Utilización de LAMMPS para el estudio de materiales magnéticos

J. A. Murillo Polo[1-3] *, J. Mejía-López [2] *, E. A. Velásquez Sierra [3], *

[1]Grupo de Geofísica y Ciencias de la Computación-GGC3 , Facultad de Ciencias Básicas, Instituto Tecnológico Metropolitano, Medellín Colombia.; [2]Centro de Investigación en Nanotecnología y Materiales Avanzados CIEN-UC, Facultad de Física, Pontificia Universidad Católica de Chile. CEDENNA, Santiago, Chile.; [3]Grupo de Materiales Nanoestructurados y Biomodelación, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Medellín, Medellín Colombia.

Correspondence to: jhonatanmurillo@itm.edu.co, jmejia@fis.uc.cl,evelasquez@udem.edu.co

Actualmente el estudio de materiales magnéticos es un área de gran interés gracias a los avances en la espintrónica, grabación en medio magnéticos y biomedicina. En este aspecto es notable la contribución de métodos computacionales y su aporte en el entendimiento de resultados experimentales. En el desarrollo de simulaciones atomísticas de fenómenos magnéticos se enfocan principalmente en el estudio de la dinámica de espines, pero no se considera la contribución de la dinámica entre los átomos, que es importante a la hora de estudiar propiedades magneto-mecánicas y magneto-elásticas de los materiales.

Existen varios trabajos que han mostrado propuestas para la integración de la dinámica de espines (SD) y la dinámica molecular (MD). Un primer acercamiento para acoplar ambas dinámicas fue propuesto por Ma y colaboradores [**?**], los cuales realizaron cálculos usando MD y utilizando un potencial que simula las variaciones en las magnitudes de los espines (pero no la dirección) para estudiar las propiedades magneto-elásticas de Fe bajo presión. Recientemente, se ha implementado SD en el código LAMMPS [**?**] con lo cual se logra combinar adecuadamente MD y SD.

En este trabajo presentamos el estudio de propiedades magnéticas utilizando dinámica molecular como implementada en LAMMPS [**?**]. Para cálculos iniciales de verificación se toma como material de prueba el -Fe. La interacción de intercambio para distancias más allá de primeros vecinos fue parametrizada usando cálculos DFT por medio del software SPR-KKR. Se calcularon propiedades como la magnetización, calor específico y susceptibilidad magnética en función de la temperatura considerando diferentes valores de la distancia que incluyen hasta cuartos vecinos. Los resultados muestran un aumento en el valor obtenido de la temperatura crítica con el número de vecinos. Esto resultado indica que se debe escalar para obtener el valor experimental correcto. Exploramos además la implementación de la anisotropía cristalina, calculando curvas de magnetización para diferentes valores de la constante de anisotropía.

Método

Implementación en Lammps de la ecuación de Landau–Lifshitz–Gilbert.

$$\frac{d\vec{s}}{dt} = \frac{1}{(1+\lambda^2)}((\vec{\omega}_i + \vec{\eta}) \times \vec{s}_i + \lambda \vec{s}_i \times (\vec{\omega}_i \times \vec{s}_i)) \quad (1)$$

con

$$\vec{\omega}_i = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{H}_{mag}}{\partial \vec{s}_i} \quad (2)$$

$$\mathcal{H}_{mag}(\vec{r},\vec{s}) = -\sum_{i=1}^{N} J(r_{ij})\vec{s}_i.\vec{s}_j - \sum_{i=1}^{N} K_{an}(\vec{r}_i)(\vec{s}_i.\hat{n}_i)^2 - \mu_B \mu_O \sum_{i,j=1}^{N} g_i \vec{s}_i.\vec{H}_{ext} \quad (3)$$

y

$$J(r_{ij}) = 4\alpha\left(\frac{r_{ij}}{\delta}\right)^2\left(1-\gamma\left(\frac{r_{ij}}{\delta}\right)^2\right)e^{-\left(\frac{r_{ij}}{\delta}\right)^2}\Theta(R_c - r_{ij}) \quad (4)$$

Temperatura de los espines

$$T_S = \frac{\hbar}{2k_b}\frac{\sum_{i=1}^{N}|\vec{s}_i \times \vec{\omega}_i|^2}{\sum_{i=1}^{N}\vec{s}_i.\vec{\omega}_i} \quad (5)$$

Parámetros de la simulación:

$\alpha = 28.72$ meV

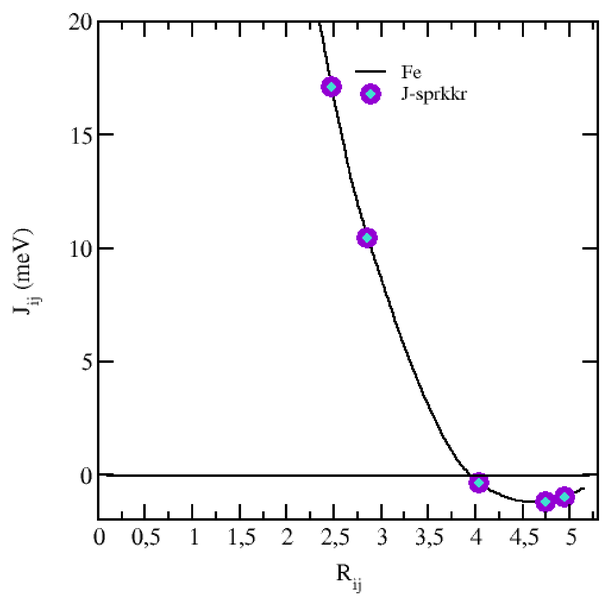
$\delta = 1.999$Å

$\gamma = 0.281$

$dt = 1 \times 10^{-15}$ s

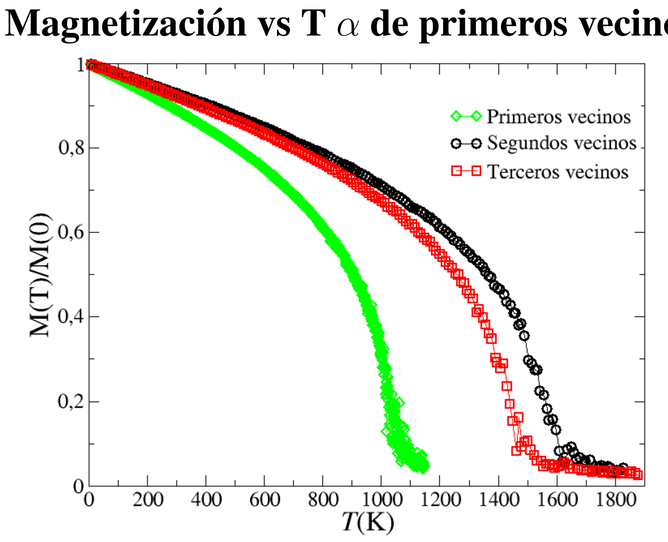
$t_f = 40 \times 10^{-12}$ s, 100×10^{-12} s

Calculos SPR-KKR para Fe

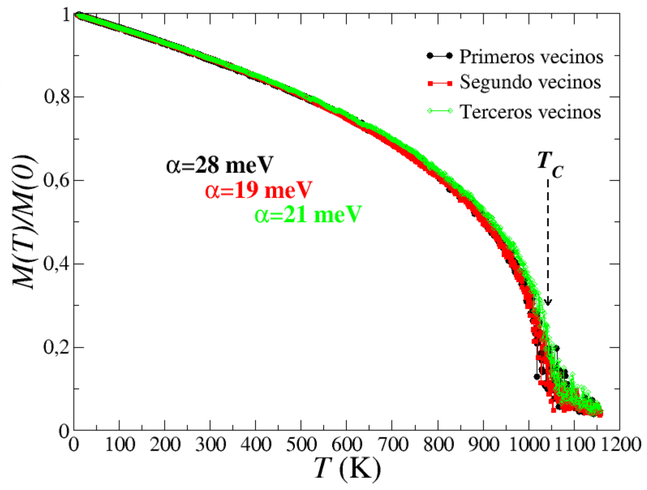


Resultados

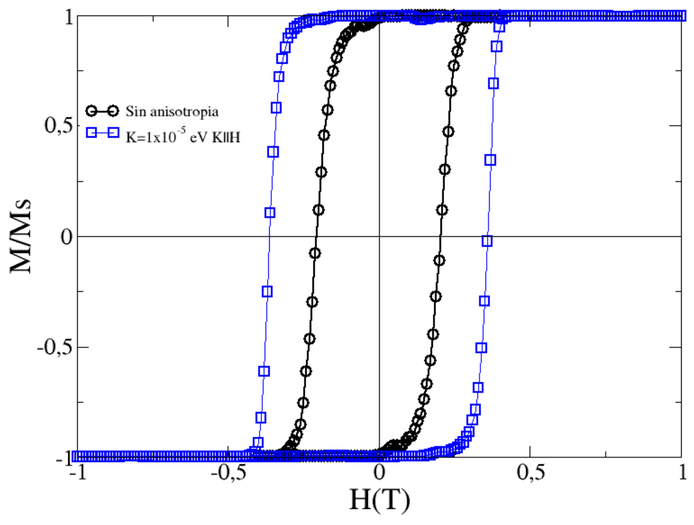
Magnetización vs T α de primeros vecinos



Magnetización vs T α adecuado para obtener T_C



Ciclo de histéresis con y sin anisotropía



Conclusiones

- Actualmente se puede simular las propiedades magnéticas en la aproximación de un Hamitoniano de Heisemberg utilizando dinámica de espines implementada en el código LAMMPS.
- Al considerar la contribución de más vecinos se debe escalar la magnitud de la constante de intercambio para obtener la misma temperatura de transición orden-desorden.