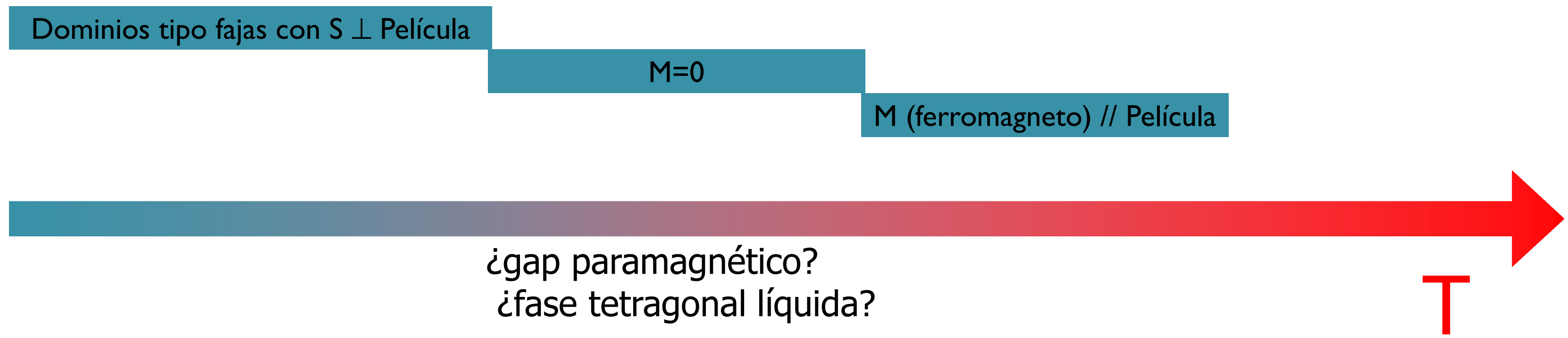
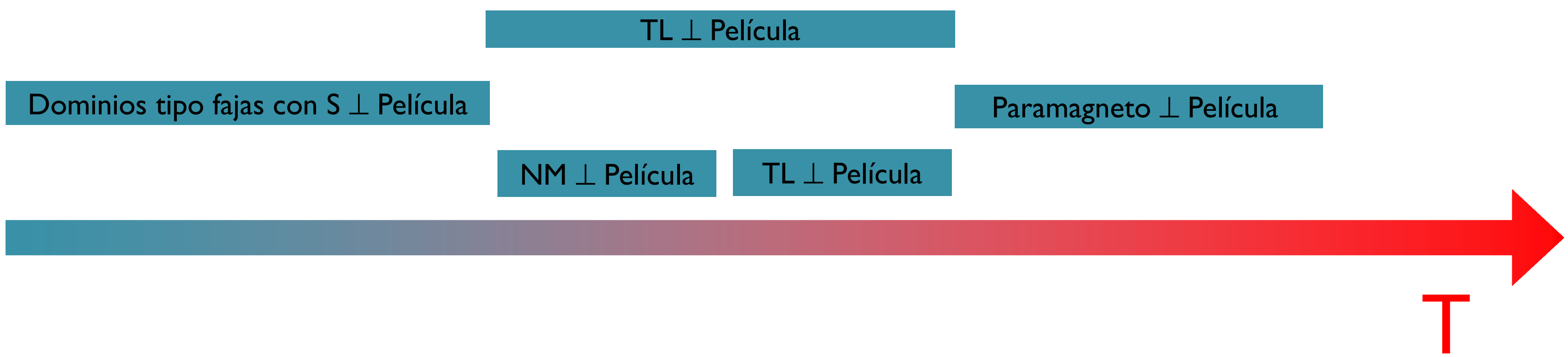
Modelado del comportamiento de películas delgadas con simulaciones Monte Carlo

Observaciones Experimentales

- Transición de reorientación



- Sin transición de reorientación:



Modelos

- Para sistemas que presentan transición de reorientación

$$H = -\delta \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S_i} \cdot \vec{S_j} + \sum_{(i,j)} \left[\frac{\vec{S_i} \cdot \vec{S_j}}{{r_{ij}}^3} - 3\, \frac{(\vec{S_i} \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S_j} \cdot \vec{r}_{ij})}{{r_{ij}}^3} \right] - \eta \sum_i (S_i^z)^2$$

Con z dirección perpendicular a la película, $\vec{S_i}$ vectores unitarios, $\delta =$ J$/g$ y $\eta = K/g$.

- Para sistemas que no presentan transición de reorientación:

modelo de Ising con interacciones dipolares

$$H = -\delta \sum\nolimits_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \sum\nolimits_{(i,j)} \frac{S_i S_j}{{r_{ij}}^3} \qquad S_i = \pm 1$$

Simulaciones Monte Carlo

- Experimento numérico: estudiamos el comportamiento de un modelo simplificado teniendo control de los parámetros microscópicos.
- Transiciones de fase (limite termodinámico): debemos aplicar escaleo de tamaño finito.
- Transiciones continuas: enfrentamos enlentecimiento el crítico y fuertes efectos de tamaño finito.
- Para calcular el valor medio de los observables debemos elegir un método que nos asegure las configuraciones que más contribuyen a la función de partición
- ¿Cómo? Con un muestreo pesado que asegure: una cadena de Marcov, balance detallado y la accesibilidad de los estados.

Algoritmo Metrópolis

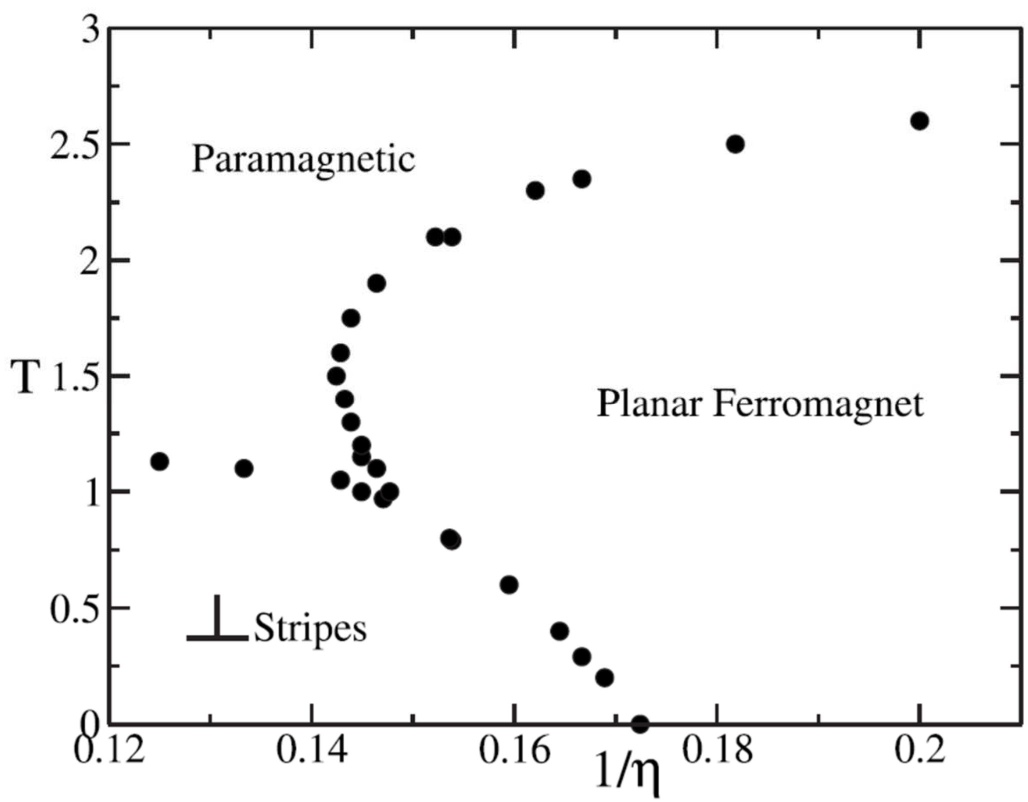
- Elegimos una configuración (normalmente conocida).
- Elegimos una nueva configuración aleatoriamente
- Calculamos la diferencia de energía entre las configuraciones.
- Si $\Delta E < 0$ acepto la nueva configuración.
- Si $\Delta E > 0$ calculo $e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$ y comparo con un número aleatorio, aceptando si este menor.
- Repetimos hasta completar una unidad de tiempo de simulación o PMC.

Cálculo de los observables:

- Se descartan t_e PMC para alcanzar una configuración de equilibrio.
- Se calculan los observables.
- Se descartan $t_c PMC$ para alcanzar una configuración no correlacionada con la anterior.
- Se calculan los observables y se obtiene el promedio.
- Se puede promediar en muestras.

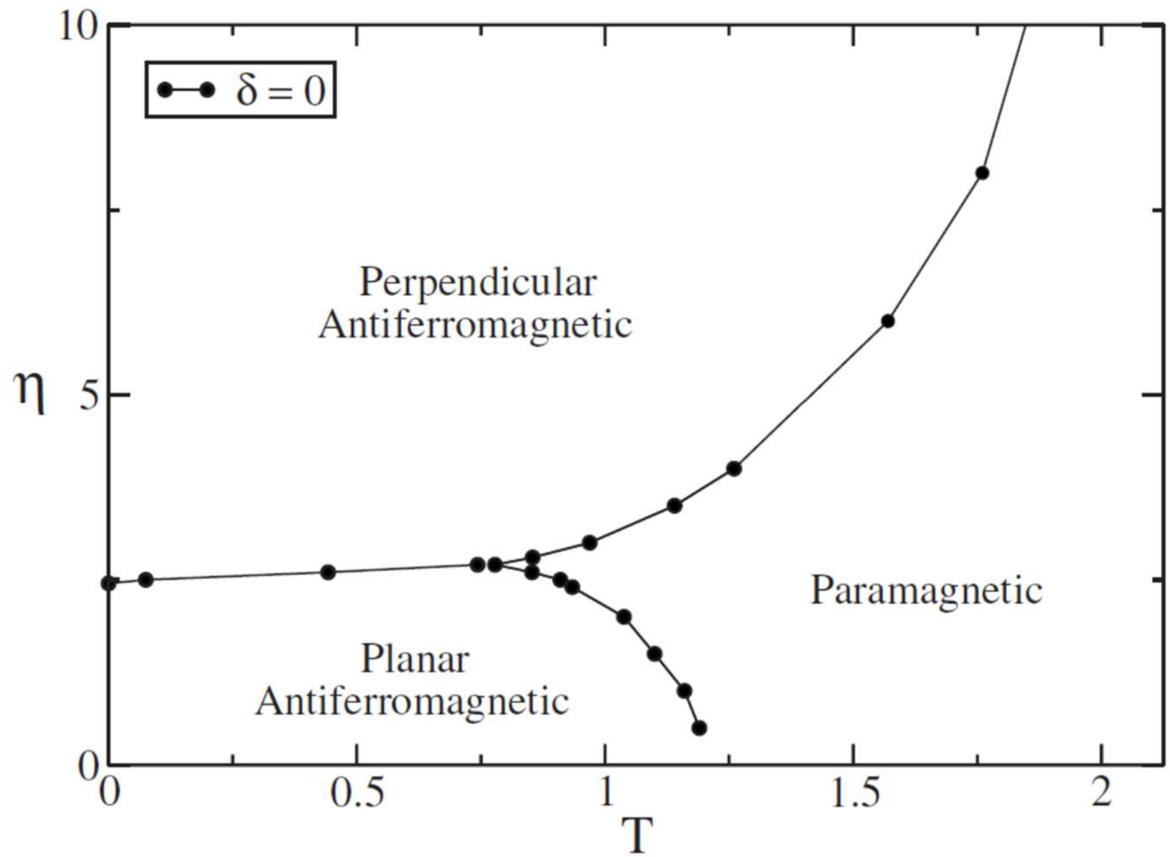
Algunos resultados SMC:

$$H = -\delta \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S_i} \cdot \vec{S_j} + \sum_{(i,j)} \left[\frac{\vec{S_i} \cdot \vec{S_j}}{{r_{ij}}^3} - 3 \frac{(\vec{S_i} \cdot \breve{r}_{ij})(\vec{S_j} \cdot \breve{r}_{ij})}{{r_{ij}}^3} \right] - \eta \sum_i (S_i^z)^2$$



Red cuadrada L=40, condiciones de contorno periódicas (sumas de Edwal) y $t_e \sim 10^6 PMC, t_c \sim 10^4 PMC$. M. Carubelli et al,. Phys. Rev. B, **77**, 134417 (2008).

$$H = \sum_{(i,j)} \left[\frac{\overrightarrow{S_i} \cdot \overrightarrow{S_j}}{{r_{ij}}^3} - 3\,\frac{(\overrightarrow{S_i} \cdot \widetilde{r_{ij}})(\overrightarrow{S_j} \cdot \widetilde{r_{ij}})}{{r_{ij}}^3} \right] - \eta \sum_i (S_i^z)^2$$

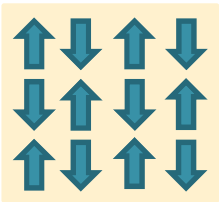
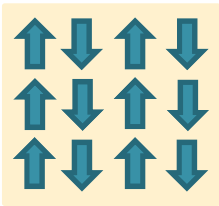
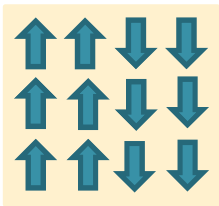


Red cuadrada L=40, condiciones de contorno periódicas (sumas de Edwal) y $t_e \sim 10^6 PMC, t_c \sim 10^4 PMC$. M. Carubelli et al,. Phys. Rev. B, **77**, 134417 (2008).

Modelo de Ising con interacciones dipolares

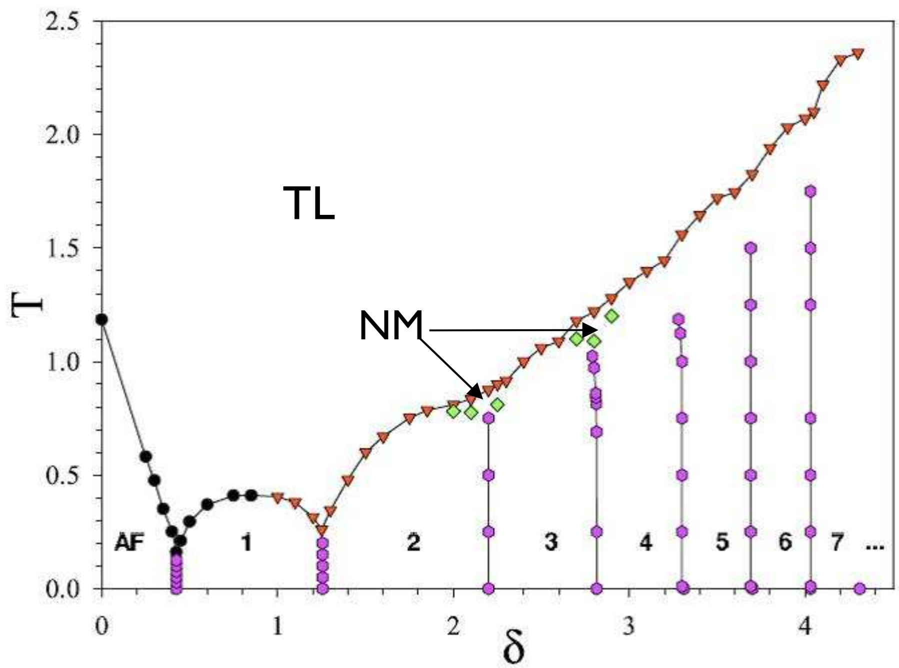
$$H = -\delta \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \sum_{(i,j)} \frac{S_i S_j}{{r_{ij}}^3}$$

- Películas magnéticas con fuerte anisotropía perpendicular al plano de la película que no presentan transición de reorientación.
- Red cuadrada:
  - Término dipolar produce frustración, rompiendo el orden ferromagnético y produciendo fases con magnetización nula.
  - Estado fundamental: AF para $\delta < 0.425$
  - $\delta > 0.425$ fajas de ancho h creciente con δ.

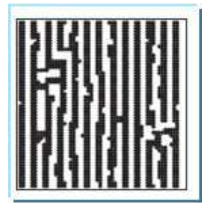




A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, M. C. Robinson, and K. De'Bell, Striped phases in two-dimensional dipolar ferromagnets, Phys. Rev. B **51**, 16033 (1995).

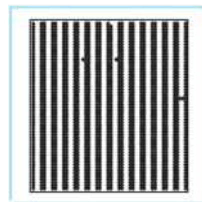
Diagrama de Fases (Monte Carlo)



Tetragonal Líquida (TL)



Nemática (NM)



Fajas ancho h (n=h)

- AF → h=1 → h=2 → …. →h=n →h=n+1: 1er. orden
- AF → TL: continuas
- TL → paramagnética: sin signos de transición.
- h = n → TL:
  - 0.4403<δ<0.85: continuas
  - 0.85<δ<1.2585 no hay acuerdo
  - δ mayores ¿1er. orden débil?
- h=n con n>1 → NM → TL ¿1er orden? ¿Kosterlitz Thouless?

-

S. A. Piguín and S. A. Cannas, Phys. Rev. B, 75, 224433 (2007) / E. Rastelli, S. Regina,and A. Tassi, Phys. Rev. B, 76, 054438 (2007).
S. A, Cannas, M. F. Michelon, D. A. Stariolo, and F. Tamarit, Phys. Rev. E, 78, 51602 (2008) / J. S. Fonseca, L. G. Rizzi and N. A. Alves, Phys. Rev. E, 86, 1103 (2012)

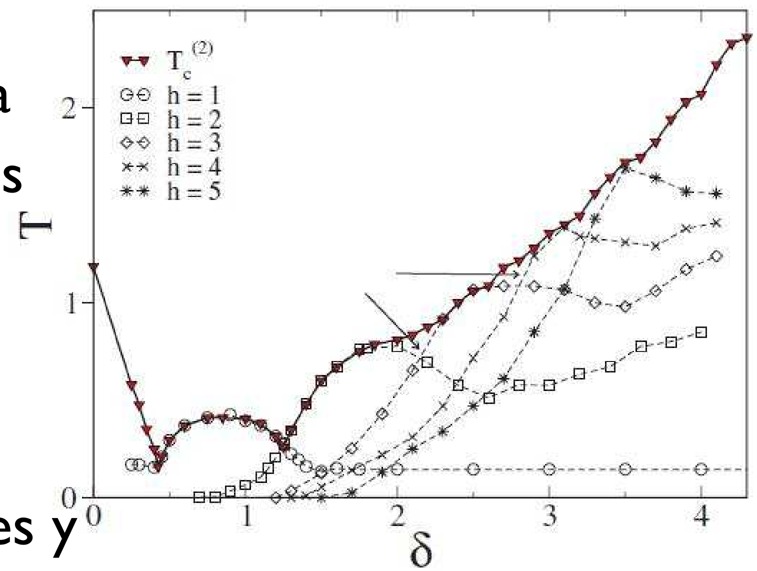
Origen en las discrepancias en el resultados MC

- Término dipolar
  - La sumatoria incrementa los tiempos de simulación, limitando el tamaño L del sistema.
  - Fuertes efectos de tamaño finito.

Dificulta escaleos de tamaño finito concluyentes.

- Múltiples estados metaestables a bajas temperaturas implica largos tiempos de equilibración.

- Dificultad para distinguir entre transiciones de 1er. orden débiles y continuas.



S. A. Piguín and S. A. Cannas, Phys. Rev. B, 75, 224433 (2007)

Simulaciones Monte Carlo

- Parámetro de orden orientacional

$$O_{hv} = \frac{n_v - n_h}{n_v + n_h} = \begin{cases} 1 & fase\ h = n \\ 0 & fase\ TL \end{cases}$$

n_h (n_v) = N° enlaces horizontales (verticales) entre primeros vecinos antiparalelos.

- Algoritmo Metrópolis
- Observables:

$$O_{hv}{}^2 = \langle \left(\frac{n_v - n_h}{n_v + n_h}\right)^2 \rangle$$

$$\chi = \frac{1}{N}\left(O_{hv}^2 - (O_{hv})^2\right)$$

$$U = 1 - \frac{O_{hv}^2}{(O_{hv})^2}$$

$$D = \left.\frac{\partial \log(O_{hv})}{\partial \tau}\right|_{\tau=0}$$

I. Booth, A. B. MacIsaac, J. P. Whitehead, and K. De'Bell, Phys. Rev. Lett. 75, 950 (1995).

Condiciones de Contorno Periódicas

Replicas del sistema en todas direcciones $\rightarrow$ agregado (L, m).

$$\sum_{i<j}\frac{\sigma_i\sigma_j}{r_{ij}^3}=\sum_{i\leq j}\sum_{R}A\left(r_i,R+r_j\right)\sigma(r_i)\sigma(r_j),\quad A\left(r_i,\,R+r_j\right)\ =\begin{cases}0 \ \ i=j\ y\ R=0\\ \left(r_i-R-r_j\right)^{-3}\ otros\end{cases}$$

$$H=\sum_{i<j}J_{ij}^{eff}\,\frac{\sigma(r_i)\sigma(r_j)}{r_{ij}^3},\quad J_{ij}^{eff}\ =\begin{cases}-\delta+\sum_{R}A\left(r_i,\,R+r_j\right)\ NN\\ \sum_{R}A\left(r_i,\,R+r_j\right)otros\end{cases}$$

Tiempo requerido para un paso de MC depende solo de L^2

C. M. Horowitz, M. A. Bab, M. Mazzini, M. L. Rubio Puzzo and G. P. Saracco, Phys. Rev. E., 92, 042127 (2015)

Dinámica de Tiempos Cortos

- Estado fundamental (OC)$\rightarrow T_c \leftarrow$ T=∞ fase paramagnética (DC)

$$O_{hv}(t) \propto t^{-\beta/\upsilon z} \qquad\qquad O_{hv}{}^2(t) = \chi(t) \propto t^{\gamma/\upsilon z}$$

$$\chi(t) \propto t^{\gamma/\upsilon z}$$

$$U(t) \propto t^{d/z}$$

$$D(t) \propto t^{1/\upsilon z}$$

  - Libre del enlentecimiento crítico.
  - Valida (teórica y numéricamente) sistemas con interacciones de largo alcance.
  - Distingue entre transiciones 1er. orden débiles y continuas.

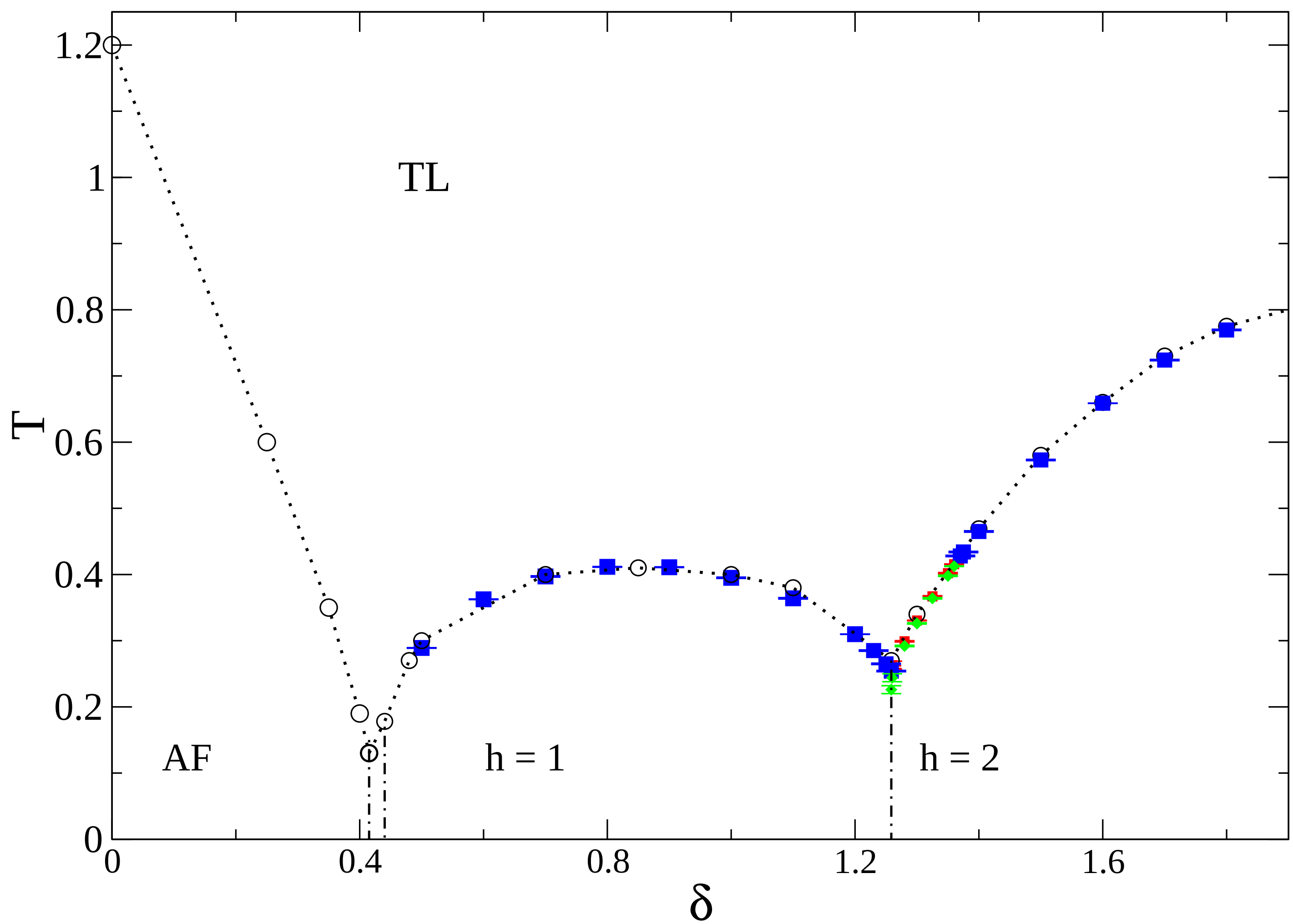
Estado fundamental $\rightarrow T_1 \neq T_2 \leftarrow$ T=∞ fase paramagnética

$$O_{hv}(t) \propto t^{-\omega} + O_{hv}^{sp} \qquad\qquad O_{hv}{}^2(t) = \chi(t) \propto t^{\omega'}$$

$$\chi(t) \propto t^{\Omega}$$

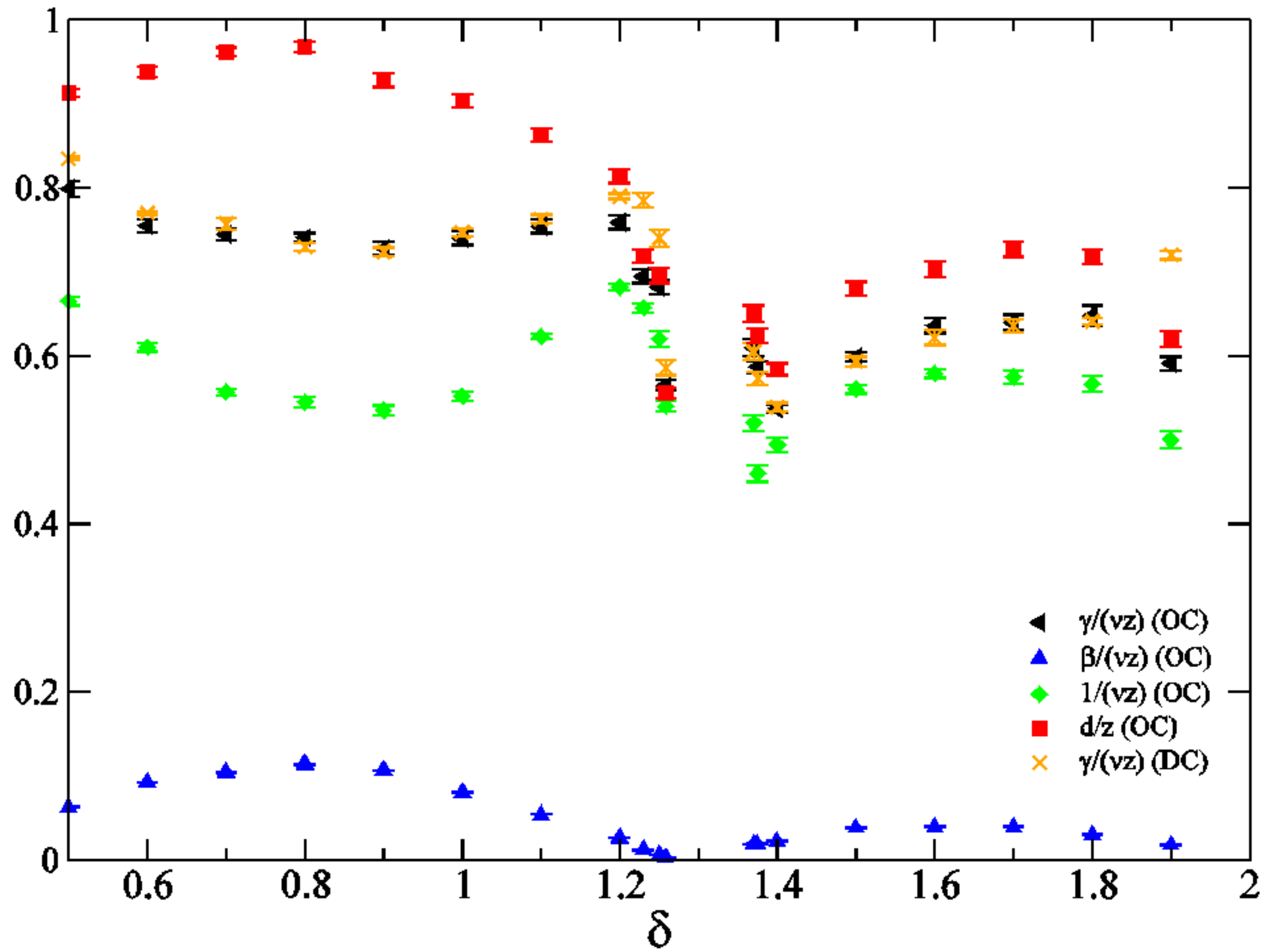
E. V. Albano, M. A. Bab, G. Baglietto, R. A. Borzi, T. S. Grigera, E. S. Loscar, D. E. Rodriguez, M. L. Rubio Puzzo and G. P. Saracco, Rep. Prog. Phys., 74, 026501 (2011)

0.5≤δ≤1.25 y 1.37≤δ<1.9



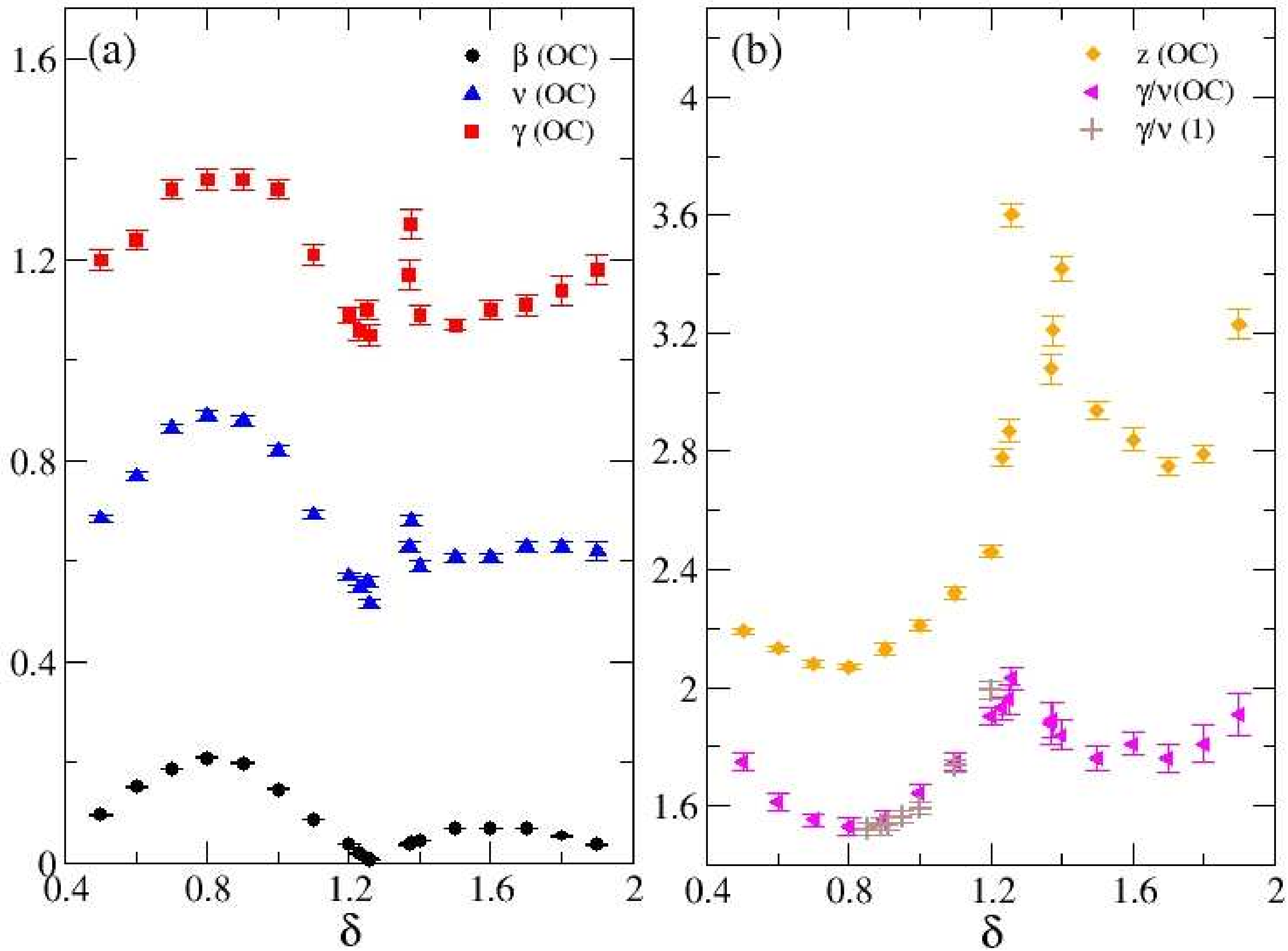
C. M. Horowitz, M. A. Bab, M. Mazzini, M. L. Rubio Puzzo and G. P. Saracco, Phys. Rev. E., 92, 042127 (2015)

Exponentes Dinámica Crítica



M. A. Bab, C. M. Horowitz, M. L. Rubio Puzzo and G. P. Saracco, Phys. Rev. E, 94, 042104 (2016).

Exponentes Críticos

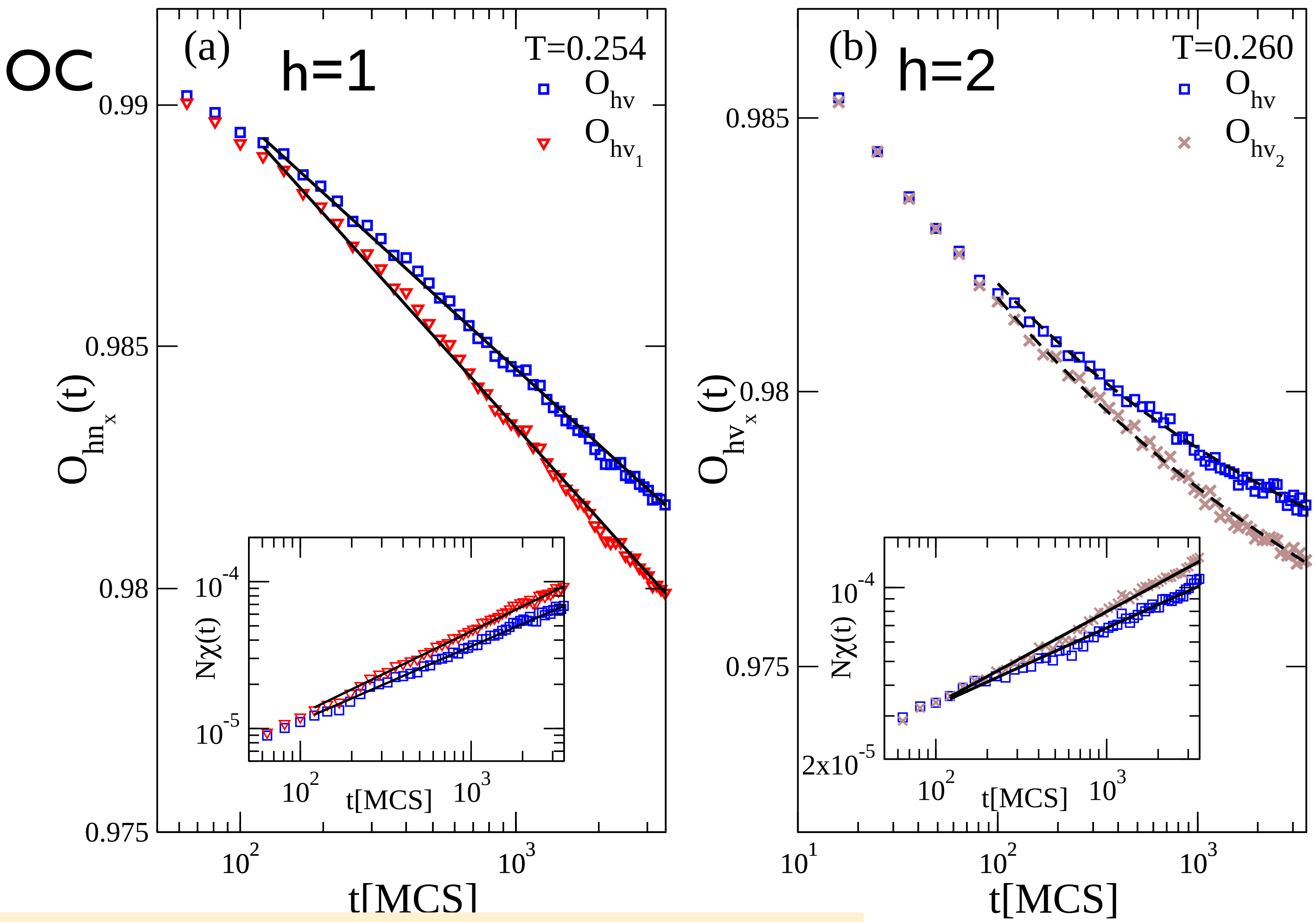


M. A. Bab, C. M. Horowitz, M. L. Rubio Puzzo and G. P. Saracco, Phys. Rev. E, 94, 042104 (2016).

δ=1.2585 (configuraciones ordenadas)

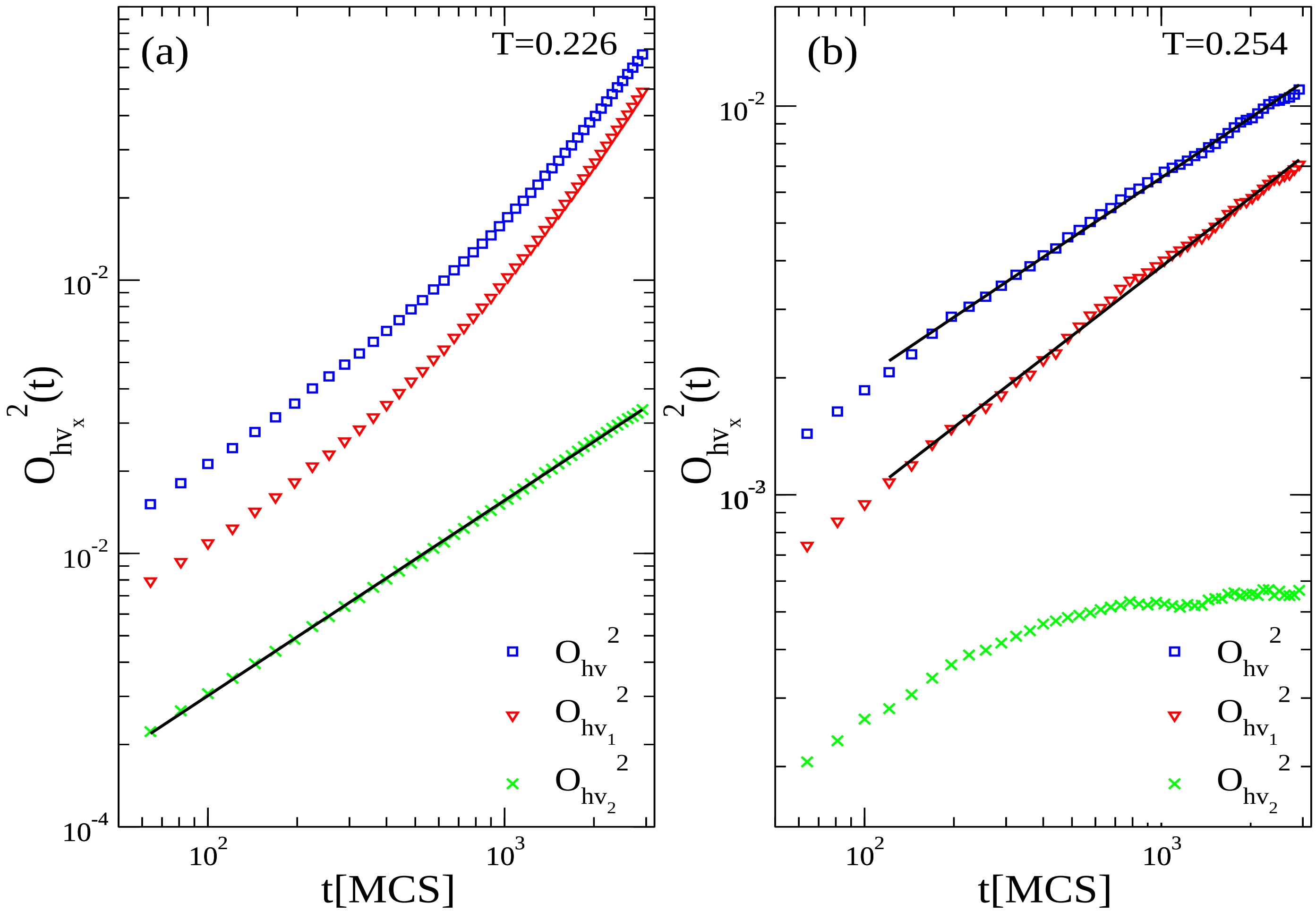
$$O_{hv_1} = \frac{n_{1v} - n_{1h}}{n_v + n_h} \quad \begin{cases} 1 & h = 1 \\ 0 & otras \end{cases}$$

$$O_{hv_2} = \frac{n_{2v} - n_{2h}}{2(n_v + n_h)} \quad \begin{cases} 1 & h = 2 \\ 0 & otras \end{cases}$$



M. A. Bab, C. M. Horowitz, M. L. Rubio Puzzo and G. P. Saracco, Phys. Rev. E, 94, 042104 (2016).

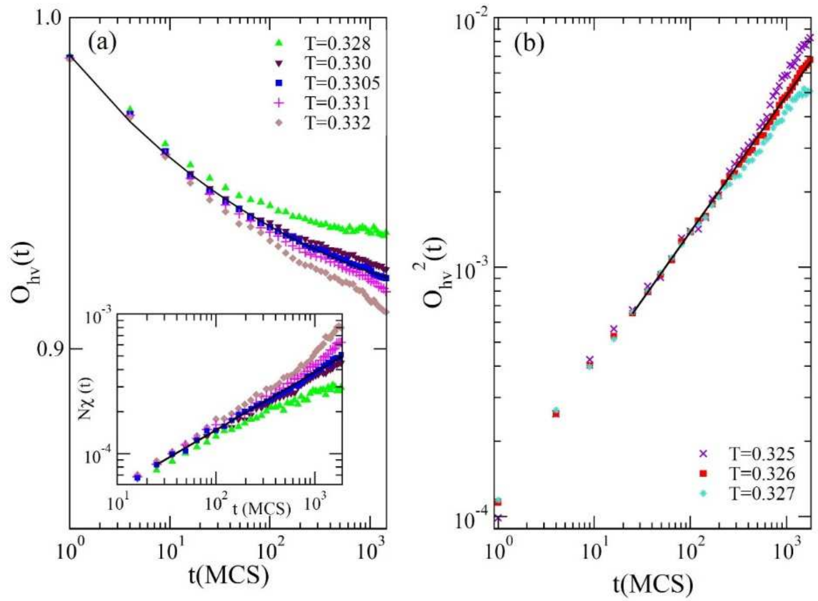
δ=1.2585 (configuración desordenada)

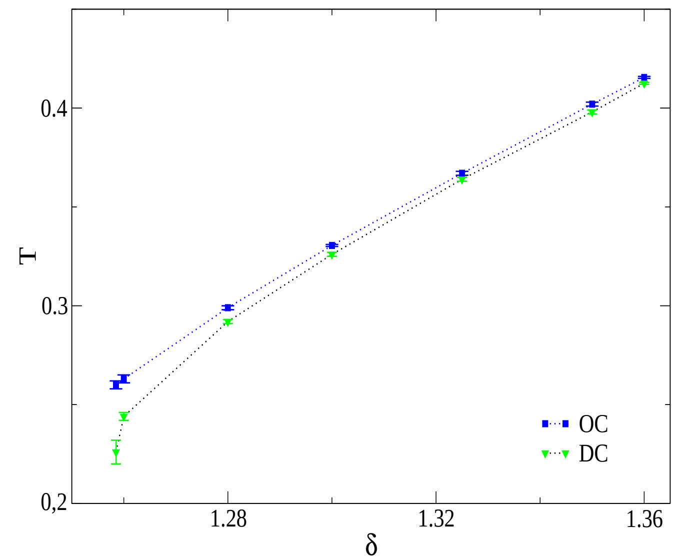


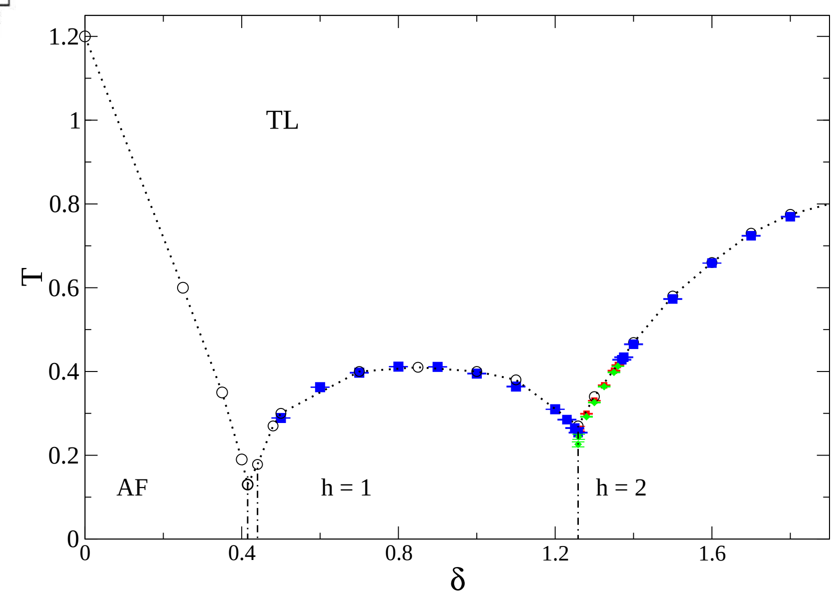
- h=1↔TL continua
- h=2↔TL 1er. Orden Existe un punto multicrítico.

M. A. Bab, C. M. Horowitz, M. L. Rubio Puzzo and G. P. Saracco, Phys. Rev. E, 94, 042104 (2016).

$1.26 \leq \delta \leq 1.36$



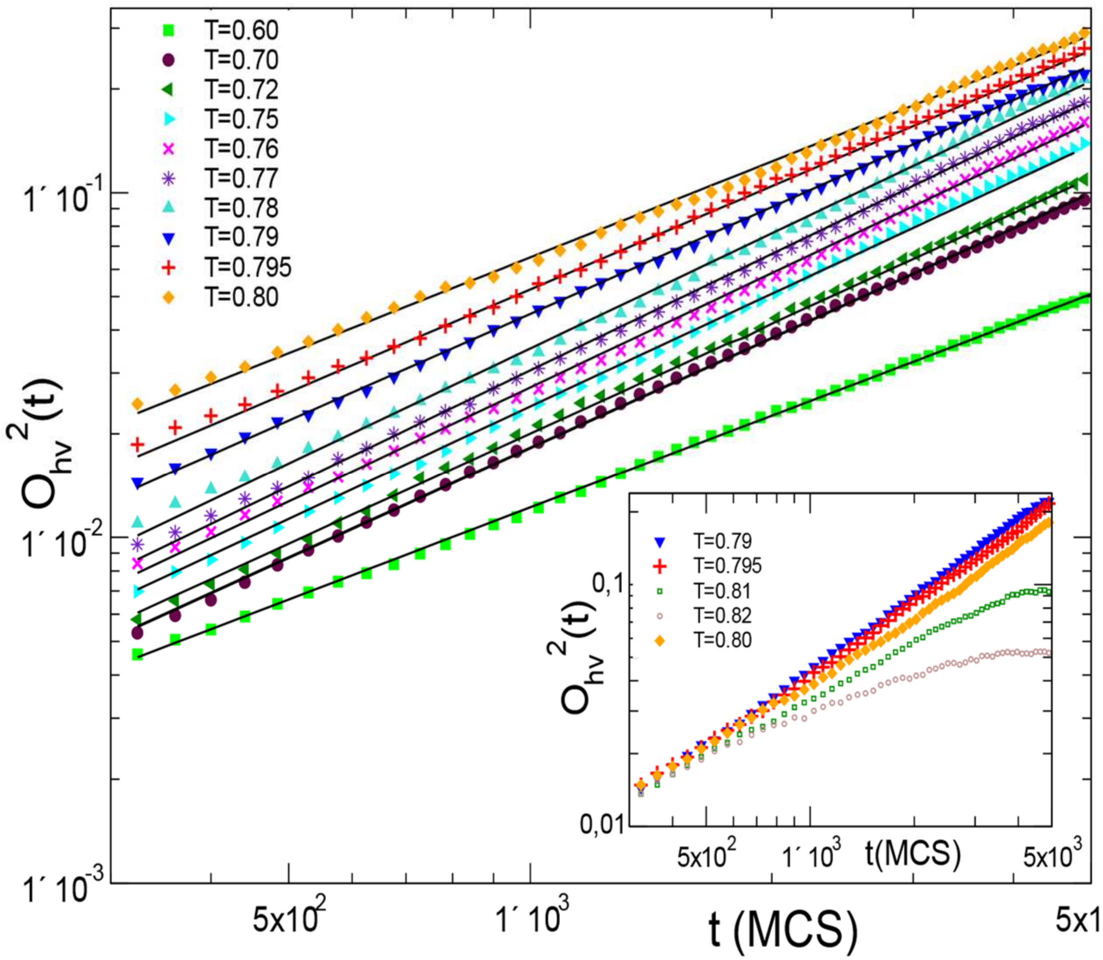




- Transición de 1er. Orden débil.
- Punto tricrítico $\delta \in [1.36, 1.37]$

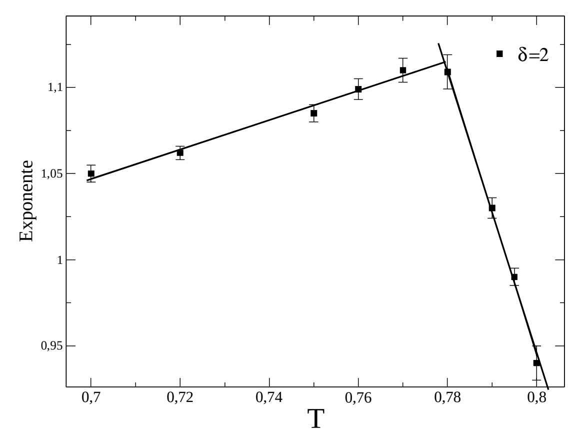
M. A. Bab, C. M. Horowitz, M. L. Rubio Puzzo and G. P. Saracco, Phys. Rev. E, 94, 042104 (2016).

El segundo escenario: h-NM-TL



Configuración inicial desordenada.

$\delta = 2$



Configuración
inicial ordenada.
$\delta = 2$

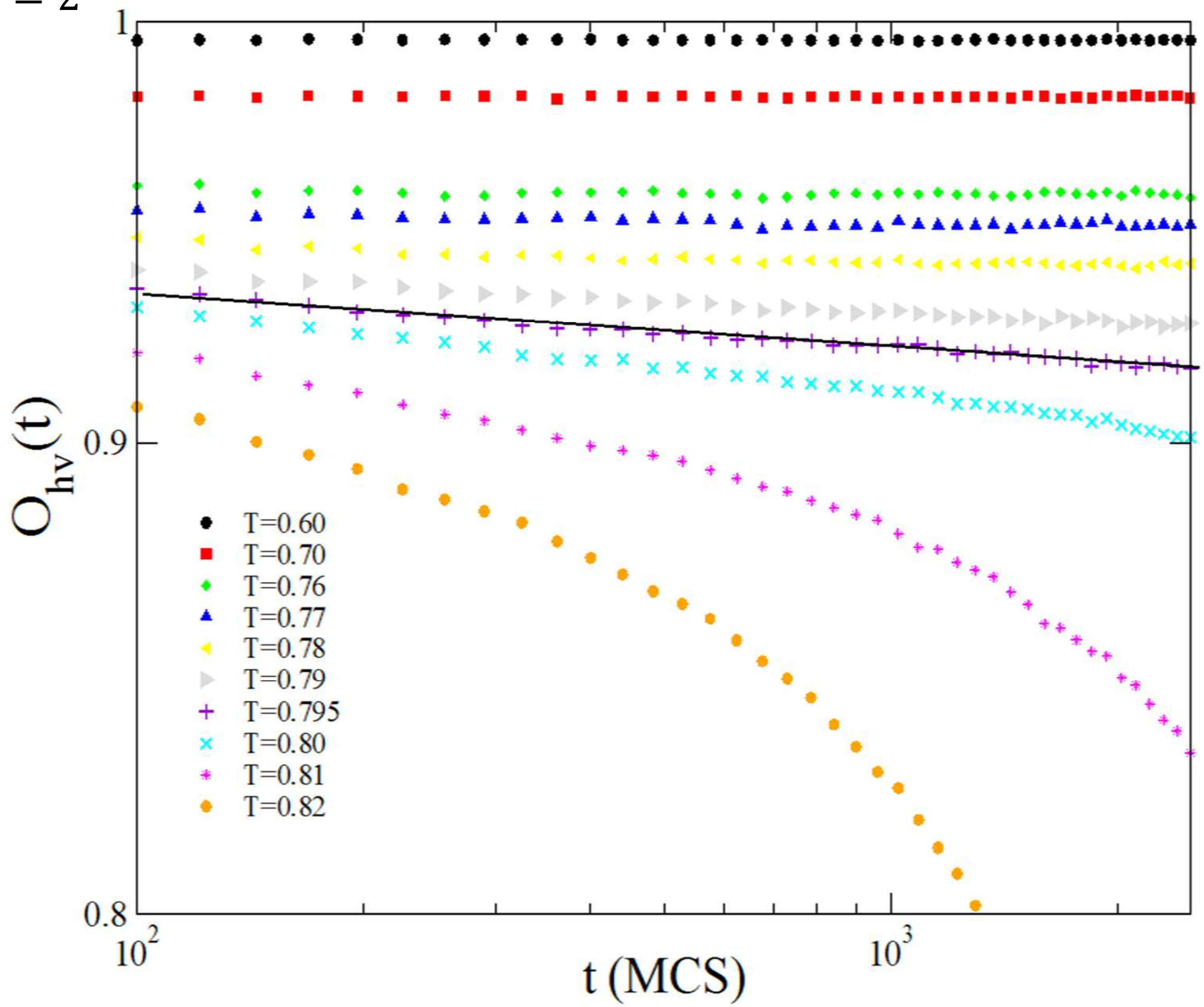


Diagrama de fases: las cruces indican nuestros resultados para las transiciones h-NM y NM-TL.

Los comportamientos antes mostrados corresponden a transiciones tipo Kosterlitz Thouless.