



## Exchange Bias en Bicapas Magnéticas Ferro-Antiferro: Simulación Monte Carlo

P. Cossio y J. Restrepo

*Grupo de Estado Sólido y Grupo de Física y Astrofísica Computacional  
Instituto de Física, Universidad de Antioquia, A.A. 1226 Medellín-Colombia .*

Recibido 22 de Oct. 2007; Aceptado 15 de Oct. 2008; Publicado en línea 5 de Ene. 2009

---

### Resumen

En este trabajo estudiamos el comportamiento histéretico de una bicapa formada por una capa ferromagnética y otra antiferromagnética, ambas con estructura cúbica simple. En la interface entre los dos subsistemas, se utilizaron dos integrales de intercambio diferentes para representar la interacción entre cada una de las subredes de la capa antiferro con la película ferro. Esto se hizo siguiendo el modelo de Lederman-Ramírez-Kiwi. Se utilizó una dinámica de Metropolis, un Hamiltoniano de Heisenberg clásico con interacciones a primeros vecinos, un término de anisotropía magnetocristalina y se implementaron condiciones de frontera semilibres. Se encontraron las condiciones para las cuales tiene lugar el fenómeno de desplazamiento de los ciclos de histéresis (Exchange Bias) al enfriar la bicapa a una temperatura por debajo de la temperatura de Néel. También se reporta la variación del campo de intercambio y del campo coercitivo en función de la temperatura. Nuestros resultados se comparan finalmente con reportes experimentales encontrados en la literatura.

**Palabras claves:** Monte Carlo, Intercambio preferencial, bicapas.

### Abstract

In this work we study the hysteretic behavior of a bilayer formed by a ferromagnetic layer and an antiferromagnetic one, both of them having cubic simple structure. Along the interface between both subsystems, two different exchange integrals were used to represent the interaction between each one of the sublattices of the antiferro-layer with the ferro-film. This was carried out following the Lederman-Ramírez-Kiwi's model. A Metropolis dynamics and a classical Heisenberg Hamiltonian with first neighbors interactions plus a magnetocrystalline anisotropy term were used. Semifree boundary conditions were also implemented. We have found the conditions for which the exchange bias phenomenology takes place when cooling the bilayer to a temperature below Néel temperature. The variation of the exchange field and the coercive force as function of temperature is also reported. Our results are finally compared with the experimental reports found in the literature.

**Keywords:** Monte Carlo, Exchange Bias, bilayers.

© 2009 Revista Colombiana de Física. Todos los derechos reservados.

---

### 1. Introducción

El fenómeno de exchange bias (EB), caracterizado por un corrimiento del centro del ciclo de histéresis en sistemas magnéticos compuestos, es de gran importancia actualmente por su aplicación en el campo de la espintrónica, grabación magnética y en el diseño de nuevos dispositivos como las válvulas de espín. A pesar de la gran cantidad de trabajos experimentales sobre este tema, el modelamiento teórico de este fenómeno sigue siendo todavía un problema abierto y

han sido varios los modelos que se han propuesto para su explicación. Entre los trabajos teóricos más importantes se destacan el modelo de intercambio directo [1], el de paredes de dominio [2], y el de rugosidad en la interface [3]. Estos modelos, sin embargo, no logran describir de manera completa los experimentos. De aquí la necesidad de profundizar en la búsqueda de nuevos modelos y simulaciones numéricas que contribuyan al entendimiento de los mecanismos que gobiernan el fenómeno de exchange bias. Teniendo en

cuenta esta necesidad y motivados por el reciente modelo de Kiwi [4], estudiamos en este trabajo, utilizando el método de Monte Carlo, las propiedades histéricas de una bicapa magnética ferro-antiferro. En particular, nos enfocaremos en la variación del campo de intercambio con la temperatura.

## 2. Modelo y Simulación

Para las estructuras cristalinas de cada una de las películas delgadas antiferromagnética y ferromagnética se consideró una red cúbica simple de dimensión  $16 \times 16 \times 4$ . Se utilizaron condiciones de frontera semilibres, es decir, condiciones periódicas en la dirección transversal y condiciones libres en la superficie inferior de la capa ferromagnética y en la superficie superior de la capa antiferromagnética. Se utilizó el algoritmo de Metropolis con dinámica de inversión simple de espín. Basándonos en la propuesta de Kiwi [4] proponemos dos integrales diferentes en la interfaz con una simetría tipo tablero de ajedrez, donde cada integral describe la interacción de una de las subredes del antiferro con el ferromagneto. Aparte de las interacciones en el interior de dichas capas y de la interacción de los espines con un campo magnético externo, se propone un término de anisotropía magnetocristalina en la dirección  $x$  ó  $(100)$  paralela al plano de la película. El Hamiltoniano que describe el sistema es:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle \in F} J_F \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{\langle i,j \rangle \in AF} J_{AF} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{i \in AF, j \in F} J_{I1} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1)$$

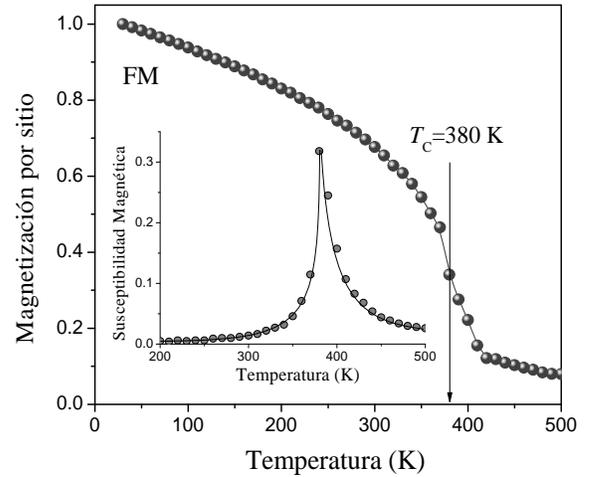
$$- \sum_{i \in AF, j \in F} J_{I2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{\langle i \rangle} \vec{h} \cdot \vec{S}_i - K_{an} \sum_{\langle i \rangle} S_{ix}^2,$$

donde  $J_F$ ,  $J_{AF}$ ,  $J_{I1}$ ,  $J_{I2}$  son las integrales de intercambio del ferro, del antiferro, en la interfaz con la subred 1 y en la interfaz con la subred 2, respectivamente.  $K_{an}$  es la constante de anisotropía y  $\vec{h}$  es el campo magnético aplicado en la dirección  $x$ . En cuanto a los valores numéricos de estos parámetros se ensayaron diferentes combinaciones hasta encontrar las condiciones que permitieran reproducir el fenómeno de Exchange bias. Finalmente se realizaron promedios estadísticos de los observables físicos, con énfasis en la componente de la magnetización paralela a la dirección del campo, empleando para ello hasta  $10^4$  pasos de Monte Carlo (*mcs*).

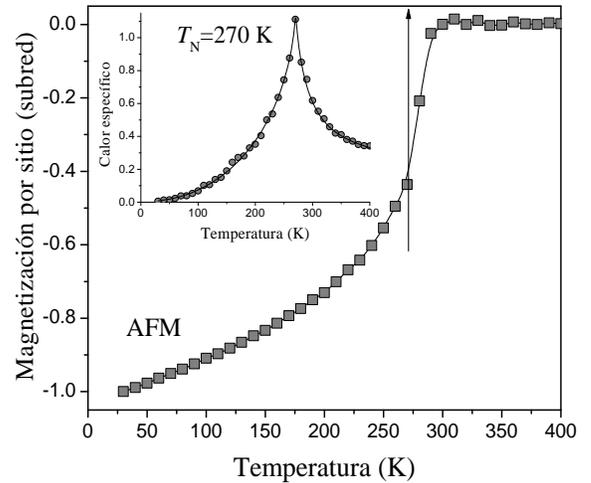
## 3. Resultados y Discusión

Análogamente al experimento, lo que se hizo en la simulación fue el proceso de enfriamiento con campo (FC). Comenzando con una temperatura intermedia entre la temperatura de Curie ( $T_C$ ) del ferromagneto y la temperatura de Néel ( $T_N$ ) del antiferromagneto y en presencia de un campo magnético externo, se enfrió el sistema en pasos de 10 K hasta valores de temperatura inferiores a  $T_N$ . Al llegar a la temperatura deseada se empieza a variar el campo magnético para obtener el ciclo de histéresis. Para ello es necesario

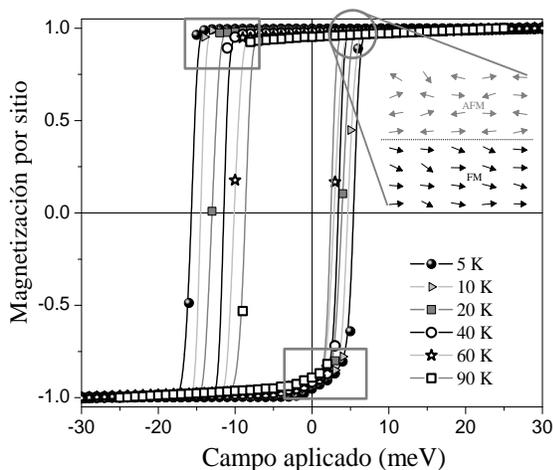
conocer primero los valores de  $T_C$  y  $T_N$  de cada película por separado. La Fig. 1 muestra la variación de la magnetización y la susceptibilidad magnética en función de la temperatura para una película delgada ferromagnética  $16 \times 16 \times 4$  con  $J_F = 25$  meV. De los máximos en la susceptibilidad (inserto Fig. 1) y el calor específico se estimó el valor  $T_C = 380$  K. La Fig. 2 muestra la magnetización por subred de la película delgada antiferromagnética y el calor específico en función de la temperatura. De los máximos en la susceptibilidad y calor específico (inserto Fig. 2) y usando  $J_{AF} = -17.5$  meV, se estimó el valor  $T_N = 270$  K.



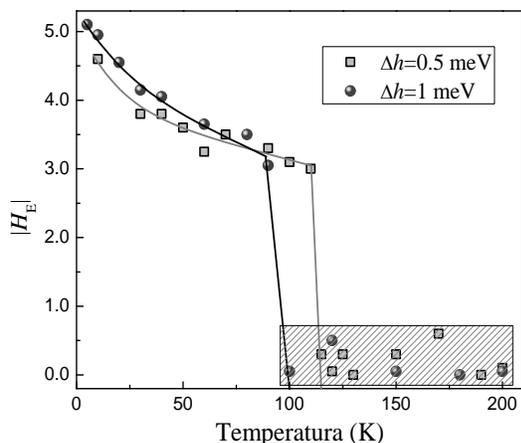
**Fig. 1.** Magnetización y susceptibilidad magnética en función de  $T$  para la película ferro (FM).  $T_C$  se estima a partir de los máximos de la susceptibilidad y el calor específico.



**Fig. 2.** Magnetización por subred y calor específico en función de  $T$  para la película antiferro (AFM). El calor específico muestra el comportamiento lambda típico de una transición de fase magnética.



**Fig. 3.** Ciclos de histéresis para varias temperaturas. Los recuadros hacen notar la asimetría (ver texto). Se incluye una configuración de espín



**Fig. 4.** Dependencia de  $|H_E|$  en función de la temperatura para dos variaciones distintas del campo ( $\Delta h=1$  meV y  $\Delta h=0.5$  meV).

La Fig.3 muestra los ciclos de histéresis obtenidos a varias temperaturas iniciando el proceso FC desde 310 K. Se usaron los siguientes parámetros para las integrales en la interfaz:  $J_{11} = -25$  meV,  $J_{12} = -5$  meV, y una constante de anisotropía  $K_{an} = 5$  meV. En todos los casos tiene lugar el fenómeno de exchange bias y se nota también una reducción del campo coercitivo con la temperatura. En la misma figura se muestra cómo luce la configuración de espines de una sección transversal de la bicapa para cuatro puntos distintos en el ciclo. Es de notar que la dirección de los espines del antiferro no cambia notablemente. La Fig.4 resume los valores del modulo de  $H_E$  obtenidos para las diferentes temperaturas consideradas. Así mismo se muestra la variación de esta cantidad para dos pasos de campo diferentes, lo que equiva-

le a dos velocidades diferentes de barrido del campo. En ambos casos se nota que  $|H_E|$  disminuye con la temperatura hasta llegar a cero. Los resultados revelan que el modelo empleado da lugar a la existencia de una temperatura entre 100 K y 120 K para la cual ocurre un cambio abrupto de  $|H_E|$  llegando rápidamente a cero. El valor de esta temperatura crítica es diferente para los dos pasos de variación del campo. Estos resultados concuerdan cualitativamente con resultados experimentales reportados por Chen [5] para tricapas magnéticas. Finalmente de los resultados se obtuvo una disminución del campo coercitivo con la temperatura caracterizada por una discontinuidad alrededor de la temperatura crítica en la que  $|H_E|$  cae abruptamente a valores cercanos a cero.

Comparando con resultados reportados por Shi et. al. [6], vemos que tanto el campo de exchange como el campo coercitivo presentan un comportamiento discontinuo a cierta temperatura ( $T_B$ ) atribuida a un fenómeno de bloqueo donde  $H_E$  tiende a cero y el ciclo se vuelve simétrico. En nuestro caso se puede concluir que la temperatura de bloqueo (100-120 K) depende la variación en el paso del campo y es además inferior a la temperatura de Néel ( $T_N=270$  K) del antiferromagneto en acuerdo con resultados experimentales recientes [6]. Finalmente, además del desplazamiento de los ciclos propios del EB, de los resultados se concluye un tipo de asimetría adicional (ver recuadros en la Fig. 3) que sugiere modos de inversión diferentes de la magnetización y que se atribuyen a la presencia de la constante positiva de anisotropía magnetocristalina  $K_{an}$ , la cual favorece el acople de los momentos a lo largo de la dirección (100). Esto hace que justo antes de invertir la dirección del campo y partiendo de valores negativos de la magnetización, existan momentos de la capa FM que empiezan a invertirse siguiendo la dirección del eje fácil (100), i.e. en la dirección positiva del eje  $x$ .

### Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por COLCIENCIAS a través de los proyectos 1115-05-17603 y CENM 043-2005; por los proyectos IN1247CE y Sostenibilidad 2007-2008 del Grupo de Estado Sólido de la Universidad de Antioquia.

### Referencias

- [1] W. H. Meiklejohn and C. P. Bean, Phys. Rev. 102, 1413 (1956).
- [2] D. Mauri, H. C. Siegmann, P. S. Bagus, E. Kay, J. Appl. Phys., 62, 3047 (1987).
- [3] A. P. Malozemoff, Phys. Rev. B, 35, 3679 (1987), Phys. Rev. B 37, 7673 (1988).
- [4] D. Lederman, R. Ramírez y M. Kiwi., Phys. Rev. B 70, 184422 (2004).
- [5] Xi Chen, Ch. Binek, A. Hochstrat, and W. Kleemann, Phys. Rev. B 65, 012415 (2001).
- [6] Hongtao Shi, D. Lederman, K. V. O'Donovan, J. A. Borchers, Phys. Rev. B 69, 214416 (2004).