



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE SALINÓPOLIS
FACULDADE DE ENGENHARIA

**DESLOCAMENTO DA TEMPERATURA DE BLOQUEIO EM MATERIAIS
FERROMAGNÉTICOS NANOMÉTRICOS**

Pedro Thyago Pereira Gomes¹

¹ Aluno do curso de Engenharia de Exploração e Produção de Petróleo.
E-mail: pdrothyago@gmail.com

PEDRO THYAGO PEREIRA GOMES

**DESLOCAMENTO DA TEMPERATURA DE BLOQUEIO EM MATERIAIS
FERROMAGNÉTICOS NANOMÉTRICOS**

Trabalho de Conclusão de Curso, apresentado como requisito para a obtenção de grau de Bacharel em Engenharia de Exploração e Produção de Petróleo, pela Universidade Federal do Pará.

Orientador: Dr. Thiago Rafael da Silva Moura.

SALINÓPOLIS

2023

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) de acordo com ISBD
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Pará
Gerada automaticamente pelo módulo Ficat, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)**

P436d Pereira Gomes, Pedro Thyago.
Deslocamento da temperatura de bloqueio em materiais
ferromagnéticos nanométricos / Pedro Thyago Pereira Gomes. —
2019.
29 f. : il. color.

Orientador(a): Prof. Dr. Thiago Rafael da Silva Moura
Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Universidade
Federal do Pará, Campus Universitário de Salinópolis, Curso de
Engenharia de Exploração e Produção de Petróleo, Salinópolis,
2019.

1. Temperatura de bloqueio. 2. Kaniadakis. 3. Simulações
numéricas. I. Título.

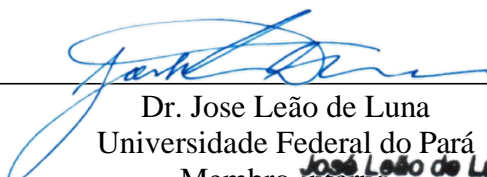
CDD 530.13

Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) aprovado por:

BANCA EXAMINADORA

Dr. Thiago Rafael da Silva Moura
Universidade Federal do Pará
Orientador

Dr. Silvério Sirotheau Corrêa Neto
Universidade Federal do Pará
Membro Interno



Dr. Jose Leão de Luna
Universidade Federal do Pará
Membro Interno

Jose Leão de Luna
UFPA - Salinópolis
SIAPE: 1791882

Dra. Maria Liduína das Chagas
Universidade Federal do Sul e Sudeste do Pará
Membro Externo

Data de submissão: ___/12/2023

Data de aprovação: 22/12/2023.

AGRADECIMENTO

Agradeço.

Primeiramente a Deus por ter me proporcionado toda força para chegar ao final da minha graduação e nunca desistir dos meus sonhos e objetivos.

Especialmente a minha mãe, Valcirene de Souza Pereira, por todo suporte financeiro e incentivos emocionais para continuar na minha jornada em ser um engenheiro, me apoiando a sempre seguir em frente com força e garra, sendo honesto e determinado.

Aos meus irmãos, José Marcelo Pereira Gomes e Athyla Vinícius Pereira dos Santos, por todo apoio, parceria e incentivo.

Ao meu companheiro de vida, Roberto Asevedo Aliverti, por todo o amor a mim dedicado, por me ensinar e me fazer feliz todos os dias. Obrigado pela amizade, parceria, apoio e incentivo para me manter firme nessa reta final da graduação.

Ao meu orientador, Thiago Rafael da Silva Moura, por acreditar em mim, me apoiar e direcionar. Agradeço pela paciência e dedicação, incentivando a sempre dar o meu melhor, pela amizade construída, pelos diversos conselhos sobre a vida e a carreira na indústria.

Aos meus demais amigos e familiares, que mesmo de longe acompanharam a minha caminhada na universidade e me apoiaram a seguir em frente.

E a todos os meus professores da Universidade Federal do Pará – Campus Salinópolis, pelo conhecimento repassado.

RESUMO

Neste estudo, empregamos simulações numéricas pelo Método de Monte Carlo, utilizando as Estatísticas Generalizadas de Kaniadakis, para evidenciar o deslocamento da energia de bloqueio em materiais ferromagnéticos nanométricos, como o ferro, e para avaliar a temperatura de bloqueio sob diferentes valores do parâmetro *Kappa*, ou κ -estatística. Os resultados apresentados referem-se a nanopartículas ferromagnéticas da mesma ordem que o ferro, com geometria cúbica e dimensões de aresta de 15, 25 e 35 nm. Os gráficos elaborados representam as curvas de magnetização ZFC (Zero-Field-Cooled) e FC (Field Cooled), permitindo a determinação da distribuição da temperatura de bloqueio. Essas curvas manifestam uma temperatura de bloqueio consistente e um comportamento condicionado à magnitude do campo magnético aplicado, o que se mantém similar para diferentes valores de *Kappa*.

Palavras-chave: nanopartículas; simulações numéricas; κ -estatística; temperatura de bloqueio.

1 INTRODUÇÃO

O magnetismo é um fenômeno natural intrinsecamente associado à atração ou repulsão entre materiais semelhantes ou pedaços de ferro, e manifesta-se de maneira proeminente em substâncias designadas como ímãs. Esse fenômeno e as propriedades magnéticas desses materiais têm sua origem na escala atômica, exemplificado pelo átomo de hidrogênio. Nele, o movimento do único elétron em órbita ao redor do núcleo é interpretado como uma corrente elétrica, gerando um momento magnético e, por conseguinte, originando o chamado momento de dipolo magnético (Holanda et al., 2020). Segundo a lei de Ampère-Maxwell, esse momento de dipolo magnético é concebido como um pequeno ímã em escala atômica, induzindo um campo magnético de pequena intensidade (Holanda et al., 2020). Quando sujeitos a um campo magnético externo, esses materiais exibem propriedades magnéticas distintas, cujo comportamento pode variar devido à orientação dos seus momentos magnéticos em relação ao campo aplicado (Arantes, 2010). As categorias que diferenciam as propriedades magnéticas desses materiais incluem o diamagnetismo, paramagnetismo, antiferromagnetismo e ferromagnetismo. Este estudo concentrou-se na investigação de estruturas de materiais ferromagnéticos.

Os materiais ferromagnéticos destacam-se como os materiais magnéticos mais evidentes e relevantes para aplicações práticas, uma vez que exibem propriedades magnéticas distintivas que os diferenciam de outras categorias. Uma das características fundamentais desses materiais é a capacidade de se manterem magnetizados de forma espontânea em temperatura ambiente, mesmo na ausência de um campo magnético externo. Esse atributo os torna especialmente valiosos como ímãs permanentes. Entretanto, acima de uma determinada temperatura, conhecida como temperatura crítica, de bloqueio ou temperatura de Curie, a magnetização espontânea do material desaparece. Nesse ponto, o material transita para um estado chamado paramagnético, uma fase magnética fraca que se manifesta apenas na presença de um campo magnético externo (Salvador, 2014).

Nanomaterial é aquele que pode ser encontrado na natureza ou sintetizado artificialmente, possuindo dimensões entre 1 e 100 *nm*. Isso inclui nanotubos de carbono, fulerenos e agregados ou aglomerados de partículas, os quais apresentam propriedades, fenômenos e efeitos biológicos atribuídos a essas dimensões (Camacho, 2017). Esses materiais constituem um tipo de sistema singular que incorpora características estruturais em escalas nanométricas e graus de liberdade dos elétrons, revelando um potencial significativo para

aplicações tecnológicas e na construção de ciências fundamentais (Costa et al., 2019). Dentro desse conjunto de nanomateriais, destacam-se as nanopartículas magnéticas, que exibem propriedades magnéticas únicas e têm sido amplamente utilizadas em diversos contextos devido ao seu notável potencial tecnológico. Algumas das áreas de aplicação desses materiais magnéticos nanoestruturados incluem o imageamento por ressonância magnética (IRM), memórias magnéticas permanentes, junções magnéticas de tunelamento, nanoantenas magnéticas, produção e conversão de energia por meio da utilização de nanocatalisadores, além de desempenhar papel na indústria do petróleo como nanosensores e nanofluidos nas atividades de prospecção e exploração, respectivamente (Binder, 2009; Tutor-Sánchez, 2018; Miranda, 2016).

Além disso, a pesquisa sobre materiais magnéticos nanoestruturados tem implicações práticas e tecnológicas significativas. A modelagem precisa desses materiais é essencial para o desenvolvimento de novas tecnologias, incluindo dispositivos eletrônicos mais eficientes e sistemas de armazenamento de energia mais avançados. No entanto, a complexidade desses materiais exige uma abordagem estatística igualmente avançada, justificando a investigação de técnicas como as de Kaniadakis.

De acordo com Binder (2009), o nanomaterial de ferro e seus óxidos apresentam-se como potenciais catalisadores para a liquefação de carvão, com foco na quebra das ligações carbono-carbono. Muito tem-se falado no uso de depósitos de carvão para a extração de cadeias de carbono como matéria-prima química na substituição do petróleo, para tanto é preciso uma técnica conveniente e barata da quebra do carvão em componentes menores, catalisadores à base de ferro emergem como opção viável, sendo economicamente produzidos (Costa, et al., 2019). Visando abordar essa problemática, esse estudo pretende analisar de que forma ocorre e o que influencia o deslocamento da temperatura de bloqueio, propriedade importante que delimita a transição de fases dos regimes magnéticos, para esses materiais ferromagnéticos em nanoescala.

Nesse sentido, o objetivo nessa pesquisa é medir o deslocamento da energia de bloqueio em materiais ferromagnéticos nanométricos. De forma mais específica, busca-se avaliar a temperatura de bloqueio sob a influência de diferentes valores do parâmetro $Kappa$ e investigar o comportamento magnético do material nanoestruturado sob influência de diferentes temperaturas por meio de simulações numéricas do Método de Monte Carlo usando as Estatísticas Generalizadas de Kaniadakis.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Função de partição

A termodinâmica de equilíbrio é um ramo fundamental da física e se concentra no estudo de sistemas macroscópicos em repouso, nos quais as variáveis termodinâmicas permanecem constantes ao longo do tempo. É uma área que organiza as leis empíricas acerca do comportamento térmico da matéria ao nível macroscópico (Salinas, 2005).

A termodinâmica abarca quatro postulados essenciais para estabelecer uma base conceitual sólida:

a) Primeiro postulado: o estado macroscópico de uma substância pura é totalmente definido pela energia interna U , volume V e pela quantidade de matéria, que pode ser expressa pelo número de moles n ou pelo número de partículas N (Salinas, 2005);

b) Segundo postulado: para um sistema composto, constituído por sistemas simples separados por paredes ou vínculos, existe uma função chamada entropia, $S = S(U_1, V_1, N_1, U_2, V_2, N_2 \dots)$, caracterizada para todos os estados em equilíbrio, constituindo assim, uma equação fundamental de um dado sistema, adquirindo todo o conhecimento termodinâmico associado (Salinas, 2005);

c) Terceiro postulado: a aditividade da entropia em um sistema composto se manifesta em cada um de seus componentes, sendo a entropia, uma função contínua, diferenciável e que aumenta de maneira monótona em relação à energia (Salinas, 2005). Neste contexto, a entropia é uma grandeza aditiva, ou seja, é uma função homogênea de primeiro grau das suas variáveis. Esta característica é quantificada da seguinte maneira:

$$S(\lambda U, \lambda V, \lambda N) = \lambda S(U, V, N) \quad (1)$$

onde a energia, o volume e quantidade de matéria variam com o valor de λ .

d) A entropia é nula no zero absoluto, uma característica que pode ser desafiada pela Mecânica Estatística Clássica, quando a derivada da energia interna em relação à entropia é zero (Salinas, 2005) — representando a terceira lei da termodinâmica.

Enquanto a termodinâmica busca explicar o comportamento térmico da matéria em níveis macroscópicos, a mecânica estatística parte da hipótese relativa à constituição microscópica dos corpos materiais para explicar, no macro, estabelecendo assim uma conexão entre os níveis micro e macroscópicos (Salinas, 2005).

O primeiro postulado da Mecânica Estatística afirma que o conjunto de todos os estados microscópicos acessíveis a um sistema fechado em equilíbrio são equiprováveis. Por exemplo,

para um sistema constituído por um fluido termodinâmico, digamos, com energia E , volume V e número de partículas N , no estado vinculado formado por um conjunto de vínculos internos $\{X_i\}$, a quantidade de estados microscópicos acessíveis a este sistema é $\Omega(E, V, N; \{X_i\})$. Então, a probabilidade $P(X_i)$ de encontrar o sistema sujeito ao conjunto de vínculos $\{X_i\}$ é diretamente proporcional à quantidade de microestados acessíveis $\Omega(E, V, N; \{X_i\})$:

$$P(\{X_i\}) \propto \Omega(E, V, N; \{X_i\}) \quad (2).$$

Desta maneira, a distribuição de probabilidade $P(X_i)$ é usada para quantificar estatisticamente um processo termodinâmico. Este processo é feito pela remoção de vínculos termodinâmicos internos, gênese da interpretação da estatística da termodinâmica. A conexão entre a Teoria de Probabilidade e a Mecânica Estatística ocorre pelo fato da maximização da distribuição de probabilidade $P(X_i)$ corresponder diretamente a maximização da entropia S . Não obstante, diante dos argumentos acima, é permitido realizar a conexão entre a Mecânica Estatística e a termodinâmica. A entropia é quantificada pelo logaritmo do número de microestados acessíveis ao sistema, permitindo a conexão entre o ensemble microcanônico e a termodinâmica. Para exemplificar, digamos, o estado termodinâmico de uma substância fluida pura é caracterizado pela energia E , volume V e número de partículas N , a conexão com a termodinâmica é construído pelo logaritmo do número de estados acessíveis, tomando o limite termodinâmico $N \rightarrow +\infty$. Como primeiro passo, tomamos a entropia como função de E , V e N .

$$S(E, V, N) = k_B \ln(\Omega(E, V, N)) \quad (3)$$

sendo k_B constante de Boltzmann. Para alcançar o objetivo de conectar com a termodinâmica, escrevemos a energia E e o volume V como densidades fixas, i.e., $E/N = u$ e $V/N = v$, admitindo u e v como constantes, tomamos o limite em que os efeitos das condições de contorno são eliminados e que, matematicamente, a entropia é uma função homogênea de primeiro grau de suas variáveis extensivas. Esta exigência deve ser satisfeita, mostrando que as propriedades termodinâmicas são independentes do tamanho do sistema. Experimentalmente, as derivadas de interesse físico, como os calores específicos, coeficientes de dilatação, entre outros, são mensuradas por quantidade de matéria (mol ou partícula) sem fazer referência ao tamanho do sistema, i.e., as propriedades termodinâmicas se referem ao material na sua

totalidade mostrando, subentendidamente, a noção do limite termodinâmico no sentido matemático. Neste contexto, matematicamente, o segundo postulado pode ser reescrito como:

$$s(u, v) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} S(E, V, N) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} k_B \ln(\Omega(E, V, N)) \quad (4)$$

para u e v fixos no limite termodinâmico $N \rightarrow +\infty$.

Ao examinarmos diferentes conjuntos de parâmetros microscópicos, apresentamos uma perspectiva termodinâmica distinta do ensemble microcanônico, denominada ensemble canônico. No contexto do ensemble canônico, considera-se um sistema termodinâmico simples em contato com um reservatório térmico por meio de uma parede adiabática, fixa e impermeável. O reservatório de calor, denotado como R, deve ser significativamente maior do que o sistema de interesse, representado por S. Com a ligação entre os sistemas R+S e a adição do isolamento em relação ao ambiente externo, mantendo uma energia total E, os postulados fundamentais da Mecânica Estatística do equilíbrio permanecem válidos.

Nesse cenário, a probabilidade W_j de encontrar o sistema S em um estado microscópico j é expressa da seguinte maneira:

$$W_j = \frac{e^{-\beta E_j}}{\sum e^{-\beta E_k}} \quad (5)$$

onde,

$$Z = \sum e^{-\beta E_k} \quad (6)$$

Z é a soma sobre todos os estados, conhecida como função de partição, que normaliza a probabilidade W_j . A função de partição está relacionada à energia livre de Helmholtz pela seguinte fórmula:

$$F(T, V, N) = -\frac{1}{\beta} \ln(Z(T, V, N)) \quad (7)$$

onde $F(T, V, N)$ é a energia livre de Helmholtz é função da temperatura T , volume V e quantidade de matéria (partículas ou moles) N e $\beta = \frac{1}{k_B T}$. A conexão com a termodinâmica é realizada no limite quantificado a seguir:

$$f(T, v) = - \lim_{V, N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N\beta} \ln(Z(T, V, N)) \quad (8)$$

sendo $v = \frac{V}{N}$ no limite termodinâmico.

Dentro do contexto do ensemble microcanônico, a função entropia desempenha um papel crucial ao estabelecer uma conexão entre o Ensemble e a Termodinâmica, especialmente quando consideramos o limite termodinâmico. No Ensemble Canônico, por sua vez, a entropia é expressa como a derivada da energia livre de Helmholtz em relação à temperatura, mantendo as demais variáveis, N e V , constantes. Essa relação pode ser formalizada da seguinte maneira:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{(V, N)} \quad (9)$$

Observamos que tanto no ensemble microcanônico quanto no ensemble canônico da Mecânica Estatística do Equilíbrio, a entropia demonstra ser aditiva e extensiva. Contudo, é relevante ressaltar a existência de formas de entropia que não possuem essas propriedades, como a entropia de Tsallis (Tsallis, 1988) e a entropia de Kaniadakis, desenvolvida com base no princípio de interação cinética (Kaniadakis, 2001). Para os propósitos deste estudo, optaremos por utilizar a entropia não aditiva de Kaniadakis, também conhecida como κ -estatística. A partir deste ponto, adotaremos exclusivamente esta última nomenclatura.

2.2 Quadro geral da κ -estatística

A κ -estatística é uma generalização da mecânica estatística clássica de Boltzmann-Gibbs-Shannon, e é um tópico de grande relevância em diversas áreas da pesquisa científica e aplicada. É definida em termos da função exponencial κ , uma nova função exponencial deformada de um parâmetro introduzida por Kaniadakis (Kaniadakis, 2001). Essa abordagem estatística transcende os conceitos tradicionais ao se constituir como um campo de estudo dinâmico, impulsionado por sua habilidade notável de modelar fenômenos complexos que desafiam as distribuições estatísticas convencionais. A aplicação dessa distribuição abrange uma variedade de sistemas físicos, que incluem desde partículas em potenciais harmônicos até partículas sujeitas a campos magnéticos. Além disso, essa abordagem tem sido empregada para descrever o comportamento de partículas em sistemas não-extensivos e em situações de

elevadas energias, encontrando aplicações significativas em disciplinas como astrofísica, física de plasma e física de alta energia (Kaniadakis, 2001).

Essa formulação não aditiva da Mecânica Estatística repousa sobre um funcional denominado κ -entropia, que se configura como a generalização relativística da entropia de Boltzmann-Gibbs-Shannon, fundamentada no princípio de interação cinética (Kaniadakis, 2001, 2002, 2013). A sua singularidade reside na preservação de diversas propriedades da Mecânica Estatística Clássica, inclusive a crucial Terceira Lei da Termodinâmica (Bento, 2015). Essas características conferem a ela uma posição privilegiada como uma candidata robusta para elucidar fenômenos em sistemas complexos, seja na esfera natural ou artificial.

A aplicabilidade dessa formulação estende-se a uma variedade de domínios, abrangendo desde a economia (Clementi et al., 2012) até a epidemiologia (Kaniadakis et al., 2020), passando pela genômica (Souza et al., 2014; Costa et al., 2019) e alcançando setores como redes neurais, neurologia, meteorologia e geofísica (da Silva, 2021; Hristopulos et al., 2014). Ademais, ela encontra espaço em disciplinas de vulto como cosmologia e astrofísica (Carvalho et al., 2008; Curé et al., 2014).

É possível reescrever a função de partição (Z) em termos da κ -estatística. Algumas destas propriedades são destacadas a seguir.

Para uma variável aleatória $x \in \mathbb{R}$ com função de probabilidade $g(x)$, a κ -estatística é fundamentada na κ -entropia definida em Kaniadakis (2001).

$$S_{\kappa}(g) = -\frac{1}{2\kappa} \int \left(\frac{g^{1+\kappa}(x)}{1+\kappa} - \frac{g^{1-\kappa}(x)}{1-\kappa} \right) dx \quad (10)$$

onde $0 < \kappa < 1$ é o índice entrópico. A mecânica estatística clássica de Boltzmann-Gibbs-Shannon é retomada no limite em que $\kappa \rightarrow 0$:

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} S_{\kappa}(g) = - \int g(x) \ln(g(x)) dx = S_{BGS} \quad (11)$$

Nesta abordagem de mecânica estatística, a construção do modelo será baseada na função κ -exponencial:

$$\exp_{\kappa}(x) = \left(\sqrt{1 + \lambda^2 \kappa^2 x^2} + \lambda \kappa x \right)^{\frac{1}{\kappa}} \quad (12)$$

sua inversa é o κ -logaritmo deformado ln_κ :

$$ln_\kappa(x) = \frac{x^\kappa - x^{-\kappa}}{2\kappa} \quad (13)$$

As funções exponenciais e logaritmo ordinária são casos particulares de (12) e (13) quando é tomado o limite $\kappa \rightarrow 0$: $\lim_{\kappa \rightarrow 0} exp_\kappa(x) = exp(x)$ e $\lim_{\kappa \rightarrow 0} ln_\kappa(x) = ln(x)$, respectivamente.

Neste trabalho, nós utilizamos a função κ -exponencial. Uma característica interessante desta função é que ela possui algumas propriedades da função exponencial ordinária:

$$\frac{d}{dx}(exp_\kappa(x)) > 0 \quad (14)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} exp_\kappa(x) = 1 \quad (15)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} exp_\kappa(x) = 0 \quad (16)$$

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} exp_\kappa(x) = +\infty \quad (17)$$

$$exp_\kappa(x)exp_\kappa(-x) = 1 \quad (18)$$

O comportamento em lei de potência da κ -exponencial ocorre nos limites apropriadamente afastados da origem, i.e.,

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} exp_\kappa(x) \approx |2\kappa x|^{\pm\frac{1}{\kappa}} \quad (19)$$

Reescrevendo a probabilidade para o ensemble canônico em termos da κ -estatística para um sistema com energia E_α :

$$W_\kappa(\alpha) = \frac{1}{Z_\kappa} exp_\kappa(-\beta E_\alpha) \quad (20)$$

na qual $\beta = \frac{1}{K_B T}$ e Z_κ é a função κ -partição, que pode ser escrita como

$$Z_\kappa = \sum_i exp_\kappa(\beta E_i) \quad (21)$$

onde K_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta.

3 METODOLOGIA

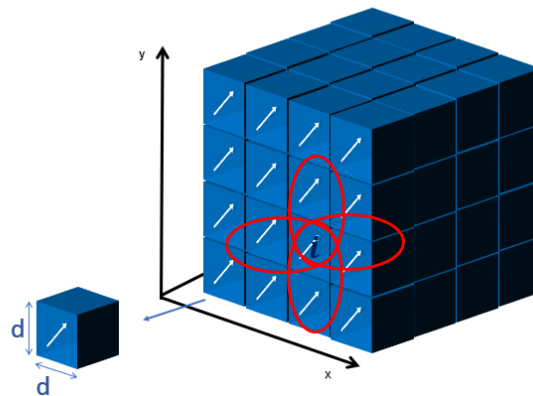
3.1 Modelo micromagnético

O contexto em que se aplica a derivação acima é do de materiais ferromagnéticos nanoestruturados. Para a energia total de um meio magnético típico que configura a competição energética para determinar parcialmente os estados magnéticos dos nanoelementos é dado pela densidade de energia magnética:

$$E = \frac{A}{d^2} \sum_i \sum_j \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - K \sum_j (\hat{m}_j^x)^2 - \hat{H} \sum_j \hat{m}_j + \frac{M_S^2}{2} \sum_i \sum_j \left(\frac{\hat{m}_i \cdot \hat{m}_j}{r_{i,j}^3} - 3 \frac{(\hat{m}_i \cdot \vec{r}_{i,j})(\hat{m}_j \cdot \vec{r}_{i,j})}{r_{i,j}^5} \right) \quad (22)$$

O primeiro termo é a energia de troca, que surge da interação entre os momentos magnéticos das células no sistema e é responsável por estabilizar a orientação dos spins magnéticos em uma determinada direção. Ela contabiliza a troca de energia da célula de simulação com os seus primeiros vizinhos. Sendo A a rigidez de troca e d a aresta da célula de simulação. Na figura 1, temos a representação esquemática da energia de troca no sistema magnético.

Figura 1 – representação esquemática da energia de troca.

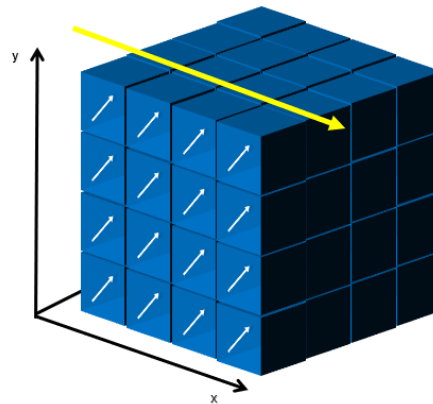


Fonte: O autor, 2023.

Para o segundo termo da energia total, tem-se a energia de anisotropia uniaxial, que surge da preferência dos momentos magnéticos em se alinhar ao longo de um eixo preferencial. No caso do trabalho, ao longo do eixo x. Sendo K a constante de anisotropia uniaxial. Na figura

2, temos a representação esquemática para a energia de anisotropia uniaxial ao longo do eixo x.

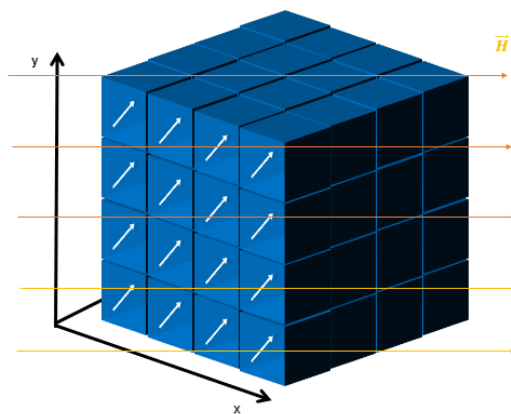
Figura 2 – representação esquemática da energia de anisotropia uniaxial.



Fonte: O autor, 2023

A energia Zeeman é o terceiro termo da energia total, e descreve a interação entre o momento magnético de uma partícula magnética e um campo magnético externo, onde $\vec{H} = H_x \hat{x}$ é o campo magnético aplicado ao longo do eixo de fácil magnetização. Na figura 3, temos a representação esquemática dessa energia agindo sobre o sistema.

Figura 3 – representação esquemática da energia Zeeman.

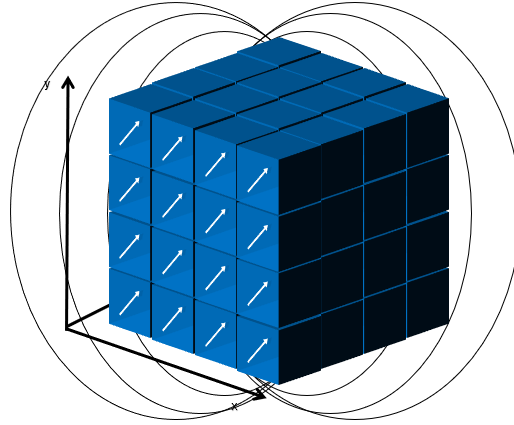


Fonte: O autor, 2023

O quarto termo retrata a energia dipolar e descreve a tendência dos momentos magnéticos em um material magnético de se alinharem paralelamente, contribuindo para a estabilidade de domínios magnéticos e para a formação de padrões de magnetização no material. Neste termo M_s é a magnetização de saturação do material. Os termos do conjunto $\{\mathbf{m}_j\}$ são os momentos magnéticos das células de simulação, que possuem um conjunto de

momento atômico aproximado. Na figura 4, temos a esquematização da energia de dipolo magnético do sistema.

Figura 4 – representação esquemática da energia de dipolo magnético.



Fonte: O autor, 2023

As constantes magnéticas para o material ferromagnético estudado neste trabalho são exibidas na tabela 1 (Silva et al., 2011). Foram considerados constantes da mesma ordem do nanoelemento de ferro (Fe com energia de anisotropia) com geometria cúbica. Foram usadas células de simulação de 5 nm de arestas.

Tabela 1 - Propriedades magnéticas macroscópicas de um material ferromagnético.

	Fe	Cx
$A(J/m)$	$2,5 * 10^{-11}$	$1 * 10^{-11}$
$M_s(A/m)$	$1,7 * 10^6$	$1 * 10^6$
$K(J/m^3)$	$2,5 * 10^{-4}$	$1 * 10^{-4}$

Fonte: Silva et al, 2011

3.2 Experimentações numéricas

Realizou-se simulações micromagnéticas para obter as medidas das observáveis físicas. Essas observáveis foram estimadas concernentes as simulações da equação mestra:

$$\frac{dP(i,j)}{dt} = \sum_{i \neq j} \{W(i,j)P(j,t) - W(j,i)P(i,t)\} \quad (23)$$

no qual $W(i,j)$ é a taxa de transição de probabilidade do estado i para o j e $P(j,t)$ é a probabilidade do estado j no instante de tempo t . Dadas as taxas de transição, encontrou-se a solução estacionária que satisfaz a condição:

$$\sum_{i \neq j} \{W(i, j)P(j, t) - W(j, i)P(i, t)\} = 0 \quad (24)$$

A solução numérica da equação mestra para o estado de equilíbrio (24) funcionou de base para o desenvolvimento do algoritmo de Metropolis (Metropolis et al., 1953), o qual é descrito a seguir.

3.3 Generalização do algoritmo de Metropolis para κ -estatística

1. Defina um valor inicial para κ ;
2. Defina uma configuração inicial j para o sistema;
3. Gere uma configuração tentativa da i -ésima célula de simulação;
4. Se $\Delta E_{j,i} = E_j - E_i < 0$, a configuração i é aceita;
5. Caso contrário, gera-se um número aleatório $r \in (0,1)$. Se $r < P(\Delta E_{j,i}) \propto \exp_{\kappa}(\Delta E_{i,j}/K_B T)$ a nova configuração é aceita;
6. Caso contrário, a configuração j permanece;
7. Atualize o valor de κ entre (0,1);
8. Retorne ao passo 2.

Para a simulação foram utilizados nanoelementos com arestas de 15, 25 e 35 nm, os demais parâmetros utilizados estão indicados na tabela 2. Procederam-se as simulações 10^7 passos de Monte Carlo (PMC). Estimaram-se as observáveis físicas para valores de PMC maiores do que $N = 10 * L^3$, onde L é a quantidade de células de simulação da aresta do nanoelemento cúbico. No momento que $N > 10 * L^3$, observou-se a estabilização das medidas, portanto, após este limiar calcularam-se os momentos da energia e da magnetização. Os valores esperados do primeiro momento da magnetização foram estimados pela equação:

$$\langle M \rangle = \sum_{i=1}^N p_i M_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i \quad (25)$$

Tabela 2 – Parâmetros utilizados na simulação	
Kappa	0 - 1
Aresta do nanoelemento (Tn)	15, 25 e 35 nm
Campo magnético (H)	10 – 50 mT
Temperatura	0.01 – 290 k
Aresta da célula de simulação (d)	5 nm

Fonte: O autor, 2023.

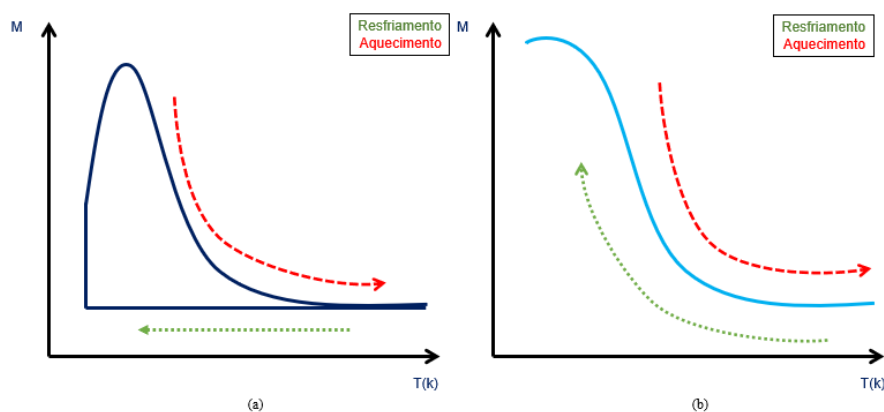
3.4 Curvas de magnetização ZFC e FC

A partir do algoritmo generalizado e dos parâmetros utilizados, geramos dados para magnetização e temperatura, com esses dados conseguimos plotar gráficos para as curvas de magnetização Zero-field-cooled (ZFC) e Filed-cooled (FC), que são medidas de magnetização que dependem da temperatura e são usadas para encontrar as distribuições de energia da barreira.

A curva de magnetização ZFC (figura 5a) é obtida, tanto no processo de resfriamento quanto no aquecimento. Nesse procedimento a amostra é resfriada a partir de uma temperatura T , com um campo magnético nulo, ou seja, um estado em que as partículas apresentam um estado desordenado até ser atingido uma temperatura em que as nanopartículas passam a se encontrar no estado bloqueado. A partir de então é iniciado o processo de aquecimento em que se aplica um campo magnético diferente de zero até atingir uma temperatura de equilíbrio. Observa-se, que a magnetização se mantém "constante" no processo de resfriamento, aumenta até a temperatura de equilíbrio e de onde começa a diminuir. Ao longo desse processo são realizadas medidas da magnetização.

Para a curva de magnetização FC (figura 5b) é obtida também nos processos de resfriamento e aquecimento, porém, sob a ação de um campo magnético, tanto no resfriamento quanto no aquecimento. Em FC a magnetização aumenta no processo de resfriamento e diminui no processo de aquecimento.

Figura 5 – representação esquemática das curvas de ZFC e FC.

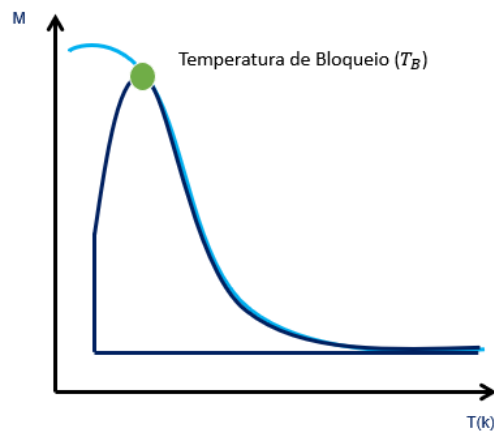


Fonte: O autor, 2023

Para realizar as medidas ZFC e FC o campo magnético aplicado deve ser muito menor do que o campo relacionado à energia de anisotropia para garantir que as medidas reflitam a distribuição de energia da barreira.

A partir da junção das curvas de ZFC-FC é possível extrair a temperatura de bloqueio dos nanoelementos, como mostra o esquema da figura 6. A temperatura de bloqueio é a temperatura que delimita a transição de fases dos regimes magnéticos. Acima dessa temperatura, as nanopartículas se encontram em um estado desordenado, chamado de superparamagnético, e abaixo dessa temperatura as nanopartículas passam a se encontrar em um estado bloqueado.

Figura 6 – representação esquemática da junção das curvas de ZFC e FC.



Fonte: O autor, 2023

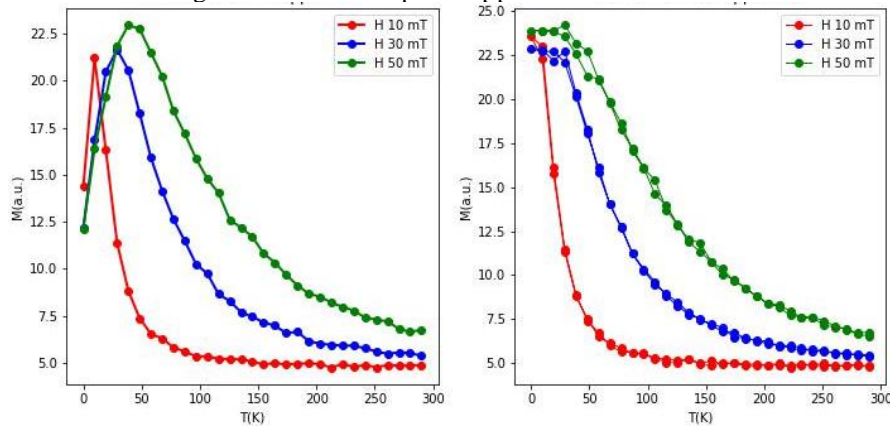
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Iniciou-se com as medidas ZFC na temperatura inicial $T_0 = 290 \text{ K}$. Nesta temperatura as nanopartículas estão, em equilíbrio, no estado superparamagnético. O campo magnético é mantido nulo $\vec{H} = 0$, quando a amostra é resfriada até a temperatura de $T_F = 0.01 \text{ K}$. Nesta temperatura, o campo magnético $\vec{H} \neq 0$ é aplicado enquanto a amostra é aquecida. Os valores de campo magnético são 10, 30 e 50 mT . Após a aplicação do campo, a amostra é projetada para um estado fora do equilíbrio, quantificado pelo termo da energia Zeeman na equação (22). Sob estas mesmas condições, temperatura e campo magnético, foram construídas as curvas FC. Diferenciando-se das curvas ZFC, a curva da magnetização FC é obtida, tanto no processo de resfriamento quanto no de aquecimento, com $\vec{H} \neq 0$. As amostras são de matérias ferromagnéticas com geometria é cúbica de arestas (d) iguais a 15, 25 e 35 nm .

Nas Figuras 7, 8 e 9, apresenta-se o primeiro conjunto de medidas para um valor fixo de $Kappa$ igual a 0.1, em cada tamanho de amostra. Para a obtenção das curvas ZFC (7a, 8a e 9a), a amostra é retirada do estado de equilíbrio com o campo magnético aplicado entre 10 e 50 mT . Nota-se que o comportamento qualitativo da magnetização não se altera para cada tamanho

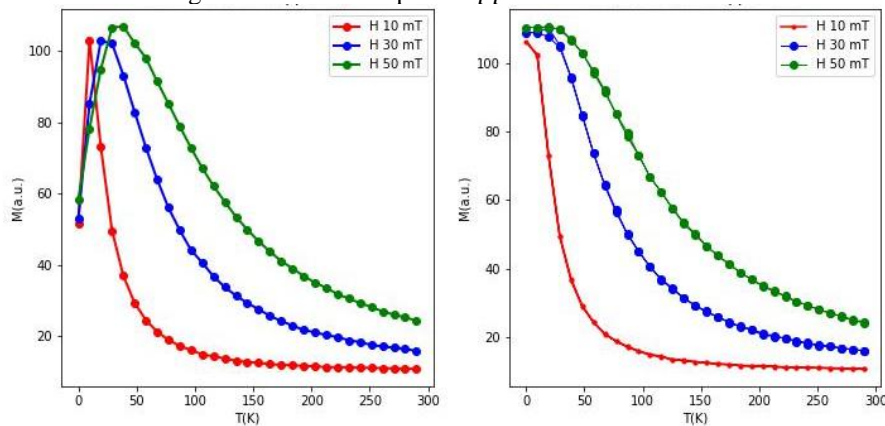
de amostra, crescendo com o campo não nulo a partir de $T = 0.01 K$ até atingir o ponto de equilíbrio termodinâmico, marcado como o ponto máximo na curva. Nesse ponto, a magnetização diminui à medida que a temperatura aumenta, seguindo a lei de Curie ($\propto 1/T$), interrompendo as medidas no ponto $T = 290 K$. No entanto, é observado que a magnetização aumenta proporcionalmente ao aumento das arestas. Para as curvas FC (7b, 8b e 9b), o campo magnético é aplicado à amostra à temperatura de $290 K$ e mantido constante ao longo do processo de resfriamento. Nessa etapa, a magnetização aumenta até atingir a temperatura de bloqueio, T_B . Observa-se que a magnetização permanece constante à medida que a temperatura decresce até $0.01 K$. Neste ponto, a amostra é submetida ao processo de aquecimento, mantendo-se constante até atingir novamente a temperatura crítica, momento em que as medidas da magnetização correspondem ao estado de equilíbrio termodinâmico. Tanto em ZFC quanto em FC, verifica-se que, com o aumento das arestas, há uma estabilização no estado de flutuação das amostras e um aumento no pico de magnetização para cada uma delas.

Figura 7 – ZFC e FC para $\kappa = 0.1$ e $d = 15 nm$.



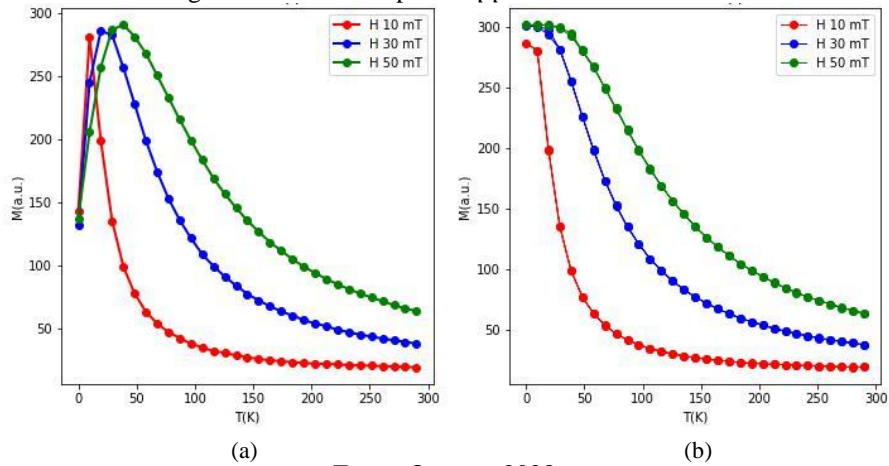
(a) Fonte: O autor, 2023. (b)

Figura 8 – ZFC e FC para $\kappa = 0.1$ e $d = 25 nm$.



(a) Fonte: O autor, 2023. (b)

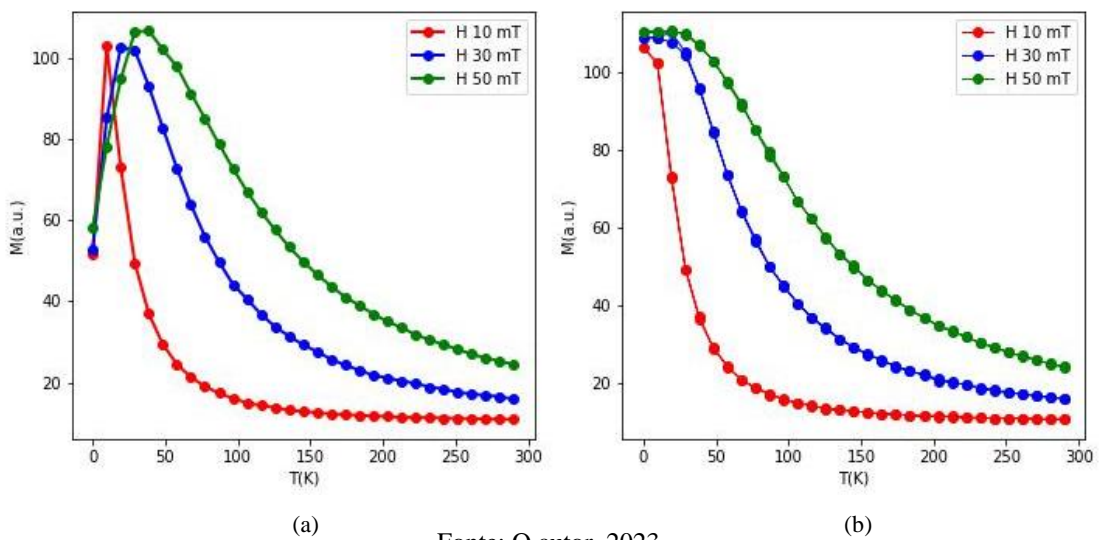
Figura 9 – ZFC e FC para $\kappa = 0.1$ e $d = 35 \text{ nm}$.



Fonte: O autor, 2023.

Nas Figuras 10a, 11a e 12a, são apresentadas as curvas ZFC, enquanto nas Figuras 10b, 11b e 12b, as curvas FC correspondentes a uma amostra cúbica de um nanoelemento ferromagnético com aresta de $d = 25 \text{ nm}$. Para valores de κ de 0.1, 0.4 e 0.8, a temperatura (T) varia na faixa de 0,01 a 290 K, com o campo magnético aplicado variando de 10 mT a 50 mT. Essa representação oferece uma alternativa para visualizar as curvas de ZFC e FC. Observa-se que, de maneira semelhante às figuras anteriores, o comportamento qualitativo da magnetização permanece inalterado. No entanto, à medida que o valor de κ aumenta, nota-se uma diminuição nos picos de magnetização para a amostra, tanto nas curvas ZFC quanto nas FC.

Figura 10 – ZFC e FC para $d = 25 \text{ nm}$ e $\kappa = 0.1$.



Fonte: O autor, 2023.

Figura 11 – ZFC e FC para $d = 25 \text{ nm}$ e $\kappa = 0.4$.

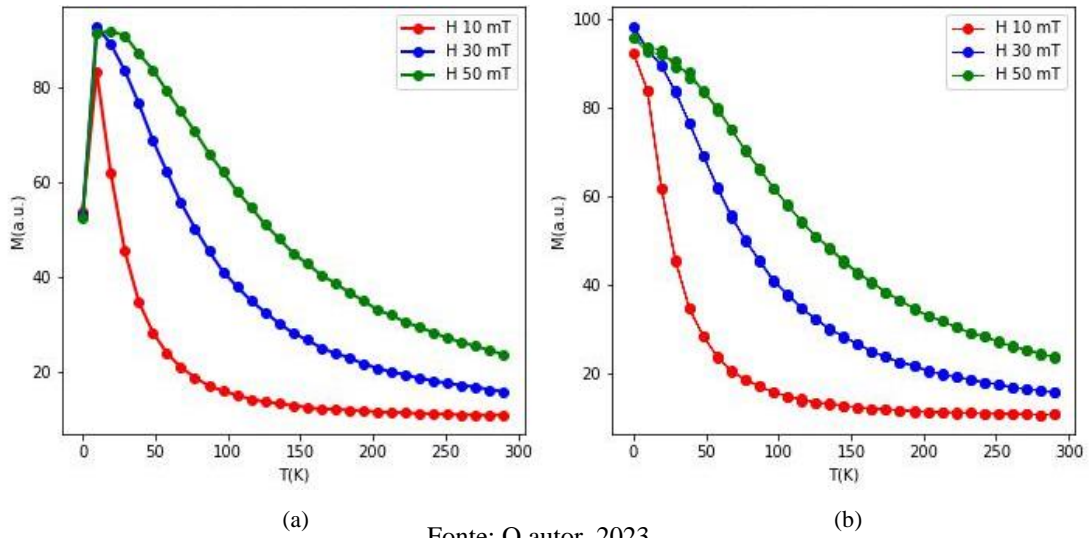
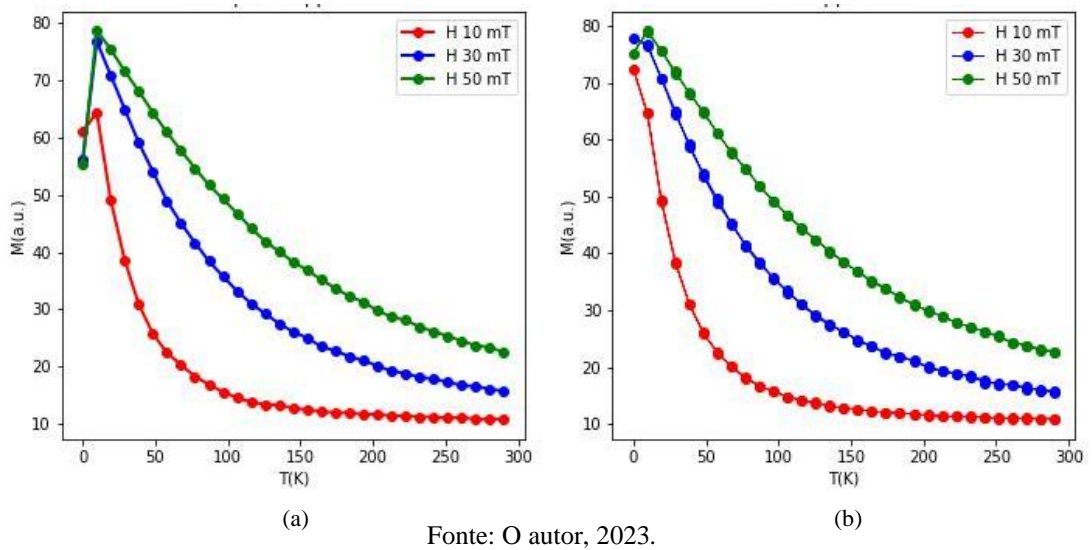


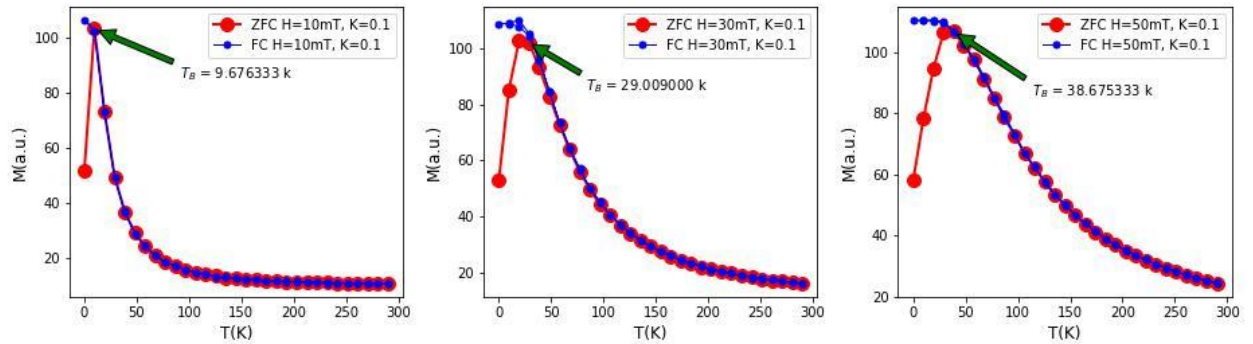
Figura 12 – ZFC e FC para $d = 25 \text{ nm}$ e $\kappa = 0.8$.



Nas figuras seguintes, é apresentado a junção de medidas típicas da magnetização para os nanoelementos ferromagnéticos. As amostras escolhidas para exibir estes resultados são as com 25 nm de aresta. A variação de κ foram para valores entre $0.1 - 0.8$. Observamos que o ponto de convergência das curvas ZFC e FC nos fornecem informações sobre a distribuição de energia na barreira, assim como a determinação da temperatura de bloqueio T_B para cada valor de κ e de campo magnético H . Para $T < T_B$, as curvas ZFC e FC exibem comportamentos distintos até atingir a temperatura $T = T_B$, a partir da qual ambas as curvas apresentam o mesmo comportamento, apresentando decréscimo da magnetização \vec{M} com o aumento da temperatura T . Em cada valor de κ para essa amostra de 25 nm , nota-se um aumento nos valores de T_B com a exposição da amostra em valores de campos magnéticos

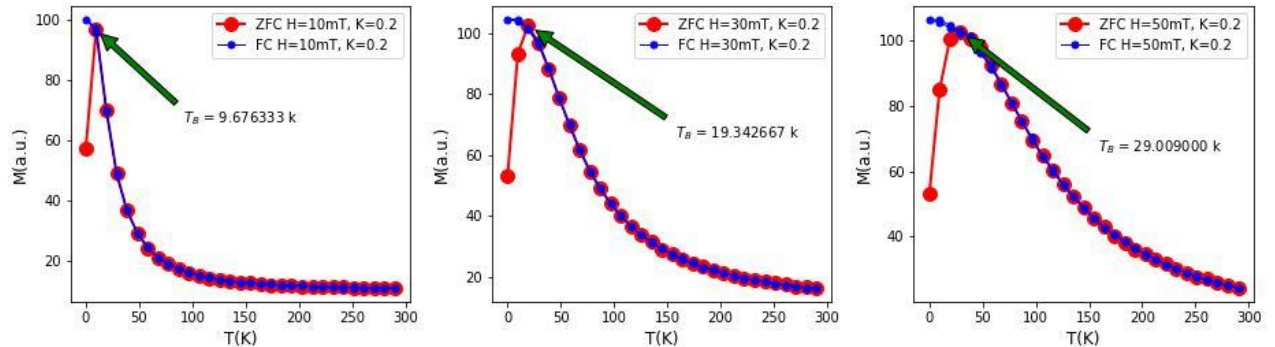
maiores como na figura 13, 14 e 15, sendo estabilizado para o valor de $Kappa$ igual a 0.4 (figuras 19, 20 e 21), tendo um valor de temperatura de bloqueio de 9,676333 K. Ou seja, para uma determinada amostra de um nanomaterial ferromagnético, a temperatura de bloqueio tende a diminuir e a se estabilizar com o aumento nos valores de $Kappa$.

Figura 13 - ZFC e FC para $d = 25\text{ nm}$, $H = 10\text{mT}$, 30mT e 50mT e $kappa = 0.1$.



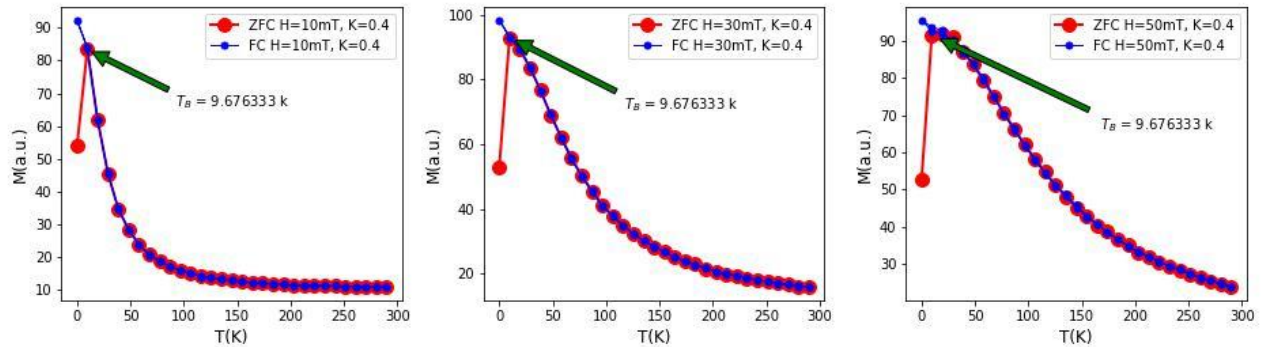
Fonte: O autor, 2023.

Figura 14 - ZFC e FC para $d = 25\text{ nm}$, $H = 10\text{mT}$, 30mT e 50mT e $kappa = 0.2$.



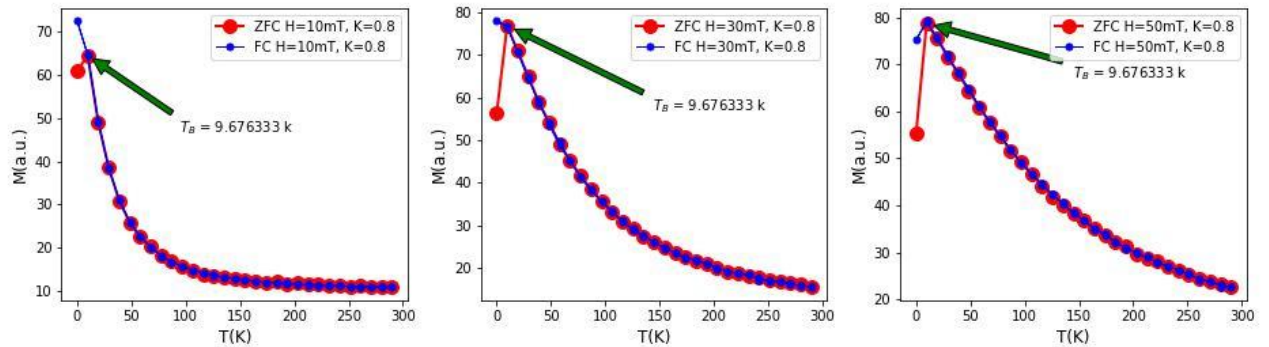
Fonte: O autor, 2023

Figura 15 - ZFC e FC para $d = 25\text{ nm}$, $H = 10\text{mT}$, 30mT e 50mT e $kappa = 0.4$.



Fonte: O autor, 2023

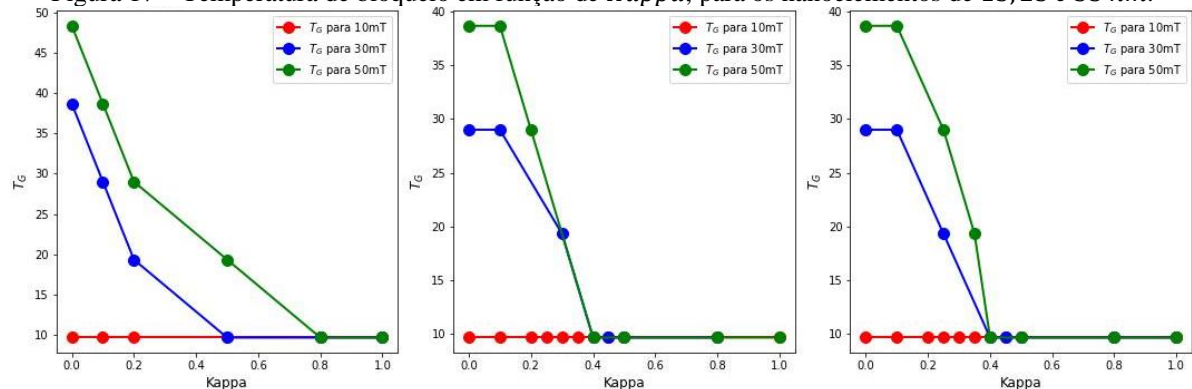
Figura 16 - ZFC e FC para $d = 25 \text{ nm}$, $H = 10\text{mT}$, 30mT e 50mT e $\kappa = 0.8$.



Fonte: O autor, 2023

Na figura 17, têm-se as medidas da temperatura de bloqueio, coletadas nas etapas anteriores, em relação a variação de κ para cada amostra ferromagnética, de 15 nm , 25 nm e 35 nm . Nota-se que conforme aumentamos valores de κ a temperatura de bloqueio diminui, convergindo, para valores de campo magnético entre $10 - 50 \text{ mT}$, em um valor de 0.4 de κ e se tornando constante a uma temperatura à 10 K para valores de κ maiores que 0.5 e tamanhos de amostras maiores que 25 nm .

Figura 17 – Temperatura de bloqueio em função de κ , para os nanoelementos de $15, 25$ e 35 nm .

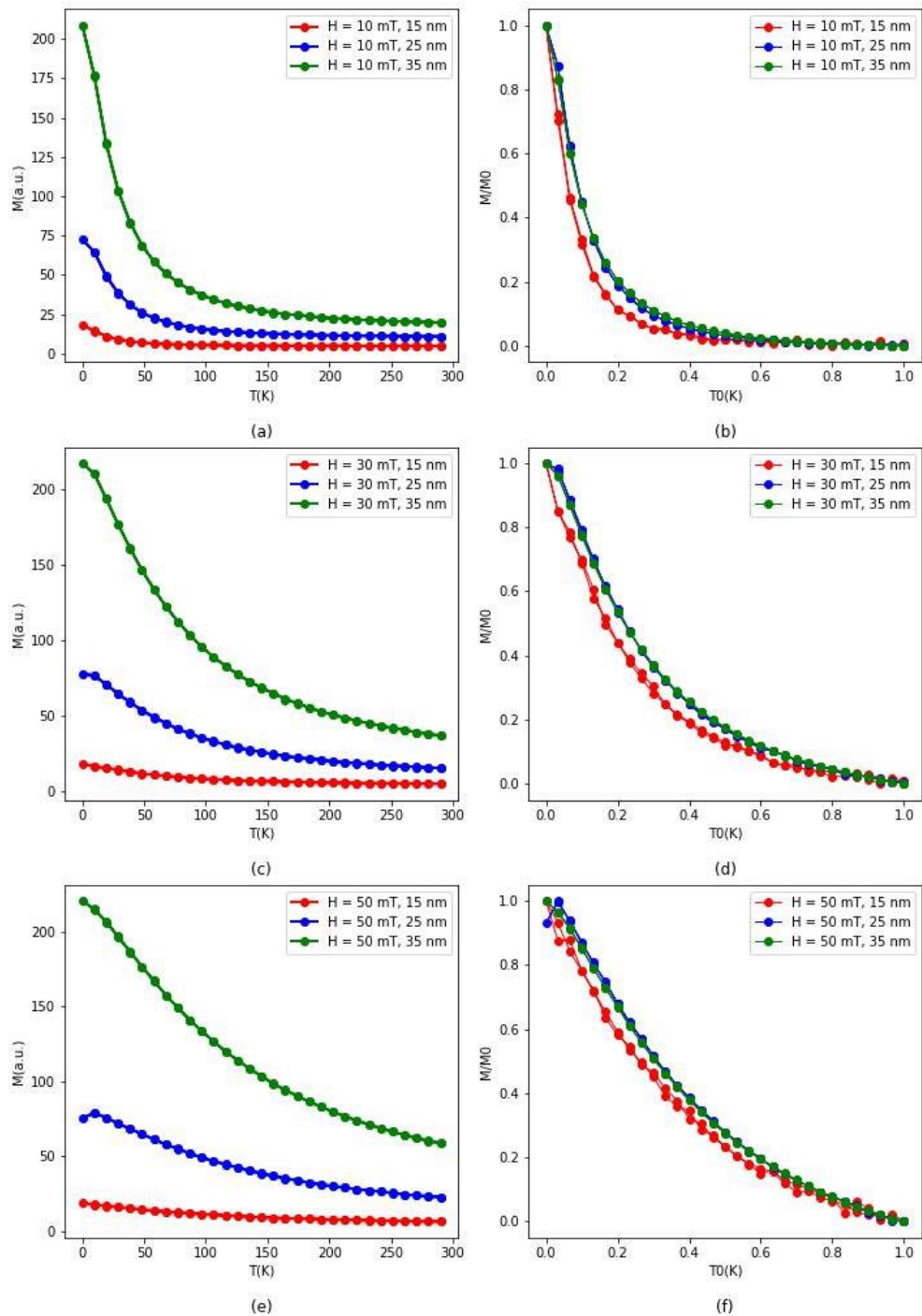


Fonte: O autor, 2023.

Nas figuras a seguir são exibidas medidas de magnetização não normalizadas (18a, 18c e 18e) e normalizadas (18b, 18d e 18f) para curvas FC de um material ferromagnético de arestas iguais a $15, 25$ e 35 nm expostas a campos magnéticos de $10, 30$ e 50 mT e com valores fixos de $\kappa = 0.8$. Os dados foram normalizados utilizando a linguagem de programação *Python*, com a biblioteca *Scikit - Learn* por meio da classe *MinMaxScaler* que calcula os valores mínimo e máximo dos dados e em seguida normaliza os dados utilizando a fórmula da normalização por Min e Max. Assim, foram normalizadas as medidas da curva FC da magnetização, como exibidas na figura 18 (b, d, f). Como pode-se observar, as curvas implodem para uma única curva para $T \leq T_B$ e para $T > T_B$ as curvas apresentam um comportamento semelhante para a magnetização. Entre a transição desses pontos observa-se um comportamento

divergente para o nanoelemento de aresta 15 nm. Essa é a menor amostra trabalhada, e um comportamento assim é esperado pela baixa dimensionalidade do sistema, no qual se espera maiores flutuações nas medidas observáveis físicas. Já para amostras maiores, é esperada a estabilização das observáveis físicas. Portanto, este fenômeno é consequência das dimensões das amostras, ou seja, efeitos de escala de tamanho finito.

Figura 18 – FC não normalizado e normalizado para $Kappa = 0.8$.



Fonte: O autor, 2023.

4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, realizamos uma reescrita do Ensemble Canônico incorporando a κ -estatística como elemento fundamental. Construímos um modelo micromagnético que foi essencial para nosso propósito, fornecendo uma estrutura para as análises que se seguiram. Fizemos uma resolução da equação mestra, adaptada para contemplar a Estatística de Kaniadakis. Assim como, realizou-se a generalização do algoritmo de Metropolis considerando a influência da κ -estatística, um passo importante para aprimorar a modelagem e garantir a confiança dos resultados obtidos. A obtenção das curvas de Field Cooled (FC) e Zero-Field-Cooled (ZFC) foi conduzida visando analisar as distribuições de energia relacionadas à barreira anisotrópica, especialmente observando seu comportamento sob diferentes valores do parâmetro $kappa$. Durante a investigação, destacamos o fenômeno do deslocamento da temperatura de bloqueio.

Como perspectiva futura, planejamos expandir nossos resultados, aumentando tanto o número de passos na simulação numérica quanto a consideração de mais valores para o parâmetro $kappa$. Essa expansão visa proporcionar uma base mais robusta para interpretações refinadas e percepções aprimoradas na estimação da distribuição de energia na barreira, especialmente quando aplicada a materiais ferromagnéticos.

REFERÊNCIAS

A. S. M. Silva, Ana L. Dantas, G. O. G. Rebouças, and A. S. Carriço. **Nucleation of vortex pairs in exchange biased nanoelements**. Journal of Applied Physics 109, 07D314, 2011.

ALI, Arbab et al. **Review on recent progress in magnetic nanoparticles: Synthesis, characterization, and diverse applications**. Frontiers in Chemistry, v. 9, p. 629054, 2021.

ARANTES, Fabiana Rodrigues et al. **Estudo do comportamento magnético de nanopartículas de magnetita e nanofios de níquel diluídos em cristais líquidos liotrópicos**. São Paulo, p. 11, 2010.

BENTO, E. P. et al. **Third law of thermodynamics as a key test of generalized entropies**. Physical Review E, v. 91, n. 2, p. 022105, 2015.

BINDER, K.; LANDAU, David P. **A Guide to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics**. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.

CAMACHO, Ángela; ZAPATA, Mario. ¿ **Qué es un nanomaterial?**. Momento, n. 54E, p. 57-66, 2017.

CARVALHO, J. C. et al. **Power law statistics and stellar rotational velocities in the Pleiades.** Europhysics Letters, v. 84, n. 5, p. 59001, 2008.

CLEMENTI, Fabio; GALLEGATI, Mauro; KANIADAKIS, Giorgio. **A new model of income distribution: the κ -generalized distribution.** Journal of Economics, v. 105, p. 63-91, 2012.

COSTA, M. O. et al. **Analysis of human DNA through power-law statistics.** Physical Review E, v. 99, n. 2, p. 022112, 2019.

COSTA, R. S. ; NEYRA, J. R. ; MOURA, T. R. S. . **Nanopartículas de Fe E Py como agentes catalisadores da liquefação do carvão.** In: Xxxix Congresso Brasileiro De Sistemas Particulados. Campinas: Galoá, 2019. V. 2. P. 1-8.

CURÉ, Michel et al. **A method to deconvolve stellar rotational velocities.** Astronomy & Astrophysics, v. 565, p. A85, 2014.

DA SILVA, Sérgio Luiz EF. **κ -generalised Gutenberg–Richter law and the self-similarity of earthquakes.** Chaos, Solitons & Fractals, v. 143, p. 110622, 2021.

HOLANDA, Lino Martins et al. **Comportamento magnético de materiais por meio da mecânica estatística.** Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 42, p. e20190196, 2019.

HRISTOPULOS, Dionissios T.; PETRAKIS, Manolis P.; KANIADAKIS, Giorgio. **Weakest-Link Scaling and Finite Size Effects on Recurrence Times Distributions.** arXiv preprint arXiv:1308.1881, 2013.

JIMÉNEZ, Juana M. et al. **Estudio de las propiedades magnéticas y estructurales de aleaciones Nd₁₆Fe₇₆-xNi₈B₈ con bajos contenidos de Ni.** MOMENTO, n. 44, p. 11-21, 2012.

KANIADAKIS, G. **Non-linear kinetics underlying generalized statistics.** Physica A: Statistical mechanics and its applications, v. 296, n. 3-4, p. 405-425, 2001.

KANIADAKIS, Giorgio et al. **The κ -statistics approach to epidemiology.** Scientific reports, v. 10, n. 1, p. 19949, 2020.

KANIADAKIS, Giorgio. **Statistical mechanics in the context of special relativity.** Physical review E, v. 66, n. 5, p. 056125, 2002.

KANIADAKIS, Giorgio. **Theoretical foundations and mathematical formalism of the power-law tailed statistical distributions.** Entropy, v. 15, n. 10, p. 3983-4010, 2013.

MARTÍNEZ, Oscar et al. **Estudio Teórico Del Ferromagnetismo De La Superficie m-GaN DOPADA CON Mn.** Momento, n. 55, p. 36-43, 2017.

METROPOLIS, Nicholas et al. **Equation of state calculations by fast computing machines.** The journal of chemical physics, v. 21, n. 6, p. 1087-1092, 1953.

MIRADA, Stéphaney Medeiros, TOSTA, Marielce de Cássia Ribeiro. **Estudo das aplicações da nanotecnologia na indústria petrolífera,** 2016. Disponível em:

https://editorarealize.com.br/editora/anais/conepetro/2016/TRABALHO_EV052_MD4_SA15_ID1142_13062016100336.pdf. Data de acesso: 28/12/2023.

SALINAS, Sílvio R. A. **Introdução à Física Estatística**. 2. ed. 1. reimpr. - São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2005.

SALVADOR, Marcelo et al. **Distribuição de barreiras de energia de nanopartículas magnéticas em campo externo**. Florianópolis(SC), 2014.

SOUZA, N. T. C. M. et al. **A κ -statistical analysis of the Y-chromosome**. Europhysics Letters, v. 108, n. 3, p. 38004, 2014.

TUTOR-SÁNCHEZ, Joaquín D. **Nanociencias y nanotecnologías para un Desarrollo sostenible**. MOMENTO, n. 56E, p. 1-13, 2018.