

Simulaciones Monte Carlo del Modelo de Stoner y Wohlfarth

G. P. Saracco,

Grupo de simulaciones en Materia Condensada y Física Estadística

INIFTA

Modelo de Stoner-Wohlfarth:

1) Simula el comportamiento de monodominios magnéticos esféricos (nanopartículas)

;

2) Supone anisotropía uniaxial (caso mas simple), rotación coherente (no hay visc.), y Magn. uniforme

Energía de c/ part.: término anisotrópico + campo externo (Zeeman):

$$E_i = -K_i V_i (\hat{s}_i \cdot \hat{n}_i)^2 - \vec{\mu}_i \cdot \vec{H} \quad \vec{\mu}_i = M_s V \hat{s}_i, \vec{K} = K \hat{n}_i, \vec{H} = H \hat{n}_H$$

Interacción con un baño térmico fluctuaciones
del momento magnético:

E_b : barrera de energía:

$$k_B T \gg E_b \quad \text{Estado SPM}$$

$$k_B T \ll E_b \quad \text{Estado Bloqueado}$$

$$k_B T \sim E_b \quad \text{Estado dep. del tiempo de activación } \tau = \tau_0 e^{E_b/k_B T}$$

Si t_m = tiempo de medida

$$\tau \gg t_m \rightarrow \text{Estado Bloqueado}$$

$$\tau \ll t_m \rightarrow \text{Estado SPM}$$

$$\tau \equiv t_m \rightarrow \text{define una } T \text{ de bloqueo} \quad T_B = \frac{KV}{k_B \ln(t_m/\tau_0)}$$

Si además se agregan las interacciones dipolares, la energía total es:

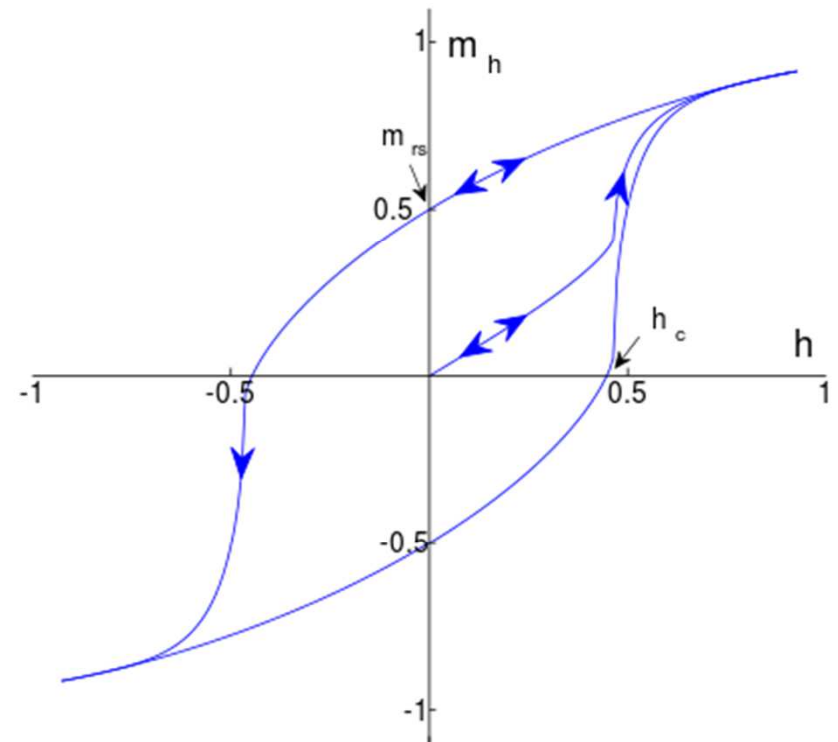
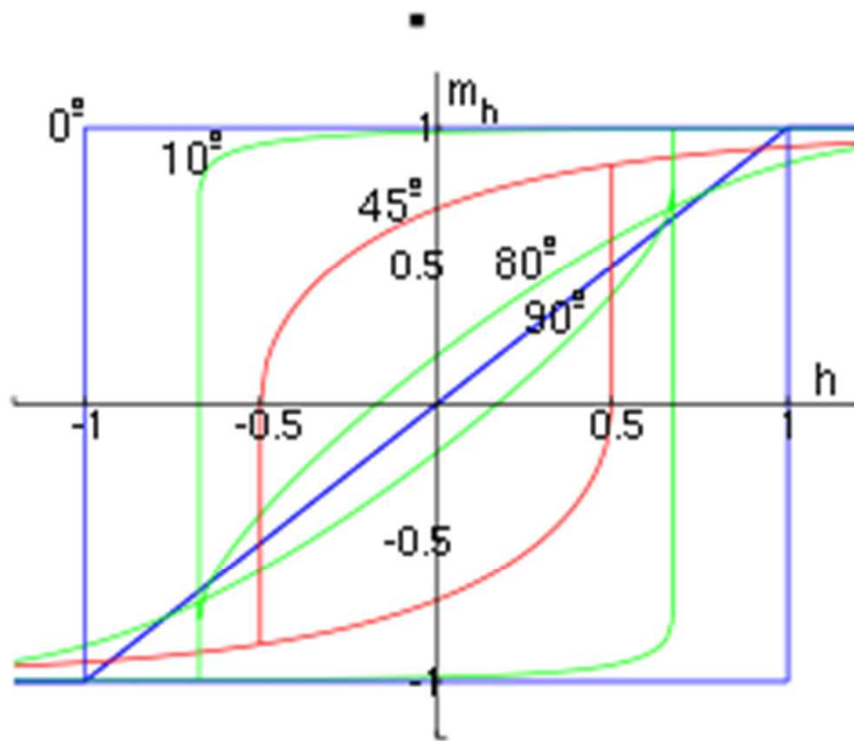
$$E_i = -KV(\hat{s}_i \cdot \hat{n}_i)^2 - \mu_0 M_S V H(\hat{s}_i \cdot \hat{n}_H) + \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{j \neq i}^N \left(\frac{(\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j)}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{\mu}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right)$$

r_{ij} : distancia entre la part. i y la j

Ciclos de histéresis: Resultados teóricos sin interacciones dipolares a $T=0$

a) Angulo fijo entre K y H (para todas las parts.)

b) Angulos al azar



Ciclos de Histéresis en el modelo S-W

Simulaciones Monte Carlo

Detalles:

$N=100$, $K=4.5 \times 10^4$ J/m , $M_s=1.7 \times 10^6$ A/m diam.=75 nm (parts. de Fe recub c/ MgO)

$$\vec{H} = H \hat{n}_H = H \hat{k}$$

Condición inicial: $H=0$ y . magnetización $\vec{M} = \vec{0}$, distribuídas uniformemente en redes Cúbicas de $L=24, 50$ y 100

Condiciones de contorno : Abiertas

Se midió el ciclo de histéresis para distintos ángulos entre \vec{K} y \vec{H} (fijos y al azar) del modelo S-W y S-W + interacciones dipolares. Se midió $M_h=M_z$

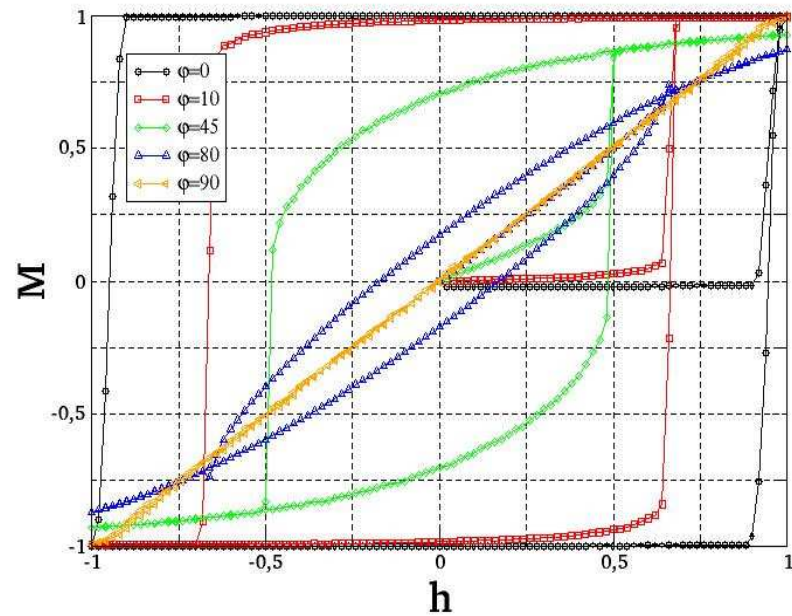
Se trabaja con la energía reducida:

$$\frac{E}{k_B T}$$

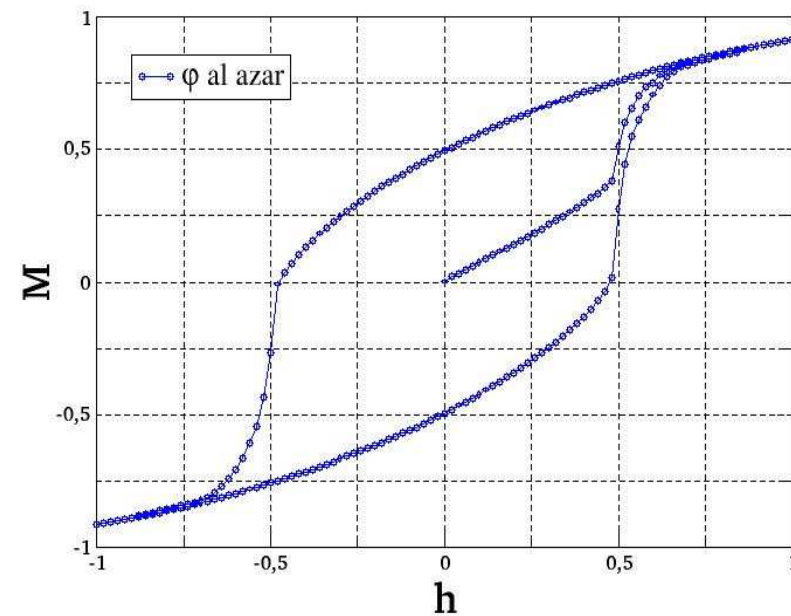
$$= -\frac{(\hat{s}_i \cdot \hat{n}_i)^2}{2t} - \frac{h}{t} (\hat{s}_i \cdot \hat{n}_H) + \frac{g}{t} \sum_{j \neq i}^N \left(\frac{(\hat{s}_i \cdot \hat{s}_j)}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\hat{s}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{s}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right) \left\{ \begin{array}{l} t = \frac{k_B T}{2KV} \\ h = \frac{H}{H_a} = \frac{2KH}{\mu_0 M_s} \\ g = \frac{M_s}{3H_a} \\ r'_{ij} = \frac{r_{ij}}{D} \end{array} \right.$$

Resultados de las simulaciones a $t=0.001$

A) Angulos fijos entre H y K



b) Angulos al azar



Descripción del algoritmo:

La evolución del sistema se realizó aplicando algoritmo de Metrópolis, el cual actualiza la configuración del sistema en forma estocástica a cada paso del tiempo Monte Carlo, definido como N intentos de cambiar la orientación de los momentos. Las orientaciones de cada μ_i están dadas por el par de ángulos esféricos (θ, ϕ)

El algoritmo funciona de la siguiente manera:

- a) Al tiempo t^* Se elige un momento magnético i al azar;
 - b) Se calcula la energía de la configuración actual E_i^{inic} ;
 - c) Para el momento elegido, se sorteja una nueva orientación (θ', ϕ') desde una distribución uniforme en la esfera unidad, creando una nueva configuración del sistema. y se calcula la energía E_i^{final} ,
 - d) La probabilidad de que el sistema pase a la nueva configuración está dada por la probabilidad $P_{inic \rightarrow final} = \exp(-\Delta E/t)$ donde $\Delta E = E_i^{final} - E_i^{inic}$. Si un número al azar tomado de una distribución uniforme normalizada es menor o igual a P , el cambio es aceptado y la configuración nueva pasa a ser la actual.
- Luego de N intentos de cambios de cambio de la configuración, $t^* \rightarrow t^*+1$ y el proceso se repite.

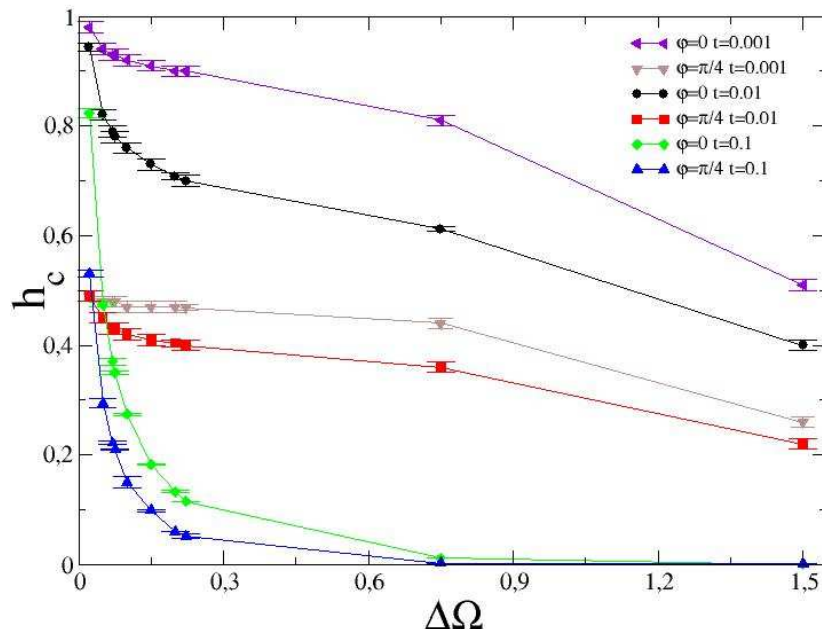
Inconvenientes de la simulación: elección de la nueva orientación:

Se optimiza el tiempo de simulación definiendo las nuevas orientaciones como apartamientos de la dirección actual:

$$\theta' = \theta \pm \Delta\theta \text{ y } \phi' = \phi \pm \Delta\phi$$

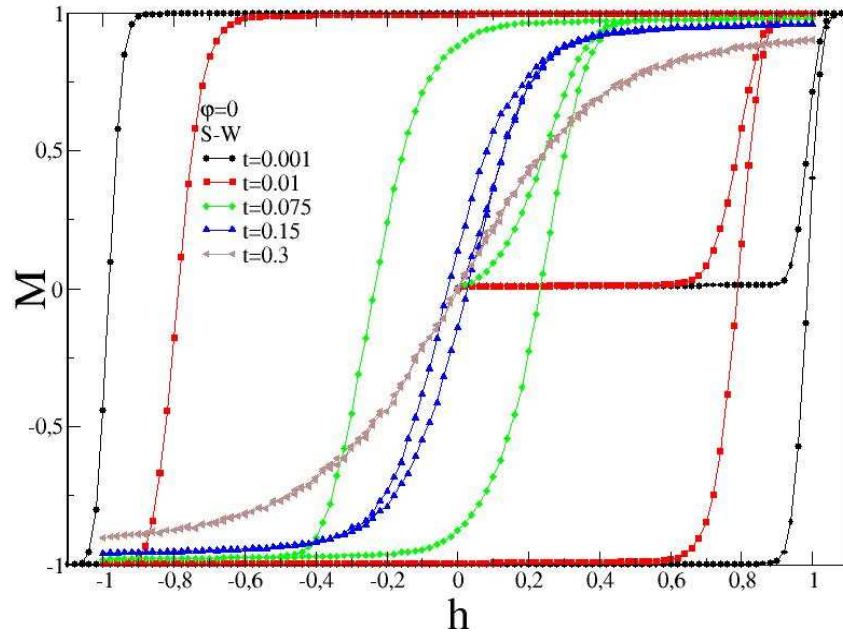
Esta limitación se denomina restricción de ángulo sólido (RAS) y resulta razonable que el apartamiento dependa de la temperatura, pero puede fijarse como constante también.

Calibración: El campo coercitivo h_c decrece con $\Delta\theta = \Delta\Omega$, lo que lentifica la dinámica por un gran número de eventos rechazados



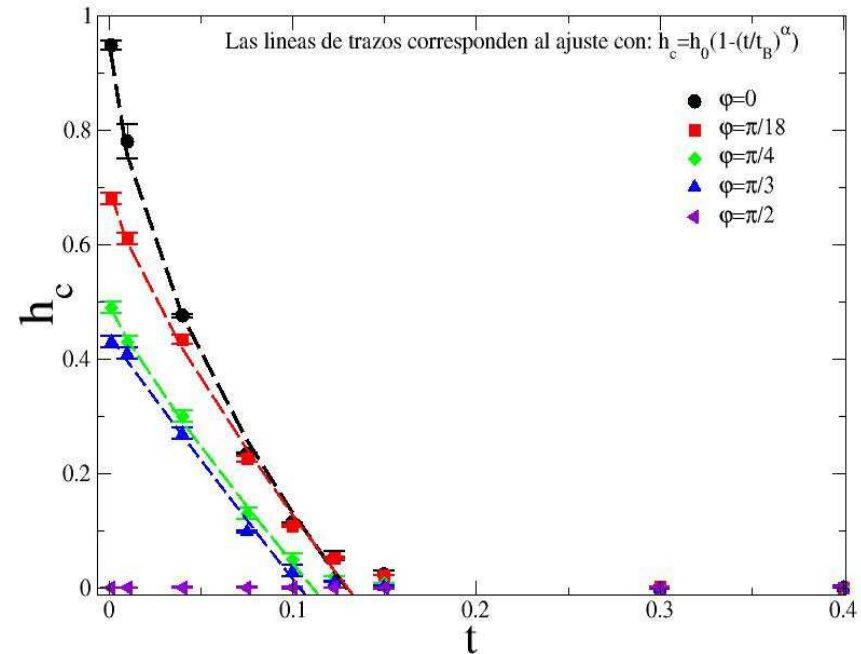
Basados en los resultados analíticos del SW Y la cuantificación del tiempo MC de Nowak, se tomó $\Delta\theta = \pi\sqrt{0,05t}$, $\Delta\phi = 2\Delta\theta$. El campo fue variado en $\Delta h = 0,02$ cada $t_m = 400$ tiempos MC

RESULTADOS: a) S-W c/ ang. Fijo e/ H y K



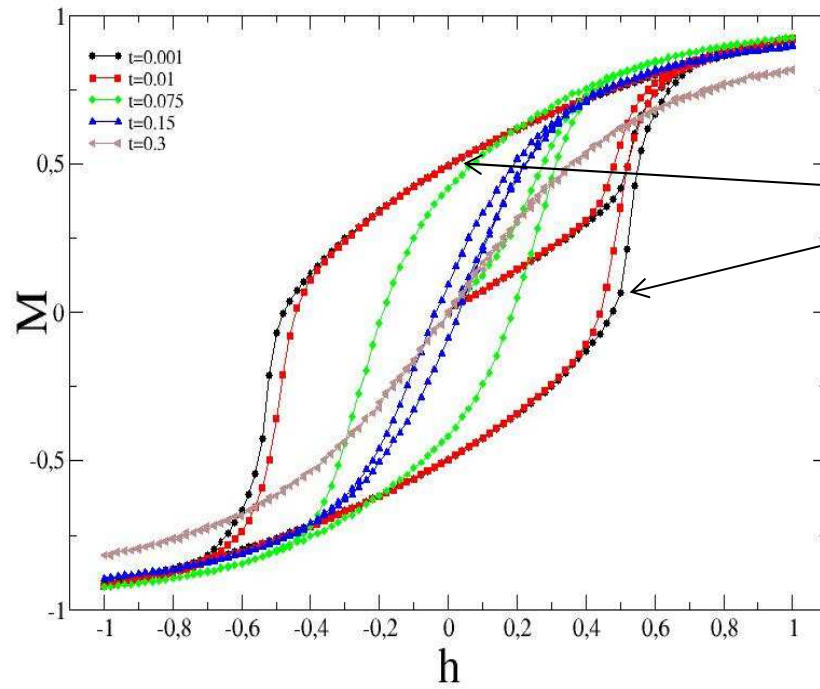
Los ajustes se realizaron con la expresión

$$h_c = h_0 \left(1 - \left(\frac{t}{t_B}\right)^\alpha\right)$$



Para $\phi=0$ $\alpha=0.52(3)$ en buen acuerdo con la teoría. El resto de los ángulos mantienen la dependencia pero no el exponente

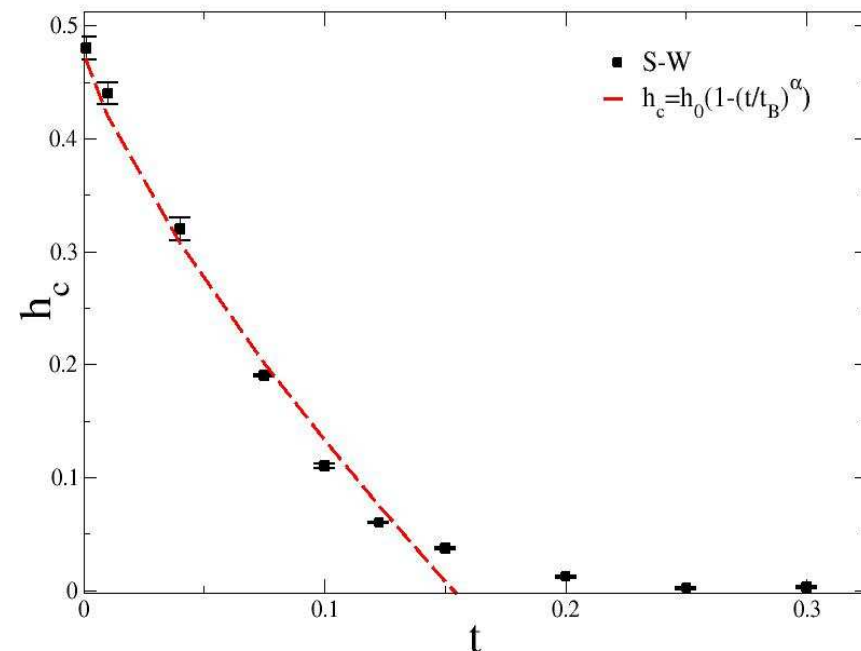
b) Angulos al azar



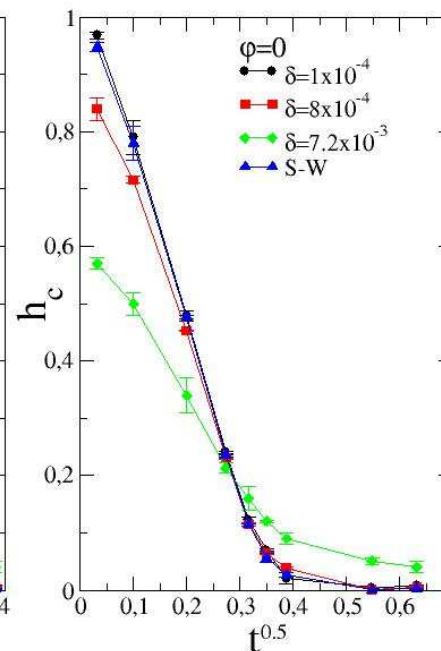
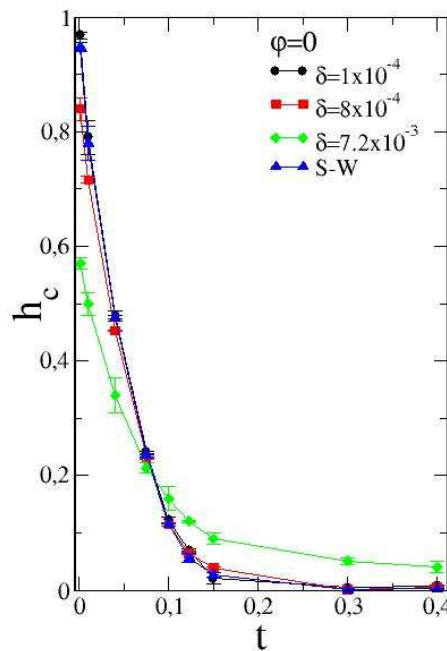
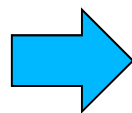
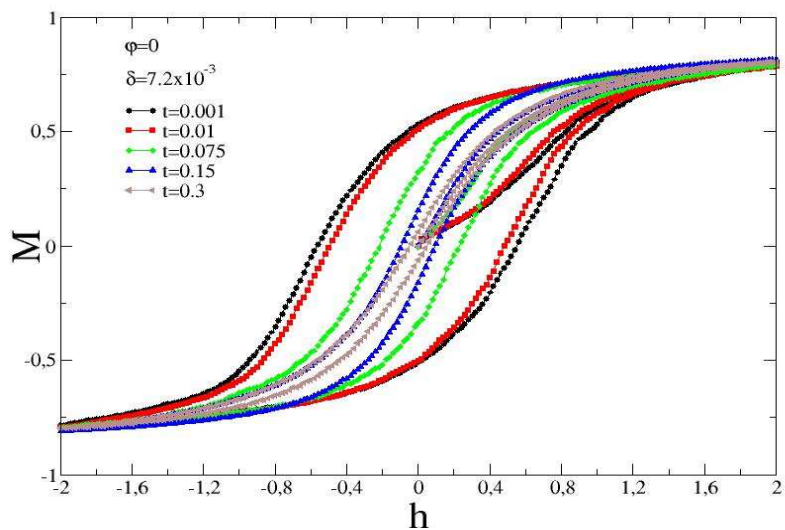
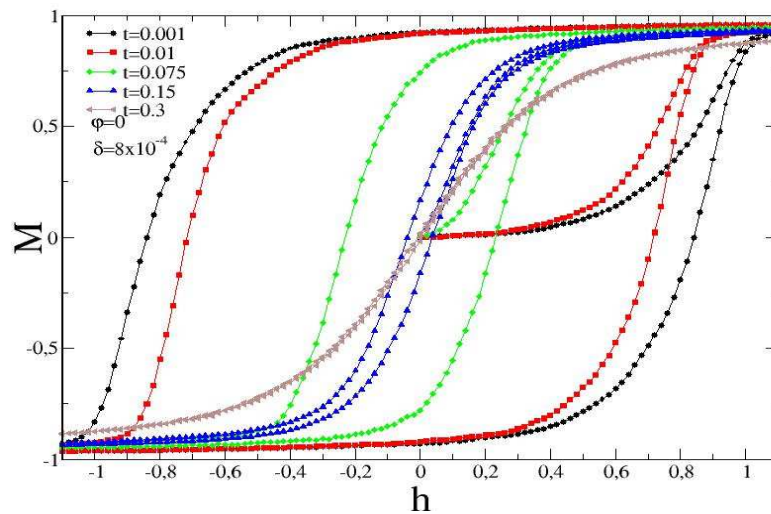
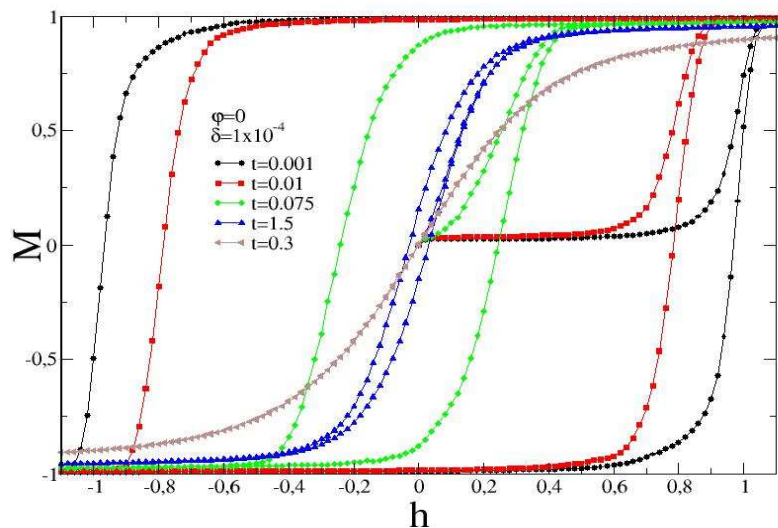
A $t=0.001$ se verifican las condiciones de S-W

$$h_c = h_0 \left(1 - \left(\frac{t}{t_B}\right)^\alpha\right)$$

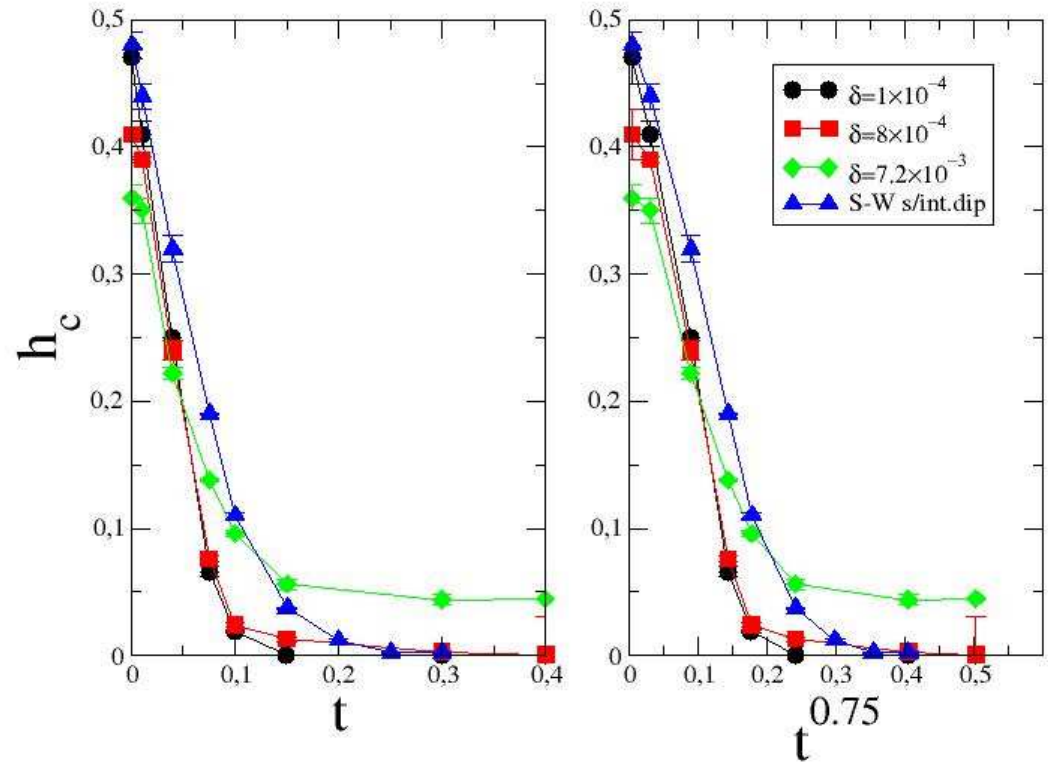
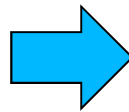
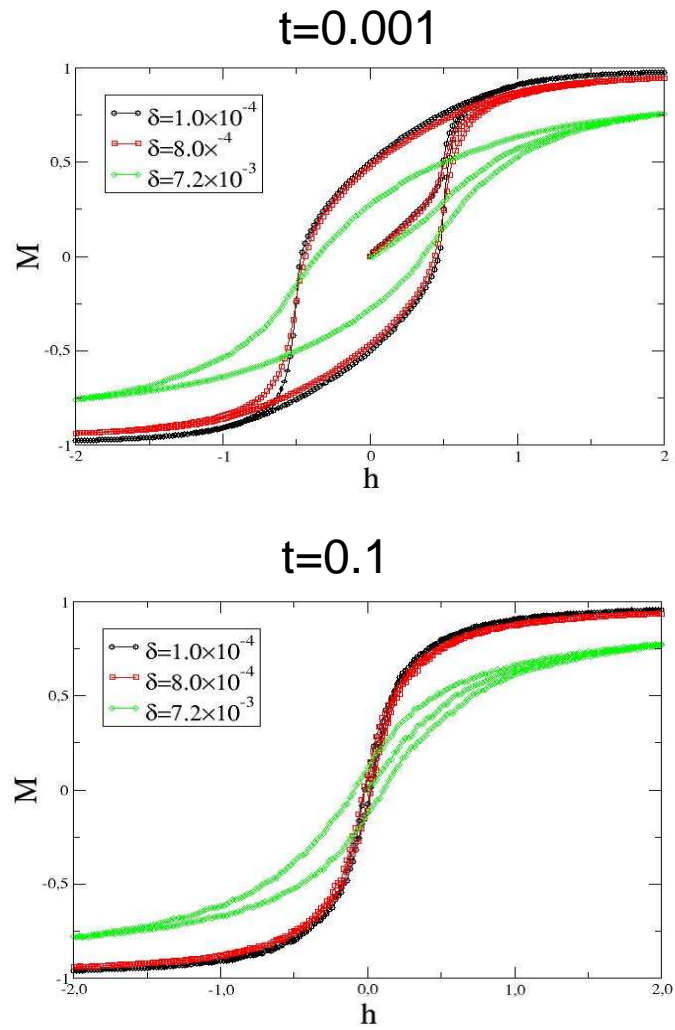
En este caso, $\alpha=0,75(1)$ también en buen acuerdo



c) S-W c/ ang. fijo e int. Dipolares: tres concentraciones



d) S-W + int. dip., ang. al azar



Conclusiones (por ahora):

a) Modelo S-W s/int. dip: hc decrece con t para todos los ángulos fijos t siguiendo la expresión $hc \approx (1 - (\frac{t}{t_B})^\alpha)$ con $\alpha=0,52(3)$ para $\phi=0$ y $\alpha=0,75(1)$ para ángulos aleatorios, en buen acuerdo con la teoría. La temp. de bloqueo t_B disminuye con ϕ hasta hacerse cero para $\phi=\pi/2$;

b) Modelo S-W c/int. dip: a densidades bajas ($\sim 10^{-4}$) los ciclos se parecen a los del mod. S-W, sobre todo a t bajas. La dependencia de hc con t también verifica esta similitud

Las interacciones dipolares se hacen relevantes a densidades mas altas. La ley de potencias de hc con t no se verifica en estos casos