

## **MODELO DE ISING EN 3-D. APLICACIÓN A SENSORES MAGNÉTICOS**

<sup>1</sup>Puerto Ramírez; <sup>2</sup>Carlos Morón; <sup>2</sup>Alfonso Garcia

<sup>1</sup> *Departamento de Sistemas Inteligentes Aplicados. Escuela Universitaria de Informática. U.P.M.*

<sup>2</sup> *Departamento de Tecnología de la Edificación, E.U. Arquitectura Técnica de Madrid. U.P.M.*

**Palabras Clave:** *Modelo de Ising, ferromagnetismo, anisotropía, sensores.*

### **Resumen**

*El modelo de Ising es un problema de física estadística que tiene solución exacta en dos dimensiones, para el caso de tres dimensiones es preciso utilizar procedimientos de simulación. En este trabajo se ha utilizado un método de Monte Carlo para estudiar el comportamiento del sistema en distintas situaciones, siendo de especial interés el estudio del paso por la transición de fase a la temperatura crítica (Temperatura de Curie,  $T_c$ ). Se ha estudiado la cinética de los dominios magnéticos, considerando la estructura de los dominios desde el punto de vista de la energía, y en consecuencia, hemos tenido en cuenta la energía de canje que tiende a mantener alineados los espines de los electrones en los materiales ferromagnéticos. Este término contribuye a hacer mayor el espesor de la pared, por la tendencia a que los espines de los átomos vecinos se mantengan alineados. Se ha considerado el ferromagnetismo desde el punto de vista cuántico y basado en las propiedades de simetría de las funciones de onda de los electrones, que se manifiestan en variaciones de la energía electrostática de un sistema en función de la orientación de sus espines. Se han estudiado los efectos de histéresis que resultan al aplicar un campo magnético externo a la red y la orientación de los espines de la misma a lo largo de su evolución.*

*Para la determinación de las propiedades de los materiales ferromagnéticos se utiliza el ciclo de histéresis aunque algunas de las propiedades magnéticas, como la dirección de anisotropía, no pueden ser deducidas directamente de esta manera. Se utilizan distintos métodos para la determinación de la anisotropía de las muestras. El acoplamiento entre la magnetización en zonas próximas a la superficie y la magnetización en zonas internas de la muestra puede ser utilizado para obtener un ciclo de histéresis, que permita obtener sensores magnéticos adaptados a las medidas que se quieran realizar. Mediante el control del campo coercitivo y la susceptibilidad se abre una línea de investigación para el desarrollo de sensores magnéticos.*

### **Introducción**

La existencia de dominios en los materiales ferromagnéticos es introducida por Weiss, considerando la existencia de un campo que tiende a alinear paralelamente a dicho campo los momentos magnéticos del material. Este campo es conocido como “campo molecular”.

Es debido a Heisenberg el concepto de las “fuerzas de intercambio”, o “fuerzas de canje”. Las fronteras de los dominios son zonas donde el gradiente del campo magnético es máximo y la frontera entre dos dominios no es un salto

brusco, sino que la dirección de los espines al pasar de un dominio a otro varía de forma gradual dentro de la pared magnética.

Si consideramos la estructura de los dominios desde el punto de vista de la energía, deberemos tener en cuenta en primer lugar la energía de canje que tiende a mantener alineados los espines de los electrones en los materiales ferromagnéticos. Este término, de origen cuántico contribuye a hacer mayor el espesor de la pared, por la tendencia a que los espines de los átomos vecinos se mantengan alineados. Siendo el origen del campo molecular debido a estas fuerzas.

El número de casos para los que se puede obtener una expresión analítica de la estructura de la pared es bastante reducido. Además, para obtener una expresión analítica exacta será necesario realizar diversas aproximaciones. Uno de los casos que se puede resolver analíticamente, por su simplicidad, lo constituye una pared de Bloch en un material de un espesor suficientemente grande. En esta situación podemos realizar la aproximación de omitir el término de la energía magnetostática, ya que su valor es significativamente inferior al de la energía de anisotropía y de canje.

### ***El modelo de Ising***

El objetivo es poder encontrar el valor del momento magnético del sistema cuando se conoce el campo magnético aplicado, que puede ser cero o distinto de cero, y la temperatura. Los modelos analíticos, en general se utilizan para resolver el caso unidimensional. La complejidad de las ecuaciones que se derivan requiere la utilización de aproximaciones que hacen que el planteamiento analítico del problema bidimensional sea extremadamente complejo, considerando como estructuras bidimensionales a aquellas en las que la imanación es constante en una dirección. El modelo de Ising es un problema de física estadística que tiene solución exacta en una y dos dimensiones, y para una red cuadrada infinita permite un tratamiento estadístico exacto. Siendo el único ejemplo no trivial de transición de fase que se puede desarrollar con rigor matemático. El modelo de Ising [1] simula la estructura de una sustancia ferromagnética, en concreto simula un dominio de la misma.

Para el caso de tres dimensiones hemos considerado una matriz cúbica en la que los espines de número cuántico  $S$  ( $S=1/2$ ) se sitúan en las casillas de la misma. Los espines que se encuentran en casillas adyacentes  $(i,j)$  se encuentran acoplados por una interacción de intercambio expresada por:

–  $J S_i S_j$ , que tiende a alinear los espines de forma paralela si  $J>0$  o antiparalela si  $J<0$ .

Este modelo es una aproximación en la que el estudio del hamiltoniano se restringe a la consideración de sus elementos diagonales, esto equivale a considerar únicamente la proyección a lo largo del eje Z de los espines. En esta aproximación el hamiltoniano total del sistema [2,3] viene dado por el término de canje más la energía del campo externo:

$$\mathcal{H} = -2J \sum_i S_i^z S_{i+1}^z - \beta B_e \sum_i S_i^z$$

donde  $\beta$  relaciona el momento magnético  $m$  de cada ión con el espín,  $m = \beta S$ . Por medio de los procedimientos de simulación se ha estudiado el comportamiento del sistema en diversas situaciones. Siendo de especial interés el estudio del paso por la transición de fase a la temperatura crítica. Se han estudiado los efectos de histéresis que resultan al aplicar un campo magnético externo a la red y la orientación de los espines de la misma a lo largo de su evolución.

### **Métodos numéricos**

El desarrollo de métodos numéricos aplicables a la resolución de este tipo de problemas ha cobrado gran interés en los últimos años. El cálculo de estructuras magnéticas estáticas por métodos numéricos consiste en la búsqueda de una configuración de imanación en equilibrio a través de la minimización de su energía. Este tipo de cálculos se basan en aproximar el continuo de imanación por un conjunto discreto de celdas en cuyo interior la imanación tiene una determinada orientación. Salvo para casos en los que la temperatura sea próxima a la temperatura de Curie, un material ferromagnético se caracteriza por poseer un vector imanación constante en módulo, con independencia de la posición en el material o del campo aplicado. Por ello los cambios de una celda a otra en el vector imanación pueden considerarse tan sólo como cambios de orientación. Este tipo de cálculos es tanto más preciso cuanto más se aproxime el número de celdas al número de átomos magnéticos del material.

En este trabajo, siguiendo esta línea mencionada se ha utilizado un método de Monte Carlo [4] para analizar el crecimiento y evolución de los dominios magnéticos.

Se ha utilizado un algoritmo numérico que utiliza números aleatorios. Este tipo de algoritmos son deterministas, y se utilizan para obtener valores que en principio se suponen difíciles de predecir. Utilizaremos la aplicación del método a un problema de fenómenos críticos. Para el cálculo de la función de partición se ha considerado un conjunto de configuraciones de modo que la probabilidad es la misma para todas ellas. En particular para el modelo de Ising se considera que la probabilidad de que los espines se encuentren en una dirección o en la dirección opuesta es la misma.

El modelo de Ising es un sistema que tiene su ordenación a bajas temperaturas. Por tanto antes de seleccionar el algoritmo a utilizar habrá que tener en consideración esta característica, si consideramos que a temperaturas bajas la mayor parte de las configuraciones presentan una probabilidad próxima a cero, a excepción del estado fundamental y los primeros estados excitados.

Para la mayor parte de los métodos de muestreo, a altas temperaturas todas las configuraciones tienen una probabilidad bastante similar. En consecuencia es importante seleccionar qué estados se incluyen en los cálculos.

### **Dinámica de Glauber**

La dinámica de Glauber permite describir los procesos físicos en los que estamos interesados. Esta dinámica es suficiente para describir la dinámica de los espines. Hemos realizado la aproximación de considerar que el orden en la sub-red y el parámetro de orden magnetización-ocupación de la sub-red es una variable no conservable.

En este trabajo se ha implementado el algoritmo de Glauber como extensión a las simulaciones previas [5] del estudio de la magnetización y efecto de la temperatura.

En el algoritmo o dinámica de Glauber, para cada configuración dada, los N espines de la red tienen la misma probabilidad. De este modo se escoge una casilla aleatoriamente y se calcula el incremento de energía  $\Delta E$  necesario para cambiar el espín en esa casilla. A continuación se estima la probabilidad de transición mediante la expresión:

$$W = \begin{cases} \frac{1}{\tau} e^{-\frac{\Delta E}{kT}}, & \Delta E > 0 \\ \frac{1}{\tau}, & \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad (1)$$

donde  $k$  es la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura. La constante  $\tau$  simboliza la escala de tiempo para el estudio de Monte Carlo y es proporcional a  $\exp(-Q' / kT)$ , donde  $Q'$  es la energía de activación relacionada con el acoplamiento térmico.

El algoritmo de Glauber tiene una aplicación específica para modelos tipo Ising y no para cualquier hamiltoniano. En nuestro estudio hemos considerado el modelo de Ising, con la interacción a primeros vecinos, el hamiltoniano en ausencia de campo en una red de N espines lo podemos expresar como:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad S_i = \pm 1$$

En el algoritmo de Glauber el estado del espín  $S_i$  se obtiene al azar de manera independiente del estado del espín en el instante anterior. Por otra parte, en el caso en que  $\Delta E < 0$ , la probabilidad de transición utilizando este algoritmo no es necesariamente 1. Estas características permiten una interpretación física del algoritmo como un proceso dinámico. En consecuencia al modelo de Ising dotado de esta dinámica se lo suele denominar modelo de Ising cinético.

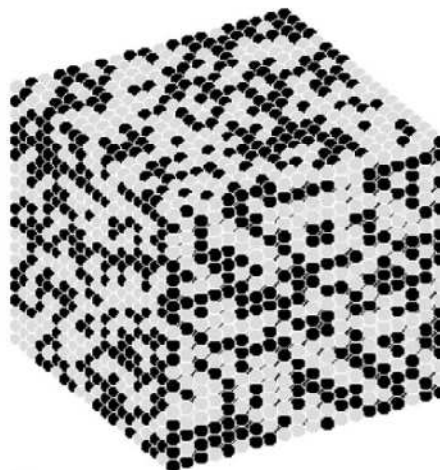
Este algoritmo fue propuesto en un principio como un modelo físico de la transición al equilibrio del modelo de Ising. El algoritmo simula una dinámica estocástica de los espines, que físicamente puede ser interpretada en términos de acoplamientos muy débiles de los mismos a un baño térmico ( $Q'$ ). Este induce transiciones aleatorias entre los espines, las cuales dependen de la temperatura y del campo local instantáneo. Podemos estimar el tiempo medio entre dos saltos sucesivos de un espín de varios ordenes de magnitud mayor que las escalas temporales de las vibraciones en un sólido.

## Resultados

En la *Fig. 1* se muestra la configuración inicial de una red tridimensional cúbica de  $20 \times 20 \times 20$ . Se han representado en la misma los espines con valor de  $\frac{1}{2}$  y  $-\frac{1}{2}$ , a una temperatura de 0 K y en ausencia de campo magnético.

La *Fig. 2* (a) (b) (c) y (d) representa los ciclos de histéresis en esta red. La constante de intercambio en todos los casos es  $J/k_B=17$ . Cada uno de los gráficos corresponde a una temperatura diferente, comprendidas entre 5K y 20K.

Los cuatro gráficos de la *Fig. 2* muestran el ciclo de histéresis en presencia de un campo magnético externo, de las mismas se deduce que para una temperatura de transición de 20 K, característica de los aislantes magnéticos, se tiende al alineamiento magnético.



*Fig. 1: Configuración inicial en 3D*

## Conclusiones

Se ha utilizado un método de Monte Carlo para realizar la simulación del comportamiento del sistema en diversas situaciones, y se ha puesto de manifiesto la capacidad de este método para situaciones diferentes a la establecida, siendo de especial interés el estudio del paso por la transición de fase a la temperatura crítica ( $T_c$ ).

Se han estudiado los efectos de histéresis que resultan al aplicar un campo magnético externo a la red y la orientación de los espines de la misma a lo largo de su evolución.

Se ha utilizado el algoritmo de Glauber para realizar una interpretación dinámica de la cinética de los dominios, simulando una dinámica estocástica de los espines que puede ser interpretada físicamente en términos de acoplamiento muy débiles de los mismos a un baño térmico.

En presencia de un campo magnético externo  $B$  al aumentar el valor del mismo se alcanza un valor crítico  $B_c$  para el cual el sentido de alineamiento cambia bruscamente. Este comportamiento se refleja en las curvas de histéresis (*fig.2*).

Por otra parte en un material ferromagnético la energía de anisotropía hace que la imanación se oriente preferentemente a lo largo de ciertos ejes definidos. Esta energía no proviene de la interacción de canje isotrópica considerada hasta ahora si no que es debida a interacciones electrostáticas asociadas a distribuciones electrónicas.

El acoplamiento entre la magnetización en zonas próximas a la superficie y la magnetización en zonas internas de la muestra puede ser utilizada para obtener un ciclo de histéresis, que permita obtener sensores magnéticos adaptados a las medidas que se quieran realizar. Estos resultados permiten la posibilidad de continuar en la línea de investigación del control de la anisotropía magnética.

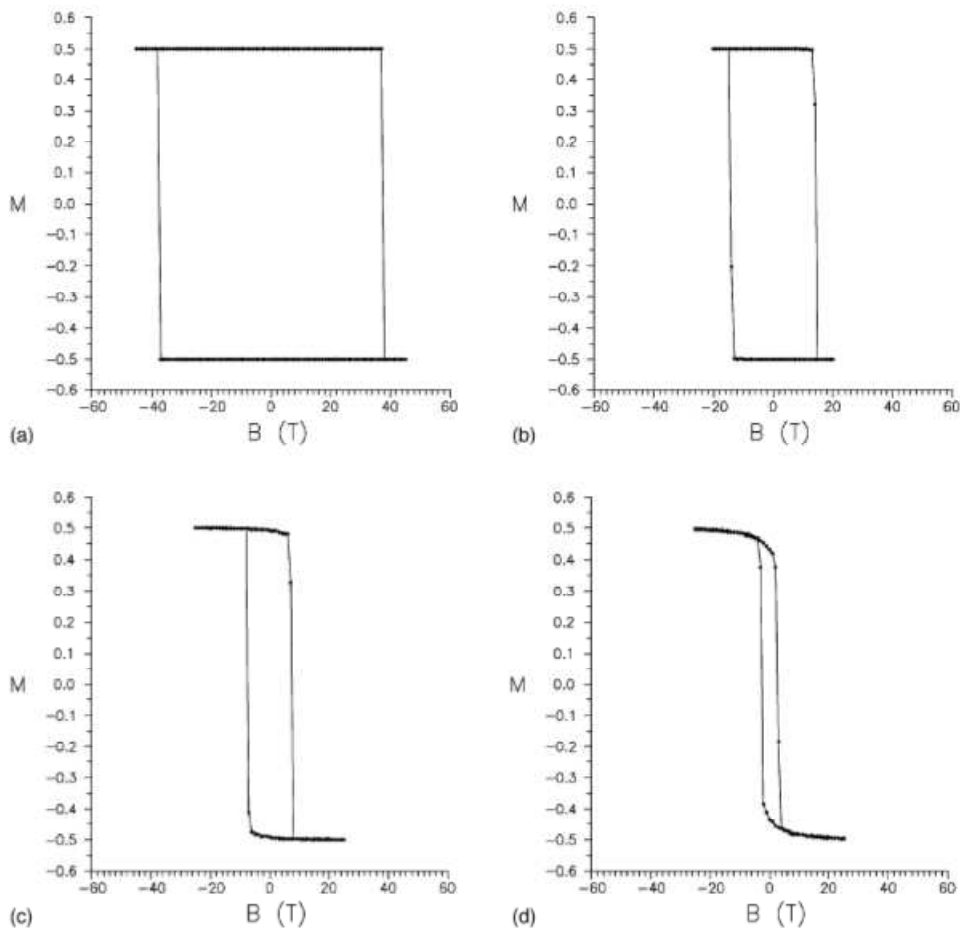


Fig. 2

## REFERENCIAS

- [1] Ernst Ising, Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, Zeitschrift für Physik 31 (1925), 253, [http://www.fh-augsburg.de/harsch/anglica/Chronology/20thC/Ising/isi\\_fm00.html](http://www.fh-augsburg.de/harsch/anglica/Chronology/20thC/Ising/isi_fm00.html)
- [2] A. Hernando. J. Rojo. "Física de los materiales magnéticos". (2001). Pag. 83
- [3] T. Hai, Z.Y. Li, J. Magn. Magn. Mater. 80 (1989) 173.
- [4] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, A. H. Teller, M. N. Rosenbluth, and E. Teller, Equation of state calculations by fast computing machines., Journal of Chemical Physics 21 (1953), 1087.
- [5] C. Morón, M. Mora. Journal of Materials Processing Technology 143–144 (2003) 118–121