

SIMULACIÓN MONTE CARLO DE PELÍCULAS DELGADAS FERROMAGNÉTICAS

P. Cossio¹, J. Mazo-Zuluaga¹ y J. Restrepo¹

¹*Grupo de Estado Sólido y Grupo de Física y Astrofísica Computacional
Instituto de Física, Universidad de Antioquia, A.A. 1226 Medellín-Colombia
(Recibido 09 de Sep.2005; Aceptado 20 de Jun. 2006; Publicado 20 de Nov. 2006)*

RESUMEN

Con base en el método Monte Carlo se estudian las propiedades magnéticas y el comportamiento crítico de películas delgadas ferromagnéticas de dimensión $LxLxd$, con estructura cúbica simple. Se implementó una dinámica de Metropolis, un modelo de Ising con interacciones a primeros vecinos y condiciones de frontera periódicas en dirección transversal y condiciones de frontera libres en la dirección d perpendicular al plano de la película. Para diferentes espesores de película, definidos por el número de monocapas, se calculan la magnetización por espín, la susceptibilidad magnética y el cumulante de cuarto orden de la magnetización en función de la temperatura. Se calculan también en forma diferenciada las contribuciones del *bulk* y la superficie, y se estiman los exponentes críticos ν , β y γ . Finalmente se presenta y discute la dependencia de la temperatura crítica con el espesor de las películas.

Palabras claves: Propiedades magnéticas, Monte Carlo, Ising, películas delgadas, exponentes críticos

ABSTRACT

On the basis of the Monte Carlo method, the magnetic properties and the critical behavior of ferromagnetic simple cubic thin films of $LxLxd$ dimension are studied. Both the Metropolis dynamics and an Ising model involving nearest neighbor interactions with periodic boundary conditions along the transversal direction and free boundary conditions along the d direction, perpendicular to the film surface, were implemented. For different film thicknesses, determined by the number of monolayers, we compute the magnetization per spin, the magnetic susceptibility and the fourth order magnetization cumulant as a function of temperature. Bulk and surface contributions were also computed in a differentiated fashion, from which the critical exponents ν , β and γ were estimated. Finally, the dependence of the critical temperature on the thickness is presented and discussed.

Keywords: Magnetic properties, Monte Carlo, Ising, thin films, critical exponents

1. INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas se ha prestado un interés especial al área de las películas delgadas gracias a las múltiples aplicaciones tecnológicas y a las peculiares propiedades magnéticas que presentan en razón de su geometría. Contrario al gran desarrollo experimental, se encuentran relativamente pocos trabajos sobre teoría y simulaciones computacionales en esta importante, y cada vez más creciente, área de la física del estado sólido. Uno de los aspectos que ha atraído la atención es el cruce del carácter 2-dimensional (2D) a 3-dimensional (3D) al aumentar el espesor y su influencia sobre las propiedades magnéticas. Por ejemplo, es claro tanto experimental como computacionalmente [1], que la temperatura crítica en películas delgadas ferromagnéticas

cambia de valores típicos de sistemas 2D a 3D al aumentar el número de monocapas. A esto se suma el interés por el comportamiento crítico de estos sistemas con dimensionalidades espaciales efectivas fraccionarias entre 2 y 3, y la necesidad de estudiar la dependencia de ciertas cantidades como la magnetización, susceptibilidad magnética y temperatura crítica con el espesor. Con base en esta motivación, la propuesta del presente trabajo es hacer un análisis computacional y teórico del comportamiento de la temperatura crítica, la magnetización, la susceptibilidad y los exponentes críticos de películas delgadas ferromagnéticas en función de su espesor. Para ello utilizamos el método de Monte Carlo junto con un modelo de Ising primeros vecinos para simular una red cúbica simple con acoplamiento ferromagnético y condiciones de frontera semi-libres. Se calculan las contribuciones a la magnetización de la superficie y del interior de las películas en forma separada, lo cual constituye una de las enormes ventajas del método Monte Carlo respecto a medidas experimentales. Finalmente se calculan los exponentes críticos usando la teoría de escalamiento de tamaño finito [2].

2. MODELO Y SIMULACIÓN

Para la simulación de las películas delgadas se consideró un tamaño de sustrato de base cuadrada $L \times L$ y espesor d , con $L=40,60,80,100,120$ y $d=3,5,7,10$ y 15 monocapas atómicas para un número total de espines $N=L \times L \times d$. Se consideraron espines tipo Ising con Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (1)$$

donde los espines σ_i toman los valores ± 1 , J es la integral de intercambio y la suma corre sobre primeros vecinos. En este trabajo se utilizan unidades reducidas $J/K_B T$ en el rango entre 1.0 y 8.0. En la simulación se empleó un algoritmo de Metropolis de inversión simple de espín (*single-spin flip dynamics*) [3] con condiciones de frontera semi-periódicas. Para estudiar la evolución de las propiedades magnéticas con la temperatura se partió de una configuración aleatoria de espines ($H=0, T \rightarrow \infty$), correspondiente a un estado desordenado a campo cero de temperatura muy por encima de la temperatura de Curie. Se calculó la magnetización por sitio (tanto la total como las contribuciones individuales del *bulk* y la superficie de las películas, calculadas independientemente), la susceptibilidad magnética y el cumulante de cuarto orden de la magnetización, siguiendo el procedimiento descrito en la Referencia 3. El cálculo de los promedios canónicos en el equilibrio se realizó sobre un rango de 10^4 pasos de Monte Carlo por espín. El procedimiento consistió en considerar el conjunto de muestras con todos los valores de L para cada d y proceder a los cálculos de los exponentes críticos a partir de las dependencias con la temperatura de la magnetización y la susceptibilidad. Los programas se corrieron en el cluster Hércules del Instituto de Física-Universidad de Antioquia, que cuenta con 11 nodos duales con procesadores Pentium XEON de 2.6 GHz y 2 Gb de RAM. El tiempo de cómputo promedio por cada programa para un L y d definidos fue de 5 días.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La figura 1 muestra las curvas de magnetización para películas con $L=120$ y varios espesores de sistema, y el inserto las contribuciones *bulk* y superficie para el caso $L=120, d=10$.

Los resultados revelan el comportamiento típico de una transición ferromagnética a paramagnética a cierta temperatura crítica T_C , así como el desplazamiento de dicho valor hacia valores más pequeños al disminuir el espesor de las películas. Esta tendencia se confirma también a través de la posición de los máximos en las curvas de susceptibilidad mostradas en la figura 2. En el inserto de la figura 1 se muestran también las contribuciones del *bulk* y la superficie a la magnetización total para el caso $L=120$, $d=10$.

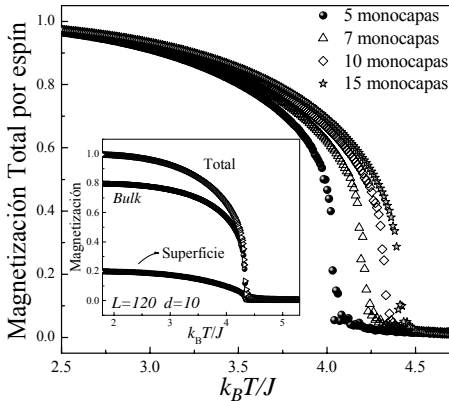


Figura 1. Curvas de magnetización en función de la temperatura para $L=120$ y varios espesores. El inserto muestra las contribuciones de la superficie y el bulk a la magnetización para $L=120$ y $d=10$.

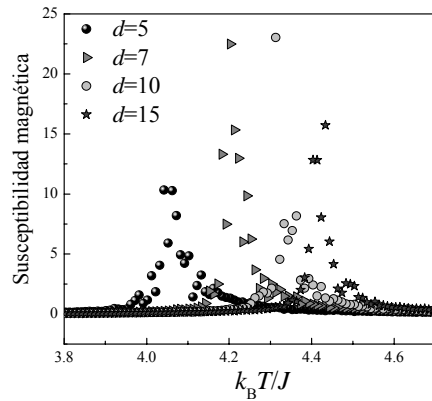


Figura 2. Dependencia con la temperatura de la susceptibilidad magnética para diferentes espesores de película con $L=120$. Nótese que T_C se corre hacia menores valores al disminuir el espesor.

En particular para $L=120$ y $d=10$, la superficie presenta los valores más bajos de magnetización, siendo la mayor contribución debida al interior de las películas (*bulk*). Esta diferencia se atribuye a la mayor densidad de enlaces ferromagnéticos en el interior, donde se tiene un mayor número de primeros vecinos, a diferencia de la superficie, en la que se tiene un número de coordinación menor por el rompimiento de simetría. Por el contrario, para películas ultradelgadas de tres ó menos monocapas de espesor, tal comportamiento se invierte debido a la mayor proporción de átomos en la superficie. El inserto evidencia también la coincidencia en T_C de las diferentes contribuciones a la magnetización. Tal coincidencia es de esperar en tanto que la superficie y el interior están acoplados vía la integral de intercambio. Así, cuando la longitud de correlación diverge en T_C el sistema cambia de estado como un todo. Adicionalmente se nota el carácter extensivo de la magnetización al considerar la aditividad de las contribuciones *bulk* y superficie. Los valores de T_C extrapolados al límite termodinámico se obtuvieron utilizando la teoría de escalamiento de tamaño finito [2]:

$$T_C(\infty) = T_C(L) + aL^{-1/\nu} \tag{2}$$

Aquí ν es el exponente crítico de la longitud de correlación calculado a partir del ansatz de Binder [4]. Los resultados de la dependencia con el espesor de T_C se muestran en la figura 3.

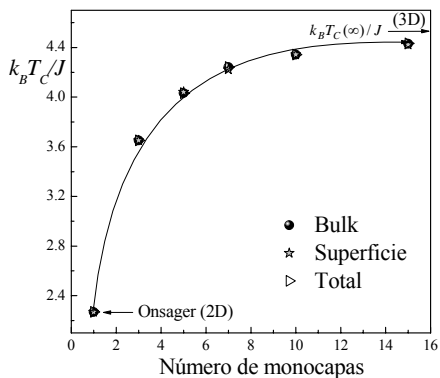


Figura 3. Dependencia de la temperatura crítica con el espesor de las películas. Se observa la concordancia de T_C para las diferentes contribuciones.

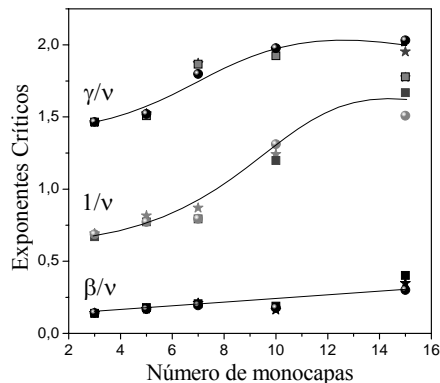


Figura 4. Exponentes críticos en función del espesor de las películas considerando las diferentes contribuciones.

Esta figura incluye los valores correspondientes a la solución de Onsager [5] para un sistema 2D y el obtenido para un sistema Ising 3D via Monte Carlo de alta resolución [1]. En conclusión, los resultados revelan un crecimiento no lineal de T_C con el número de monocapas. Al comparar con los valores límites, se observa un solapamiento de estas dimensionalidades en el que dependiendo del espesor, el sistema puede estar caracterizado por una dimensión efectiva fraccionaria entre 2 y 3. Para espesores por encima de 8 monocapas la universalidad del sistema se asemeja más a la de un sistema 3D, mientras por debajo de este valor la dimensionalidad disminuye rápidamente. Finalmente la figura 4 revela una ligera dependencia de los exponentes críticos con el espesor, atribuible al solapamiento de dimensionalidad. Se nota además que tanto el bulk como la superficie parecen estar caracterizados por los mismos exponentes. Estos resultados se corresponden en sus órdenes de magnitud con los reportados por Laosiriataworn [1].

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue financiado por Colciencias proyecto No. 1115-05-17603, Proyecto de Sostenibilidad GES-UdeA 2005-2006 y el Centro de Excelencia de Nuevos Materiales CENM, contrato Colciencias No. 043-2005.

REFERENCIAS

[1] Y. Laosiriataworn, J. Pouler and J. B. Staunton, *Phys. Rev. B* **70** (2004) 104413. J. W. Tucker, *J. Magn. Magn. Mat.* **210** (2000) 383.
 [2] M. E. Fisher and M. N. Barber, *Phys. Rev. Lett.* **28** (1972) 1516.
 [3] D. P. Landau and K. Binder, in: *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* Cambridge University Press, Cambridge, (2000). M.E. J. Newman, G.T. Barkema, in: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Clarendon Press, Oxford (1999).
 [4] D. P. Landau and K. Binder, *Phys. Rev. B* **41** (1990) 4633. K. Binder, D. P. Landau and A. M. Ferrenberg, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 298.
 [5] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65** (1944) 117.