Modelo de Ising aplicado ao ordenamento Superferromagnético por meio de Pontes de Exchange

M. S. Carrião,[1] A. F. Bakuzis,[1]

[1]Universidade Federal de Goiás, Instituto de Física, Goiânia, GO 74001-970, Brasil

RESUMO

O modelo de Ising vem sendo utilizado para obtenção de diversas propriedades termodinâmicas de sistemas magnéticos por sua simplicidade e o valor qualitativo de seus resultados. Neste trabalho iremos utilizar a técnica do operador diferencial proposta por Kaneyoshi [1] para investigar um sistema bidimensional composto por nanodots magnéticos organizados em uma rede hexagonal. O objetivo do estudo é obter a temperatura de ordenamento superferromagnético em função do diâmetro da nanopartícula e da fração volumétrica. Esse tipo de cálculo teórico foi realizado anteriormente [2] considerando o mecanismo de Exchange por tunelamento [3]. Nesse trabalho, no entanto, iremos explorar o mecanismo de pontes de Exchange sugerido por Morup et al. [4,5]. Serão discutidas ainda, as implicações desse acoplamento na aplicação tecnológica de gravação magnética (perpendicular) de alta densidade.

MODELO DE ISING E A TÉCNICA DO OPERADOR DIFERENCIAL (TOD)

Nossos estudos tiveram como ponto de partida o Modelo de Ising Unidimensional, ou seja, uma cadeia linear de partículas magnéticas idênticas, interagindo penas com seus primeiros vizinhos. O objetivo desse estudo foi entender a TOD introduzida por Kaneyoshi em 1975 para tratar sistematicamente a chamada Identidade de Callen, que nos permite calcular a magnetizaç ; definir um operador:

$$e^{\alpha\nabla} = 1 + \alpha\nabla + \frac{\alpha^2\nabla^2}{2!} + \ldots + \frac{\alpha^n\nabla^n}{n!}$$

Aplicand

$$e^{\alpha\nabla} f(x) = f(x) + \alpha f'(x) + \frac{\alpha^2}{2!} f''(x) + \ldots + \frac{\alpha^n}{n!} f^n(x)$$

Para uma

$$f(x+\alpha) = f(x) + \alpha f'(x) + \frac{\alpha^2}{2!} f''(x) + \ldots + \frac{\alpha^n}{n!} f^n(x)$$

Portanto:

$$e^{\alpha\nabla} f(x) = f(x+\alpha)$$

IDENTIDADE DE VAN DER WAERDEN(IVW)

A IVW é equação que nos dará o valor da exponencial que surge quando utilizamos a TOD. Para cada spin essa identidade assume um valor a partir da e da própria exponencia

$$\langle S_i^z \rangle = \frac{1}{2} \langle e^{\frac{1}{2}\beta E_i \nabla} \rangle \tanh(x)\Big|_{x=0}$$

$$e^{yS_j^z} = 1 + yS_j^z + \frac{y^2 S_j^{z2}}{2!} + \ldots$$

Para spin

$$e^{yS_j^z} = \cosh(\tfrac{1}{2}y) + 2S_j^z \operatorname{senh}(\tfrac{1}{2}y)$$

Aumentando o spin, obtemos IVW muito maior

Spin	Identidade
1/2	cosh(a/2) + 2y senh(a/2)
3/2	[9cosh(a/2) - cosh(3a/2)]/8 + y[27senh(a/2) - senh(3a/2)]/24 + y^2 [-cosh(a/2)+cosh(3a/2)]/2
	y^3 [-3senh(a/2) + senh(3a/2)]/3
5/2	[75/84 cosh(a/2) - 25/128 cosh (3a/2) + 3/128 cosh(5a/2)] + y[-75/32 senh(a/2) - 25/192 senh(3a/2) + 3/320 senh(5a/2)] + y^2 [-17/24 cosh(a/2) +13/16 cosh (3a/2) - 5/48 cosh(5a/2)] + y^3[-17/12 senh(a/2) - 13/24senh(3a/2) + -1/24 senh(5a/2)] + y^4[1/12 cosh(a/2) - 1/8 cosh (3a/2) + 1/24 cosh(5a/2)] + y^5[1/6 senh(a/2) - 1/12 senh(3a/2) + 1/60 senh(5a/2)]

Como queremos calcular a temperatura de ordenamento para qualquer spin em um sistema bidimensional temos que fazer uma aproximação para a IVW. Assim temos a Hamiltoniana do sistema:

$$H = -\sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z - h\sum_i S_i^z$$

A IVW é dada por:

E a

$$e^{yS_j^z} = \cosh(\eta y) + (S_j^z/\eta)\operatorname{senh}(\eta y) \qquad \eta^2 = \langle (S_i^z)^2 \rangle$$

$$\langle S_i^z \rangle = m = \langle [\cosh(\eta J_{ij}\nabla) + (m/\eta)\operatorname{senh}(\eta J_{ij}\nabla)]^z \rangle Gs(\beta x)\Big|_{x=0}$$

$$\langle (S_i^z)^2 \rangle = \eta^2 = \langle [\cosh(\eta J_{ij}\nabla) + (m/\eta)\operatorname{senh}(\eta J_{ij}\nabla)]^z \rangle Hs(\beta x)\Big|_{x=0}$$

$$Gs(\xi) = (S+1/2)\coth[(S+1/2)\xi] - 1/2(\xi/2)$$

$$Hs(\xi) = S(S+1) + 1/2\coth^2(\xi/2) - (S+1/2)\coth(\xi/2)\coth[(S+1/2)\xi]$$

Onde:

$$1 = A(\eta) + B(\eta)m^2 \qquad \eta^2 = C(\eta) + D(\eta)m^2$$

$$A(\eta) = (3/4\eta)[Gs(3\beta\eta J_{ij}) + Gs(\beta\eta J_{ij})]$$

$$B(\eta) = (1/4\eta^3)[Gs(3\beta\eta J_{ij}) - 3Gs(\beta\eta J_{ij})]$$

$$C(\eta) = (1/4)[Hs(3\beta\eta J_{ij}) + 3Hs(\beta\eta J_{ij})]$$

$$D(\eta) = (3/4\eta^2)[Hs(3\beta\eta J_{ij}) - Hs(\beta\eta J_{ij})]$$

O ENTO

Agor termo de aoplamento que descreva as Pontes de exchange propostas por Morup:

$$J = n_b J_0 \qquad n_b = \gamma \frac{N_{sup}}{N_{total}} \frac{f(\phi)}{D}$$

Calculando o número de pontes para a estrutura como a da magnetita (Fe_3O_4) com 24 átomos de ferro por a^3, onde a é o parâmetro de rede

$$N_{sup} = 4\pi \left(\frac{D}{a}\right)^3 \left(1 - \left[\frac{D-2a'}{D}\right]^3\right)$$

Considerando-se que:

$$f(\phi) = \frac{1}{s} \qquad s = \frac{\xi - \phi^{1/3}}{\phi^{1/3}}$$

Então encontramos:

$$n_b = \gamma \left(1 - \left[\frac{D-2a'}{D}\right]^3\right) \frac{\phi^{1/3}}{\xi - \phi^{1/3}}$$

Portanto, este é primeiro modelo para a interação via Pontes de Exchange.A partir desse modelo, fizemos ajustes gráficos para encontrar a Temperatura de Ordenamento Superferromagnético:

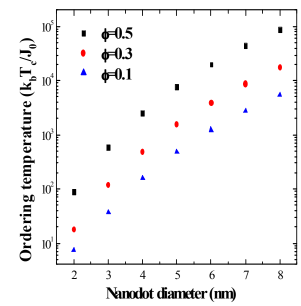

Figura 1- $T_{C1} > T_{C2}$, quando $D_1 > D_2$ - Este resultado confirma os resultados anteriores de simulação computacional e experimental (Mote Carlo e MOKE, respectivamente) [6].

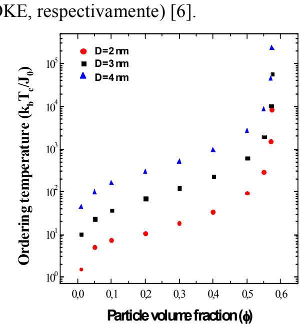

Figura 2 - TC1 > TC2 , quando Φ1 > Φ2 - Relacionando concentração de partículas com gravação perpendicular.

CONCLUSÃO

Neste trabalho mostramos os cálculos para o Modelo de Ising, utilizando a TOD, para qualquer valor de spin no modelo bidimensional. Descrevemos um termo para a interação via Pontes de Exchange e exibimos ajustes gráficos da Temperatura de Ordenamento Superferromagnético em função do diâmetro da partícula e da fração volumétrica.

REFERÊNCIAS

[1] T. Kaneyoshi, Acta Phys. Pol. 83, 703 (1993).
[2] A.F. Bakuzis, P. C. Morais, J. Magn Magn Mater, 285, 145 (2005); J. Magn. Magn. Mater. 272-276, e1161 (2004); Phys. Stat. Sol. (c) 1 (12), 3332 (2004).
[3] V.N. Kondratyev, H.O. Lutz, Phys. Rev. Lett. 81, 4508 (1998).
[4] S. Morup et al., J. Magn. Magn. Mater. 40, 163 (1983).
[5] M.F. Hansen et al., Phys. Rev. B 62, 1124 (2000).
[6] M.R. Scheinfein, K.E. Schimdt, K.R. Hein, G.G. Hembree 996)

AGRADECIMENT

CNPq
Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico