

ESTUDIOS DE SIMULACION EN COMPUTADORA DE FENOMENOS DINAMICOS EN FERROMAGNETICOS NANOMETRICOS

Emeldo R. Caballero¹, Rafael A. Ramos²

¹Departamento de Física, Universidad del Atlántico, Km 7 antigua vía a Puerto Colombia, A.A. 1890, Barranquilla, Colombia

²Departamento de Física, Universidad de Puerto Rico, Mayagüez, Puerto Rico

¹emeldocaballero@hotmail.com

²ramos@feynman.uprm.edu

Resumen. Estudiamos el comportamiento de inversión de la magnetización de partículas nanométricas magnéticas con impurezas no magnéticas. El modelo usado en nuestro estudio es el modelo de Ising ferromagnético cinético con condiciones de frontera periódicas. La dinámica se simuló por medio de actualizaciones aleatorias usando la dinámica de Glauber del método de Monte Carlo. Nos concentramos en dos magnitudes: el tiempo de vida promedio τ , eso es, el tiempo que le toma alcanzar magnetización cero, y las probabilidades $P(t)$ y $P(H)$ de que una partícula magnética no haya invertido su magnetización para un sistema de tamaño y campo fijo y para un sistema de tamaño y tiempo de observación fijo, respectivamente. También estudiamos el campo de inversión H_{sw} como función del tamaño del sistema para un tiempo de observación dado.

Palabras Claves: Nanopartículas, Ising ferromagnético cinético, Monte Carlo (MC), Inversión de la magnetización.

Abstract. We study the switching behavior of magnetic nanoparticles with non magnetic impurities. The model used in our study is a square-lattice nearest-neighbor kinetic Ising ferromagnet with periodic boundary conditions. The dynamics is simulated through random updates using Glauber single-spin-flip Monte Carlo dynamic. We concentrate on two quantities: the lifetime τ , that is, the time it takes to reach magnetization zero, and the probabilities $P(t)$ and $P(H)$ that a magnetic particle has not switched for a fixed system size and field and for a fixed system size and waiting time, respectively. We also study the switching field H_{sw} as a function of system size for a given waiting time.

Key-Words: Nanoparticles, Kinetic Ising Ferromagnet, Monte Carlo (MC), Magnetization Switching.

1. Introducción

En el presente trabajo se presentan los resultados obtenidos con el desarrollo de simulaciones en computadora del fenómeno de inversión de la magnetización en partículas ferromagnéticas nanométricas para un sistema con alto grado de anisotropía. El modelo de Ising explica cualitativamente el comportamiento de

algunas cantidades observables experimentalmente [1]. Sin embargo, para obtener resultados más reales se adicionaron algunos efectos que asemejan impurezas no magnéticas para el modelo estudiado.

2. Modelo y Método de Simulación

Las propiedades macroscópicas de un sistema están determinadas por la naturaleza de los microestados accesibles. Ahora, es necesario saber la dependencia de la energía de una configuración de espines. Para un sistema ferromagnético con anisotropía uniaxial fuerte, la energía de un microestado en el modelo de Ising está representada por el hamiltoniano

$$E = -J \sum_{i,j=nn(i)}^N S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (1)$$

donde el espín S_i en la posición i de la red puede estar dirigido hacia arriba (“up”) o hacia abajo (“down”), a lo largo de un eje de acceso (“easy axis”) [2], J es la constante de acoplamiento que para un ferromagnético es mayor a cero,

$J > 0$ y H es el campo magnético externo. Las sumas $\sum_{i,j=nn(i)}^N$ y $\sum_{i=1}^N$ recorren todos los pares de vecinos cercanos y todas las celdas de una red cuadrada de dimensión lineal L , respectivamente. El término $-H \sum_{i=1}^N S_i$ describe la energía

de Zeeman del sistema. La temperatura del sistema se fijó en $T = 0,8T_c$.

Si se conoce el hamiltoniano que caracteriza un sistema, entonces se puede calcular algunas cantidades termodinámicas que vienen a ser promedios de cantidades medibles como la magnetización M y la energía E como función de la temperatura T .

El promedio térmico de la magnetización es $\langle M \rangle = \sum_C p(C) M(C)$ donde

$M(C)$ es la magnetización de la configuración C , durante las simulaciones, se computó la magnetización por espín como $M(C) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i$, $p(C) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_C}$

es la distribución de probabilidad para la configuración en el colectivo canónico como función de N, V, T . La suma se hace sobre todas las configuraciones posibles. E_C es la energía de cada configuración, el factor β es igual a $\frac{1}{k_b T}$, donde k_b es la constante de Boltzmann y T la temperatura.

Ahora, $Z(N, V, T) = \sum_C e^{-\frac{E(C)}{k_b T}}$ es llamada la función de partición, la cual es

una cantidad fundamental en Mecánica Estadística. Todas las cantidades de interés pueden ser extraídas de $Z(N, V, T)$, puesto que la fórmula para $Z(N, V, T)$ implica una solución exacta del modelo.

Otra cantidad física de interés, corresponde al promedio térmico de la energía del sistema $\langle E \rangle$, la cual puede ser expresada como

$$\langle E \rangle = \sum_C E_C P(C) = \frac{1}{Z} \sum_C E_C e^{-\beta E_C} \quad (2)$$

Es de notar que la energía no es constante para un sistema en el colectivo canónico.

Para estudiar el comportamiento dinámico de una partícula ferromagnética con impurezas no magnéticas se preparó el sistema en una configuración con todos los espines hacia arriba ($S_i = \pm 1$), y luego se crearon impurezas no magnéticas seleccionando espines al azar e igualando $S_i = 0$. Se consideró sistemas de dimensión lineal $L = 10, 20, 30, 70, 130$ y 260 concentraciones de impurezas igual a $\rho = 0,05, 0,10, 0,15, 0,20$. Calculamos algunas cantidades relevantes al problema de inversión de la magnetización, en particular el tiempo de vida promedio τ (“lifetime”), el campo de inversión H_{sw} (“Switching field”), la probabilidad de que el sistema no ha invertido su magnetización como función del tiempo $P(t)$ y del campo magnético $P(H)$, respectivamente.

3. Análisis y Discusión de los Resultados

3.1. Tiempo de Vida Promedio

Para calcular el tiempo de vida promedio, τ , calculamos la magnetización en cada paso de Monte Carlo por espín (MCSS) y medimos el tiempo que toma para alcanzar una magnetización menor que cero. El tiempo de vida promedio se obtiene calculando el promedio de τ en 100 simulaciones independientes.

El tiempo de vida promedio τ como función del campo magnético externo H para los tamaños $L = 30$ y $L = 260$, y para concentraciones de impurezas, que van desde $\rho = 0,00$ hasta $\rho = 0,20$ en saltos de $0,05$ disminuye cuando la concentración de impurezas aumenta indicando una aceleración en el decaimiento de la fase metaestable [3], [4], [5]. También fue observado que τ en función de la concentración de impurezas ρ para $L = 30$, $L = 260$ con $H = -0,10$ y $-0,20$, respectivamente, disminuye con el aumento en la concentración de impurezas.

La inversión de la magnetización en una partícula se realiza a través de diferentes tipos de decaimiento desde la fase metaestable. Las figuras 1 y 2 muestran núcleo síntesis y crecimiento en una simulación típica, la evolución temporal de la configuración de espines de una partícula ferromagnética durante su decaimiento, en la región de una gota y multigota, respectivamente. El crecimiento de una o muchas gotas y el eventual solapamiento de estas es la causa que produce la inversión de la magnetización en cada una de las regiones estudiadas.

3.2. Dinámica Espinodal

El campo magnético espinodal dinámico H_{DSP} , divide las diferentes regiones estocásticas y deterministas, y sus respectivas subregiones. Se calcula a partir

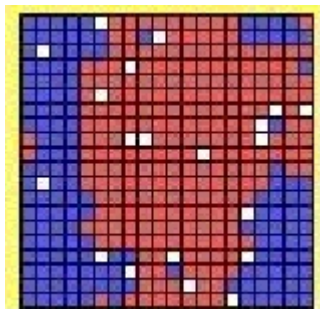


Figura 1: *Decaimiento de una fase metaestable para un sistema $L \times L = 20 \times 20$, $\rho = 0,05$, $H = -0,10$ en el régimen de una sola gota.*

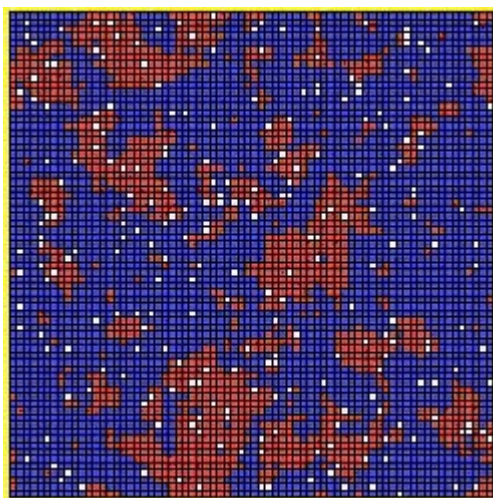


Figura 2: *Decaimiento en el régimen multigotas, un sistema $L \times L = 70 \times 70$, $\rho = 0,05$ y $H = -0,10$.*

de la desviación estándar relativa $r = \frac{\sigma_r}{\tau}$, y tomamos H_{DSP} como el campo $H_{\frac{1}{2}}$ para el cual $r = 0,5$.

3.3. Termodinámica Espinodal

El campo magnético que divide la regiones de coexistencia y de una gota se conoce como el campo espinodal termodinámico H_{ThSp} [6] [7]. En la región de coexistencia la partícula magnética decae por medio de fluctuaciones subcríticas. Es este hecho el que permite estimar H_{ThSp} , el cual matemáticamente se expresa mediante la condición $2R_c = L - 1$, la cual resulta en

$$H_{ThSp} = \frac{\sigma_{\infty}(T)}{(L - 1) m_{sp}} \quad (3)$$

Nuestras simulaciones indican que a medida que aumenta la concentración de impurezas H_{ThSp} se mueve a campos mayores. Lo cual significa que la región de coexistencia se expande cuando introducimos impurezas en la partícula magnética.

3.4. Probabilidad de Inversión

Esta magnitud, medible experimentalmente usando microscopias de fuerza magnética (MFM), permite obtener información sobre el modo de decaimiento, ya que su forma funcional depende frecuentemente de la región en la que ocurra la inversión de la magnetización. La probabilidad, $P(m > 0)$, como función del tiempo t en la región de una gota se ajusta con la ecuación

$$P(m > 0) = \exp \left[\frac{-t}{\tau(L, H, T)} \right] \quad (4)$$

se observa que la teoría describe la data muy bien para cero concentración de impurezas o concentración de impurezas muy bajas, e.g., impurezas $\rho = 0,00$ y $\rho = 0,05$. Sin embargo, para concentraciones de impurezas desde $\rho = 0,10$ hasta $\rho = 0,20$ la data no se ajusta bien a la forma funcional de $P(m > 0)$ que predice la teoría de gotas. Por otro lado, al calcular $P(m > 0)$ como función del tiempo en la región multigotas y realizar el ajuste de la data con la ecuación

$$P(m > 0) \approx 1 - \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{t - \tau}{L^{-1} \Delta_t} \right) \right] = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{t - \tau}{L^{-1} \Delta_t} \right) \quad (5)$$

se deduce que la teoría se ajusta extremadamente bien para el rango de impurezas consideradas.

La probabilidad, $P(m > 0)$ como función del campo magnético H en la región de una gota se determina por la ecuación (4). Esta ecuación depende a su vez de un ajuste a la ecuación

$$I(T, H) \approx B(T) |H|^3 \exp \left\{ -|H|^{-1} [\Xi_0(T) + \Xi_1(T) H^2] \right\} \quad (6)$$

en la cual se determinaron los parámetros $B(T)$ y $\Xi_1(T)$ [8][9]. Se verifica que al igual que en el caso de las probabilidades como función del tiempo, la data no se ajusta muy bien a la forma funcional para $P(m > 0)$ que predice la teoría de las gotas.

En $P(m > 0)$ como función del campo magnético H en la región multigotas para $L = 30$ y 70 , La data se ajusta a la ecuación

$$P(m > 0) |_t \approx 1 - \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{H - H_{sw}}{L^{-1} \Delta_H} \right) \right] = \frac{1}{2} \operatorname{erf} c \left(\frac{H - H_{sw}}{L^{-1} \Delta_H} \right) \quad (7)$$

Al igual que en el caso de $P(m > 0)$ en función del tiempo, la teoría se ajusta extremadamente bien para el rango de impurezas que se consideraron. Indicando que la forma funcional para $P(m > 0)$ que predice la teoría de gotas describe muy bien los resultados de las simulaciones.

3.5. Campo de Inversión

La figura 3 ilustra el campo de inversión para dos concentraciones, eso es, para el caso puro y un caso con concentración de impurezas no magnéticas, $\rho = 0,00$ y $\rho = 0,05$, respectivamente. Se observa que el máximo del campo de inversión se mueve hacia campos más pequeños y tamaños más grandes. La forma general del campo de inversión a la concentración de impurezas considerada permanece similar a la que tiene cuando no tiene impurezas.

4. Conclusión

Nuestros resultados indican que mientras la concentración de impurezas no magnéticas sea pequeña la dinámica se describe bien por la teoría de las gotas de núcleo síntesis como en el caso puro (sin impurezas no magnéticas). Se deduce que al invertir la magnetización de una partícula magnética esta procede a través de diferentes modos de decaimiento como en el caso puro. Hay una región estocástica y una región determinista separadas por un campo llamado espinodal dinámico H_{DSP} el cual disminuye cuando la concentración de impurezas aumenta. La región estocástica esta comprendida de la región de coexistencia y la región de una gota separadas por un campo llamado espinodal termodinámico H_{THSP} , el cual aumenta al aumentar el grado de impurezas en la partícula, sugiriendo un estrechamiento de la región de una gota. El estrechamiento de la región de una gota resulta en la invalidez de las formas funcionales $P(t)$ y $P(H)$ basadas en la teoría de una gota de núcleo síntesis para explicar los resultados de la simulación en esta región aún para concentraciones pequeñas. Por ultimo, el proceso de decaimiento en cada una de las regiones, región estocástica y región determinista al igual que sus respectivas subregiones, depende del tamaño del sistema L , la temperatura T y el campo magnético aplicado H

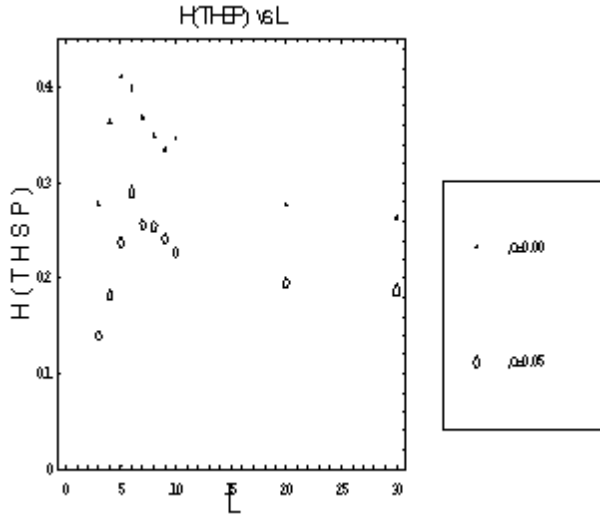


Figura 3: Campo espinodal dinámico H_{sw} vs L , el valor máximo en la gráfica representa el campo termodinámico espinodal, Aquí $H_{sw} \approx H_{THSP}$ para sistemas con $\rho = 0,00$ y $\rho = 0,05$.

Referencias

- [1] Gould, H., and Chnik, J. 1996 An Introduction to Computer Simulation Methods, Applications to Physical Systems, Addison-Wesley Publishing, Company, New York, N.Y., pp.550, 1996.
- [2] Binder, K., and Heermann, D.W. 1992. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics, Spinger-Verlag, New York, Berlin Heidelberg, pp.5, 1992.
- [3] Penrose, O., and Lebowitz, J.L. J. Stat. Physics. 3, (1971), 211.
- [4] Penrose, O., and Lebowitz, J.L., in Fluctuation Phenomena, edited by E. W. Montroll and J.L. Lebowitz (North-Holland, Amsterdam, 1979), Chap.5, pp.293.
- [5] Stoll, E.P., and Schneider, T. Physics 86-88B (1977), 1419.
- [6] Tomita, H., and Miyashita, S. Physics. Rev. B46 (1992), 8886.
- [7] Rikvold, P.A., Tomita, H., Miyashita, S., and Sides, S.W. Physics. Rev. E 49 (1994), 5080.
- [8] Ermakow, S.M. Die Monte Carlo Methode and verwandte Frangen (R. Oldenburg Verlag, Munchen 1975)
- [9] Müller-Krumbar, H., and Binder, K.J. Statist. Physics 8 (1973), 1.