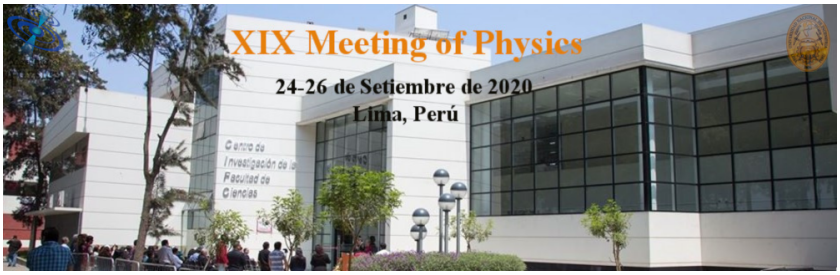

Contribution ID : **84** Type : **poster**

Efectos de tamaño, forma y estructura sobre la temperatura de Curie de nanopartículas de Fe y Ni

Saturday, 26 September 2020 12:20 (10)

Las nanopartículas magnéticas utilizadas para el almacenamiento de datos tienden a ser cada vez más pequeñas, con el fin de aumentar la densidad de datos almacenados y reducir el tamaño de los dispositivos[1]. Por lo tanto, estudios de efectos de tamaño finito sobre estas pequeñas nanopartículas es de suma importancia para entender la física que las gobierna. Un enfoque atomístico es el más adecuado para esta clase de estudios, donde las fluctuaciones de la red y la estructura atómica real es tomada en cuenta para estudiar las propiedades magnéticas[2]. En la primera parte de este trabajo, las estructuras atómicas de pequeñas nanopartículas de Fe y Ni se simulan empleando dinámica molecular. El proceso es llevado a cabo en dos etapas, un lento calentamiento desde una fase ordenada a 300K hasta 2000K y en seguida, un lento enfriamiento. Las propiedades magnéticas se simulan usando un Hamiltoniano clásico de spin teniendo en cuenta la naturaleza de largo alcance y la dependencia de la separación atómica de la interacción de intercambio[3]. La evolución en el tiempo de la magnetización se calcula utilizando la solución numérica de la ecuación de Landau-Liftshitz-Gilbert y la dinámica de Langevin[4]. Nuestros resultados muestran notorios efectos de tamaño, forma y fluctuaciones de la red sobre la magnetización en función de la temperatura.

[1] F. Dorfbauer, R. Evans, M. Kirschner, and O. Chubykalo-fesenko, "Effects of surface anisotropy on the energy barrier in cobalt – silver core – shell nanoparticles," vol. 316, pp. 791–794, 2007, doi: 10.1016/j.jmmm.2007.03.101.
[2] R. Evans et al., "The influence of shape and structure on the Curie temperature of Fe and Co nanoparticles," J. Appl. Phys., vol. 99, no. 8, 2006, doi: 10.1063/1.2167636.
[3] J. Kudrnovský, I. Turek, M. Pajda, P. Bruno, and V. Drchal, "Ab initio calculations of exchange interactions, spin-wave stiffness constants, and Curie temperatures of Fe, Co, and Ni," Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys., vol. 64, no. 17, 2001, doi: 10.1103/PhysRevB.64.174402.
[4] R. F. L. Evans, W. J. Fan, P. Chureemart, T. A. Ostler, M. O. A. Ellis, and R. W. Chantrell, "Atomistic spin model simulations of magnetic nanomaterials," J. Phys. Condens. Matter, vol. 26, no. 10, 2014, doi: 10.1088/0953-8984/26/10/103202.

Primary author(s) : TERRAZAS PALOMINO, Angel (Universidad Nacional Mayor de San Marcos); Dr CUBA SUPANTA, Gustavo (Universidad Nacional Mayor de San Marcos)

Co-author(s) : GOMEZ QUISPE, Juan Rafael (Universidad Nacional Mayor de San Marcos); MILLA ROBLES, Tony Wenceslao (Universidad Nacional Mayor de San Marcos); Dr ROJAS AYALA, Chachi (Universidad Nacional Mayor de San Marcos); Dr ROJAS TAPIA, Justo (Universidad Nacional Mayor de San Marcos)

Presenter(s) : TERRAZAS PALOMINO, Angel (Universidad Nacional Mayor de San Marcos)

Session Classification : Poster session

Track Classification : Materials Science and Nanotechnology