

Interacción dipolar magnética en películas ultradelgadas

H. León* y E. Estévez Rams

Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales. Universidad de La Habana. Zapata e/ Mazón y G. Vedado. 10400 La Habana. Cuba; hleon@imre.oc.uh.cu

* autor para la correspondencia:

Recibido el 15/7/2008. Aprobado en versión final el 08/10/2009.

Sumario. Las películas ultradelgadas son importantes para la comprensión de las interacciones magnéticas en cristales cuasibidimensionales. Para calcular la energía de anisotropía dipolar se emplea un formalismo que tiene presente el carácter discreto de la distribución de capas atómicas a lo largo de la dirección de crecimiento. Se presentan resultados numéricos para estructuras con empaquetamientos compacto y no compacto. Se investigan los efectos estructurales y de tamaño. Se comparan estos resultados con la anisotropía efectiva, verificando así el papel de la interacción dipolar en la reorientación de la magnetización al cambiar el espesor de la película.

Abstract. Ultrathin films are an important testing ground of our understanding of magnetic interactions in quasi-two-dimensional systems. A formalism that takes into account the discreteness of atomic layer distribution along the growth direction is employed to calculate the dipolar anisotropy energy. Numerical results are presented for close-packed and non-close packed structures. Structural and size effects are investigated. Comparison with effective anisotropy energy allows verify the role of the dipolar interaction in the magnetization switching when the film thickness is changed.

Palabras clave. Magnetic anisotropy, 75.30.Gw; Magnetic films properties of, 75.70.-i

1 Introducción

Las películas ultradelgadas de materiales magnéticos tienen aplicaciones tecnológicas entre las que se destacan las asociadas con dos configuraciones: la plana, con magnetización paralela a sus caras, y la perpendicular, con magnetización perpendicular a sus caras. Por otra parte, estas películas son importantes para la comprensión de las interacciones magnéticas en cristales cuasibidimensionales (Q2D), donde solo hay simetría bidimensional (2D) de la estructura. Un estudio fundamental requiere al menos de un Hamiltoniano clásico¹, que refleje el aporte de las interacciones de intercambio, magneto-cristalina y dipolar al establecimiento del estado básico de tales sistemas. La interacción dipolar ha sido objeto de tales estudios en varios trabajos^{2,3}, pero aspectos como la correcta separación entre los aportes de la estruc-

tura y de la forma del sistema a la energía quedan aún sin resolver.

En este trabajo se tiene presente el carácter discreto de la distribución de capas atómicas a lo largo de la dirección de crecimiento empleando un formalismo introducido anteriormente⁴. De esta manera se consigue una clara distinción entre los llamados efectos estructurales y efectos de tamaño en la interacción dipolar magnética, así como se explica la dependencia de ambos efectos del espesor de las películas. Se presentan resultados numéricos de la anisotropía dipolar en películas de pocas capas atómicas con empaquetamientos compacto y no compacto, analizando el papel de la relación entre la distancia entre capas y la constante de la red bidimensional. Se estudia la influencia de la relación entre el tamaño lateral y el espesor de películas con una geometría de amplio uso en experimentos. Se comparan estos resultados con la

anisotropía efectiva, que incluye la interacción espín-órbita y otras de origen no dipolar, en películas de níquel y de cobalto, donde tienen lugar reorientaciones de la magnetización al cambiar sus espesores.

2 Fundamento teórico

Consideramos que cada capa atómica está compuesta por dipolos de momentos magnéticos \mathbf{m} localizados en los nodos $\boldsymbol{\tau}$ de una red 2D con vectores base \mathbf{a} , \mathbf{b} . La magnetización se define como $\mathbf{M} = \mathbf{m}/V_d$, donde el volumen de una celda que encierra a cada dipolo es $V_d = \mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}$, siendo \mathbf{c} un vector perpendicular a las capas cuyo módulo es igual a la separación entre ellas.

Cuando la magnetización es homogénea, la densidad media de energía dipolar está dada por:

$$U = -\frac{\mu_0}{2N} \sum_{n=0}^{N-1} \mathbf{M} \cdot [\mathbf{L}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_n) - D_{av}(\mathbf{c}_l - \mathbf{c}_n)] \mathbf{M},$$

donde μ_0 es la permeabilidad magnética del vacío y N el número de capas atómicas. Aquí $\mathbf{R}_n = \mathbf{c}_n + \mathbf{r}_{sn}$, siendo \mathbf{c}_n la posición de la capa n , cuyos nodos están desplazados lateralmente \mathbf{r}_{sn} respecto a los de la de referencia. Se han introducido los tensores Q2D de Lorentz y de demagnetización definidos como:

$$\mathbf{L}(\mathbf{r}) = \frac{V_d}{4\pi} \nabla \nabla \sum_{\boldsymbol{\tau}} \left[|\mathbf{r} - \boldsymbol{\tau}|^{-1} - A_d^{-1} \int_{A_d} |\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}|^{-1} d^2 \boldsymbol{\rho} \right],$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \frac{V_d}{4\pi} \nabla \nabla \left[A_d^{-1} \int_A |\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}|^{-1} d^2 \boldsymbol{\rho} \right],$$

donde $A_d = |\mathbf{a} \times \mathbf{b}|$ es el área de la celda 2D que encierra a cada dipolo. El subíndice "av" indica que se ha tomado el valor medio de $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ en el área A de la capa atómica.

La energía de anisotropía dipolar se calcula como:

$$\Delta U = U_{out} - U_{in},$$

donde U_{out} corresponde a la magnetización perpendicular y U_{in} a la paralela a las caras de la película. Así, cuando ΔU es positiva, el sistema tiene una configuración plana, mientras que cuando es negativa, el sistema tiene una configuración perpendicular. Fácilmente se entiende que hay un aporte ΔU_L relacionado con la estructura cristalina de la película, dado por el tensor Q2D de Lorentz y otro ΔU_D debido a la forma lateral de la misma, dado por el tensor Q2D de demagnetización, el cual se hace nulo cuando las dimensiones laterales son infinitas. Los llamados efectos estructurales tienen que ver con el primer aporte, y se observan fácilmente cuando la razón estructural c/a es suficientemente pequeña; mientras que los efectos de tamaño tienen que ver con la relación d/t entre la dimensión lateral característica d (lado de un cuadrado, diámetro de una circunferencia u otro) y el espesor t de la película.

3 Resultados numéricos

Consideraremos capas atómicas apiladas siguiendo un

empaquetamiento compacto, en el cual la red 2D en cada una de ellas tiene simetría hexagonal; a su vez estas capas pueden estar desplazadas respecto a una de referencia solo en tres posiciones distintas A, B y C. Así, la secuencia ABAB... no es más que el cristal hexagonal con empaquetamiento compacto (hcp) crecido en la dirección [0001]; mientras que la secuencia ABCABC... corresponde al cristal cúbico centrado en las caras (fcc) crecido a lo largo de la dirección [111]. También simularemos capas atómicas apiladas siguiendo un empaquetamiento no compacto, en el cual la red 2D en cada una de ellas tiene simetría cuadrada; a su vez estas capas pueden estar desplazadas respecto a una de referencia también en tres posiciones distintas, pero con corrimientos diferentes entre sí y distintos a los del empaquetamiento compacto. Así, el cristal fcc y el cúbico centrado en el cuerpo (bcc) crecidos a lo largo de la dirección [100] son secuencias del tipo ABAB....

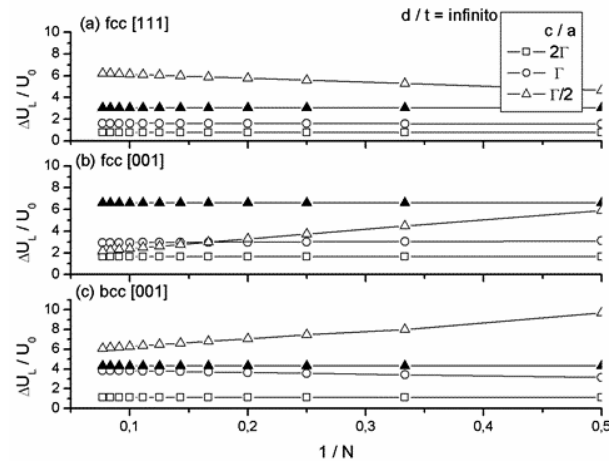


Figura 1. Energía de anisotropía dipolar (símbolos abiertos) en función del inverso del número de capas cuando las dimensiones laterales son infinitas ($\Delta U_D = 0$). El aporte intracapa se muestra para $c/a = \Gamma/2$ (triángulos rellenos).

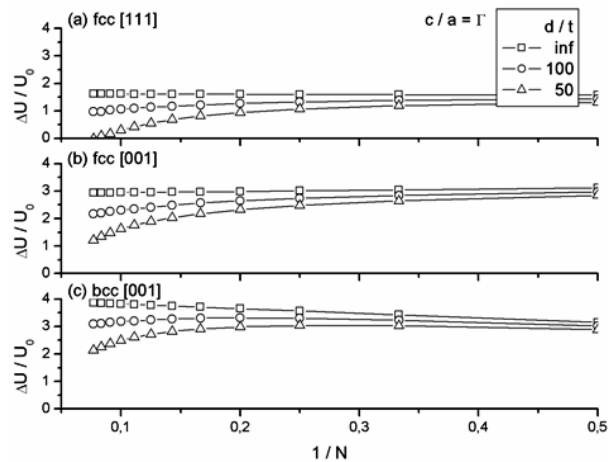


Figura 2. Energía de anisotropía dipolar en función del inverso del número de capas, cuando las dimensiones laterales son infinitas o finitas en películas de geometría cuadrada.

Los cálculos se hacen para la relación ideal correspondiente a esferas rígidas $c/a=\Gamma$ (en cualquier empaquetamiento compacto $\Gamma = (2/3)^{1/2}$ y en las secuencias no compactas consideradas $\Gamma=1/2$), así como para múltiplos o fracciones de ésta. Las energías están normalizadas por $U_0 = \mu_0 M_0^2 / 2$, donde $M_0 = m / (A_d a)$. Los valores obtenidos resultan del aporte intracapa, debido a la interacción de dipolos pertenecientes a la misma capa exclusivamente, y del aporte intercapa, debido a la interacción de dipolos que se encuentran en distintas capas.

En la Figura 1 aparece ΔU_L vs. $1/N$ (símbolos abiertos) para $c/a = 2\Gamma, \Gamma, \Gamma/2$. Los resultados se muestran para películas con estructuras fcc [111] (a), fcc [100] (b), y bcc [100] (c). Se aprecia una dependencia lineal, cuya pendiente depende de c/a . Si se compara con el aporte intracapa (línea de pendiente nula, sólo representada para $c/a=\Gamma/2$), se comprende que el aporte intercapa es responsable de la pendiente en tal dependencia. Los efectos estructurales se revelan al comparar las líneas para diferentes estructuras, detectando distintas pendientes para un mismo valor de c/a .

La Figura 2 muestra ΔU vs. $1/N$ para $d/t = \infty, 100, 50$. Los resultados aparecen para películas con las mismas estructuras que en la Fig. 1. Se tomó $c/a = \Gamma$ para saber su influencia, ya discutida, y distinguir los efectos de tamaño. Se aprecia una separación de la dependencia lineal, la cual se hace más pronunciada mientras más pequeña es la relación d/t .

En la Figura 3 se muestran ΔU_L (símbolos vacíos) y la energía de anisotropía efectiva ΔU_{ef} (símbolos rellenos) en dependencia de $1/N$ para películas de cobalto (a) y níquel (b). Los cálculos de ΔU_{ef} se hicieron de acuerdo a las expresiones empíricas y los datos de magnetización de saturación y otros de las refs. [5,6], así como valores realistas de la razón estructural. El cambio de configuración magnética ocurre cuando $\Delta U_{ef}=0$. Nuestros resultados coinciden con los experimentales cuando $c/a = 0.94\Gamma$, valor que corresponde a las distorsiones tetragonales reportadas en esos trabajos. Así, a medida que el número de capas aumenta, tiene lugar la reorientación de la magnetización de perpendicular a plana cuando $N=4.5$ en el Co, como en la ref. [5], y de plana a perpendicular cuando $N=7$ en el Ni, como en la ref. [6], lo cual avala nuestro modelo para la influencia de la razón c/a .

4 Conclusiones

Los efectos estructurales demuestran que a pesar del largo alcance de la interacción dipolar, el número de ca-

pas con un aporte significativo a la anisotropía dipolar, convencionalmente llamadas capas acopladas, es limitado y depende de la razón estructural. Los efectos de tamaño se hacen más pronunciados a medida que disminuye la relación entre la dimensión lateral característica y el espesor de la película. Se verifica que la interacción dipolar contribuye a la anisotropía efectiva, pero la pendiente de la dependencia lineal, que fija en definitiva los valores a los que ocurre la reorientación de la magnetización, es debida a otras contribuciones de origen distinto, en concordancia con conclusiones anteriores que atribuyen a los efectos superficiales en la interacción espín-órbita y otras la responsabilidad por el cambio de configuración magnética.

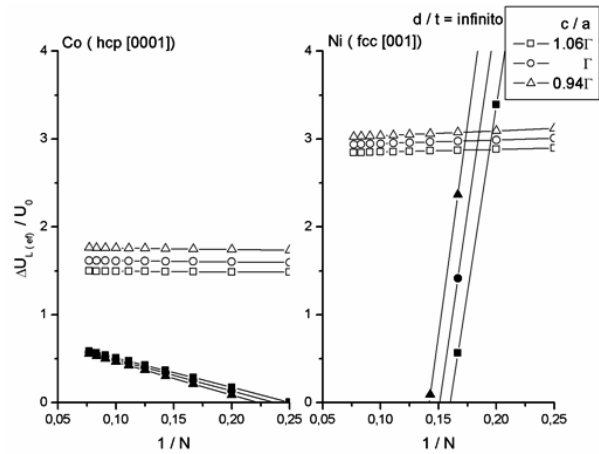


Figura 3. Energías de anisotropía dipolar (símbolos abiertos) y anisotropía efectiva (símbolos rellenos) en función del inverso del número de capas cuando las dimensiones laterales son infinitas.

Referencias

1. K. De'Bell, A.B. MacIsaac, and J.P. Whitehead, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 225 (2000)
2. H.J.G. Draaisma and W.J.M. de Jonge, *J. Appl. Phys.* **64**, 3610 (1988)
3. E. Y. Vedmedenko, H. P. Oepen and J. Kirschner, *J. Magn. Magn. Mater.*, **256**, 237 (2003)
4. E. Estevez-Rams, J. Martinez-Garcia, J. Martinez-Garcia, J. Hiram-Espina, and H. Fuess, *Rev. B* **68**, 184410 (2003)
5. R. Allenspach, M. Stampanoni, and A. Bischof, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 3344 (1990)
6. B. Schulz and K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **50**, 13467 (1994)