

Caracterização e simulação de configurações magnéticas de nanopartículas com arranjos de vórtice magnético

Palavras-Chave: nanopartículas magnéticas , vórtice, simulação micromagnética

Autores(as):

Gabriel Víctor de Oliveira, IFGW – UNICAMP

Prof. Dr. Marcelo Knobel (orientador), IFGW – UNICAMP

Prof. Dr. Diego Muraca (coautor), IFGW – UNICAMP

INTRODUÇÃO:

Nanopartículas magnéticas (NPMs) são promissoras em aplicações teranósticas, tratamentos que combinam técnicas de terapia com diagnóstico [Ref. 1,2]. É possível direcionar NPMs pela aplicação de gradientes de campos magnéticos, como também transferir calor ao meio, utilizando campos alternados com frequência e amplitude específicos. Isso possibilita aplicações das NPMs para hipertermia magnética no tratamento de câncer. Somado a isso, NPMs também podem ser utilizadas como agente de contraste em ressonância magnética. As aplicações acima mencionadas, entre outras propriedades, fazem das NPMs um objeto de estudo por milhares de pesquisadores em todo o mundo.

As NPMs, podem apresentar diferentes possíveis configurações ou ordenamentos magnéticos como monodomínio, multidomínio ou estados do tipo vórtice. Neste trabalho se apresentam estudos de NPMs e suas possíveis configurações magnéticas em determinados campos magnéticos aplicados e para certa frequência de variação dos mesmos. Em particular foram estudados nanocubos de magnetita (Fe_3O_4) de diferentes tamanhos com campos alternados com amplitude 200 Oe e frequência 1 MHz. A partir deste estudo se busca mostrar os diâmetros característicos onde vórtices magnéticos ocorrem, densidades de energia e campos específicos quando os nanocubos atingem a configuração de vórtice e outras configurações. Os resultados foram obtidos através de simulações micromagnéticas usando como embasamento teórico o formalismo da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) na situação de temperatura nula.

METODOLOGIA:

Para as simulações foram considerados cubos de aresta de comprimento L (30 a 290 nm). O tamanho das células, do “mesh” dos cubos na simulação foi de $5 \times 5 \times 5 \text{ nm}^3$. As dimensões do “mesh” foram consideradas de maneira a garantir que sejam menores que o comprimento de troca da magnetita $l_{\text{ex}} = 8,31 \text{ nm}$, sendo que $A = 1,0 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ é a constante de troca,

$M_s = 4,8 \times 10^5 \text{ A/m}$ é a magnetização de saturação e μ_0 é a permeabilidade do vácuo. A constante de anisotropia cúbica é $K = -1,0 \times 10^4 \text{ J/m}^3$.

A densidade energia do sistema é dada pela hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = -A\mathbf{m} \cdot \nabla^2 \mathbf{m} - K[(\mathbf{m} \cdot \mathbf{u}_1)^2(\mathbf{m} \cdot \mathbf{u}_2)^2 + (\mathbf{m} \cdot \mathbf{u}_2)^2(\mathbf{m} \cdot \mathbf{u}_3)^2 + (\mathbf{m} \cdot \mathbf{u}_1)^2(\mathbf{m} \cdot \mathbf{u}_3)^2] - \frac{1}{2}\mu_0 M_s \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}_d - \mu_0 M_s \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}$$

$\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$ são os vetores das direções de anisotropia, $\langle 1, 0, 0 \rangle$, e $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M_s$ é o vetor unitário da magnetização. \mathbf{H}_d é o campo desmagnetizante e \mathbf{H} é o campo alternado aplicado ao longo do eixo $[0, 0, 1]$. Na presença de um campo magnético externo a dinâmica da magnetização é controlada pela equação de LLG, que é formada por termos de precessão e de amortecimento:

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\frac{\gamma_0}{1 + \alpha^2} \mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} - \frac{\gamma_0 \alpha}{1 + \alpha^2} \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}})$$

onde $\gamma_0 = 2,211 \times 10^5 \text{ m/As}$ é a constante giromagnética, $\alpha = 0,5$ é a constante de amortecimento e \mathbf{H}_{eff} é o campo efetivo gerado pela densidade de energia total do sistema, a qual é dada pela soma da contribuição de todas as energias.

Em relação a evolução do tempo, o sistema foi simulado por 5 nanossegundos, até chegarmos num estado de equilíbrio, ou seja, quando $dE/dt \ll 0$.

A caracterização dos vórtices e de outros estados observados foi feita tanto por inspeção visual do arranjo de magnetização resultante quanto através do cálculo da carga topológica bidimensional, que representa a topologia da configuração de vórtice e nos permite distinguir a qualidade de um vórtice através de sua densidade de carga magnética.

$$S = \frac{1}{4\pi} \iint q \, dx dy = \frac{1}{4\pi} \iint \mathbf{m} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial y} \right) dx dy$$

As simulações micromagnéticas foram realizadas usando o ecossistema proveniente do pacote *Ubermag* do *Python* [Ref. 9], que por sua vez utiliza o *Object Oriented MicroMagnetic Framework* (OOMMF) como calculadora micromagnética [Ref. 10].

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Os parâmetros utilizados nestas simulações foram baseados em resultados prévios de nanopartículas obtidas experimentalmente no IFGW pelo estudante de IC, Gustavo Soares da Silva, PIBIC Quota 2022/2023. As partículas obtidas por decomposição térmica apresentaram tamanhos bem definidos e morfologias cúbicas. Previamente, foram estudadas as propriedades magnéticas mostrando comportamentos magnéticos esperados para partículas monodomínio. O intuito deste trabalho é determinar se o comportamento usual nas medidas de magnetização já obtidas são decorrentes da existência de configurações magnéticas com estados tipo vórtice.

A fim de implementar as simulações, o primeiro passo foi reproduzir resultados previamente publicados por outros autores, utilizando aproximações numéricas similares [Ref. 3]. Desta forma, nosso sistema representa de forma fidedigna vários aspectos experimentais e consequentemente é bom preditor do comportamento dessas partículas na realidade. Portanto, calculamos as distribuições de equilíbrio para a magnetização e geramos um diagrama de fase *para os nanocubos de magnetita*.

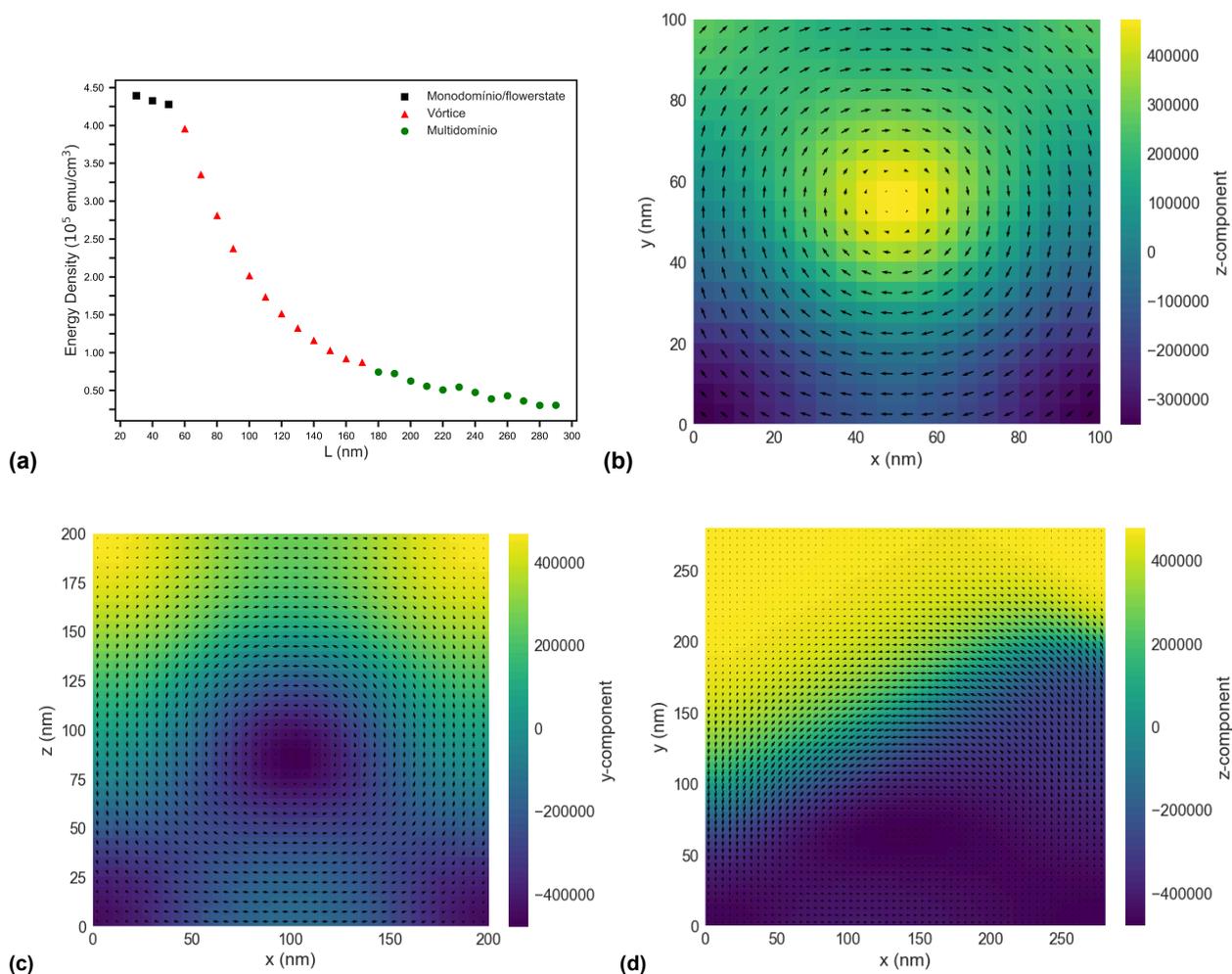


Figura 1: (a) Diagrama de fase do estado de equilíbrio da magnetização para nanocubos de magnetita. (b) Configuração magnética de vórtice para $L = 100 \text{ nm}$. (c) Configuração magnética de vórtice para $L = 200 \text{ nm}$. (d) Configuração magnética denotando a configuração de multidomínio para $L = 280 \text{ nm}$.

Na figura (1a) podemos observar que conforme o tamanho do diâmetro aumenta saímos de um estado onde existe uma competição entre monodomínio e *flower state* entre 50 e 60 nm e a partícula passa a exibir estado de vórtice, esse comportamento perdura até 170 nm, deste diâmetro até 180 nm notamos uma queda abrupta na energia do sistema que indica a região de transição de vórtices para multidomínio, notemos porém que mesmo depois dessa região os vórtices continuam a ocorrer porém em conjunto com outros domínios magnéticos, figura 2.

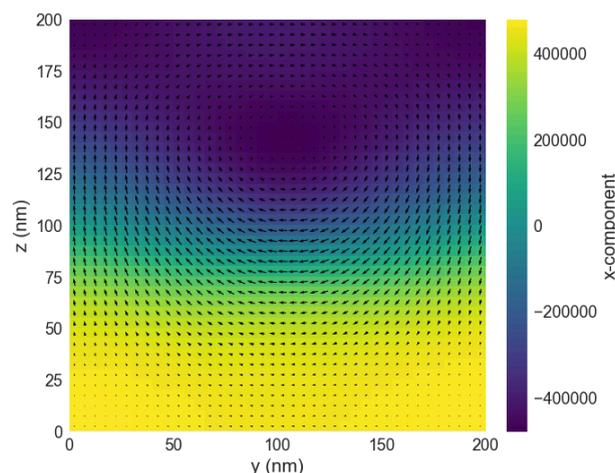


Figura 2: Domínio magnético (inferior) separado do núcleo de vórtice (topo) por uma parede de domínio para $L = 200$ nm

A figura (1b) mostra o estado de vórtice para $L = 100$ nm percebemos que este arranjo ocorre em toda a partícula com um núcleo de vórtice bem delimitado no centro, o que caracteriza um estado de vórtice puro. A figura (1c) mostra também um estado de vórtice para $L = 200$ nm, diferentemente de (1b) o núcleo de vórtice não é bem delimitado e também temos inversão da magnetização em torno do vórtice o que indica caráter multidomínio. A figura (1d) mostra a separação entre dois domínios por uma parede de domínio em $L = 280$ nm, o efeito é perceptível pois em uma região da partícula a magnetização é máxima em um sentido até ela transitar por uma região de magnetização nula, a parede de domínio, e inverter completamente seu sentido.

O comportamento é razoavelmente previsto pela teoria, visto que conforme o tamanho da partícula aumenta, interações magnetostáticas passam a ter mais significância que interações de troca. Os vetores magnetização também se curvam a fim de diminuir a energia desmagnetizante, o que ajuda a minimizar a energia do sistema. A formação de vórtices para diâmetros de multidomínio, como indicado pela figura (1c), continua a acontecer evidenciando a qualidade desse arranjo para minimizar a energia do sistema.

Além disso, com objetivo de facilitar a detecção dos vórtices, valores de carga topológica em torno de $S = 0,5$ se mostraram efetivos para identificar vórtices e concordam com a literatura [Ref. 4]

CONCLUSÕES:

As partículas aqui estudadas apresentam concordância com dados experimentais já medidos [Ref. 7]. A presença de vórtices magnéticos confirma a possibilidade de aplicações que vão de hipertermia magnética até mesmo armazenamento de dados em mídia magnética. As simulações micromagnéticas levando em conta campo de 200 Oe e frequência de 1 MHz aqui feitas mostram que vórtices magnéticos são promissores, pois apresentam diâmetros maiores facilitando aplicações em

certos usos médicos ante partículas superparamagnéticas, onde menor concentração de partícula e maior volume são interessantes para geração de calor. Além dos resultados obtidos é relevante em futuros trabalhos analisar situações complementares à aqui apresentadas, levando em conta parâmetros como temperaturas não-nulas e variação na morfologia das partículas.

BIBLIOGRAFIA

1. PANKHURST, Q. A. et al. **Progress in applications of magnetic nanoparticles in biomedicine.** Journal of Physics D: Applied Physics, v. 42, n. 22, p. 224001, 2009.
2. LAURENT, Sophie et al. **Magnetic fluid hyperthermia: focus on superparamagnetic iron oxide nanoparticles.** Advances in colloid and interface science, v. 166, n. 1-2, p. 8-23, 2011.
3. USOV, N. A.; NESMEYANOV, M. S.; TARASOV, V. P. **Magnetic vortices as efficient nano heaters in magnetic nanoparticle hyperthermia.** Scientific reports, v. 8, n. 1, p. 1224, 2018.
4. BERGANZA, Eider et al. **Half-hedgehog spin textures in sub-100 nm soft magnetic nanodots.** Nanoscale, v. 12, n. 36, p. 18646-18653, 2020.
5. GUIMARÃES, Alberto P.; GUIMARAES, Alberto Passos. **Principles of nanomagnetism.** Berlin: Springer, 2009.
6. CULLITY, Bernard Dennis; GRAHAM, Chad D. **Introduction to magnetic materials.** John Wiley & Sons, 2011.
7. LI, Qing et al. **Correlation between particle size/domain structure and magnetic properties of highly crystalline Fe₃O₄ nanoparticles.** Scientific reports, v. 7, n. 1, p. 9894, 2017.
8. BREZOVICH, Ivan A. **Low frequency hyperthermia: capacitive and ferromagnetic thermoseed methods.** Med. Phys. Monogr, v. 16, p. 82-111, 1988.
9. BEG, Marijan; PEPPER, Ryan A.; FANGOHR, Hans. **User interfaces for computational science: A domain specific language for OOMMF embedded in Python.** AIP Advances, v. 7, n. 5, 2017.
10. DONAHUE, Michael Joseph; PORTER, Donald G. **OOMMF User's Guide: Version 1.0.** 1999.