médias.c

---

```

#include "dipolos.h"

void medias()
{
  auto int iint, iint_b;
  extern double E[Nruns+1];
  extern double Mx_med[Nintv], Mx2_med[Nintv], E_med[Nintv], E2_med[Nintv];
  extern double Mx_med_b[Nintv_b], Mx2_med_b[Nintv_b], E_med_b[Nintv_b],
  E2_med_b[Nintv_b];
  extern double Norm[Nintv], Norm_b[Nintv_b];
  extern int Run;

  for (iint_b = jj_b(E[Run-1]); iint_b < jj_b(0); iint_b++)
  {
    for (iint = jj(E[Run-1]); iint < jj(0); iint++)
    {
      double P = exp(entropia(eg(iint))-beta(eg_b(iint_b))*eg(iint)-
(entropia(eg_b(iint_b))-beta(eg_b(iint_b))*eg_b(iint_b)));

      Mx_med_b[iint_b] += Mx_med[iint]/Norm[iint]*P;
      Mx2_med_b[iint_b] += Mx2_med[iint]/Norm[iint]*P;

      E_med_b[iint_b] += E_med[iint]*eg(iint)/Norm[iint]*P;
      E2_med_b[iint_b] += E2_med[iint]*eg(iint)*eg(iint)/Norm[iint]*P;

      Norm_b[iint_b] += P;
    }
  }
}

```

---

### saída.c

---

```

#include "dipolos.h"

```

```

void saida()
{
    auto int iint, iint_b;
    extern long long int i;
    extern double E[Nruns+1];
    extern double Mx_med_b[Nintv_b], Mx2_med_b[Nintv_b], E_med_b[Nintv_b],
E2_med_b[Nintv_b];
    extern double Norm_b[Nintv_b];
    extern long long int Histograma[Nintv];
    extern int Run;
    extern FILE *fhist, *fentropia, *fbeta;
    auto FILE *fsusc, *fce;
    extern double susc[Nintv_b], ce[Nintv_b];

    for(iint = 0; iint < Nintv; iint++)
    {
        fprintf(fhist, "%g %g\n", eg(iint)/Npart, Histograma[iint]/(i*Delta_e));

        Histograma[iint] = 0;

        fprintf(fentropia, "%g %g\n", eg(iint)/Npart, entropia(eg(iint))/Npart);
        fprintf(fbeta, "%g %g\n", eg(iint)/Npart, beta(eg(iint)));
    }

    fsusc = fopen("susc.dat", "w");
    fce = fopen("ce.dat", "w");

    for(iint_b =jj_b(E[Run-1]); iint_b < jj_b(0); iint_b++)
    {
        susc[iint_b] = (Mx2_med_b[iint_b]/Norm_b[iint_b] -
pow(Mx_med_b[iint_b]/Norm_b[iint_b], 2.))*beta(eg_b(iint_b));
        fprintf(fsusc, "%g %g\n", 1./beta(eg_b(iint_b)), susc[iint_b]/Npart);
        ce[iint_b] = (E2_med_b[iint_b]/Norm_b[iint_b] -
pow(E_med_b[iint_b]/Norm_b[iint_b], 2.))*pow(beta(eg_b(iint_b)), 2.);
        fprintf(fce, "%g %g\n", 1./beta(eg_b(iint_b)), ce[iint_b]/Npart);
    }
    fflush(fsusc); fclose(fsusc); fflush(fce); fclose(fce);
    fprintf(fentropia, "\n\n"); fprintf(fhist, "\n\n"); fprintf(fbeta, "\n\n");
    fflush(fentropia); fflush(fhist); fflush(fbeta);
}

```