

Magnetización de superficie vs magnetización del “core” en nanopartículas esféricas de Fe: Simulaciones acopladas “spin-red”

• Gonzalo dos Santos,^{1,2} Robert Meyer,³ Romina Aparicio,^{1,2} Julien Tranchida,⁴ Eduardo Bringa,^{1,2} Herbert Urbassek³

¹CONICET

²Facultad de Ingeniería - Universidad de Mendoza

³Physics Department and Research Center OPTIMAS, University Kaiserslautern, Erwin-Schrodinger-Straße, D-67663 Kaiserslautern, Germany

⁴Computational Multiscale, Center for Computing Research, Sandia National Laboratories

Simulaciones atomísticas de dinámica spin-red, acoplada con dinámica molecular (Spin-Lattice Dynamics, SLD) se han utilizado previamente para calcular la dependencia de la magnetización de nanopartículas (NP) de Fe con la temperatura y el diámetro de las NP, considerando un momento magnético atómico uniforme en toda la NP [1]. En este trabajo, se presenta un modelo de simulación de SLD que tiene en cuenta la variación del momento magnético en las cercanías de la superficie de las NP. Para esto, se divide a los átomos cercanos a la superficie de aquellos del centro de la NP, en una especie de modelo “Core-Shell” donde los átomos del “core” tienen propiedades similares a las del “bulk”. Se simulan NP esféricas de Fe bcc con diámetros de 2-8 nm en un amplio rango de temperaturas 10-900 K. Variaciones en el momento magnético atómico se determinan mediante análisis del volumen atómico y se muestra que, tanto la magnitud del momento magnético como la interacción de intercambio spin-spin tienen que modificarse cerca de la superficie para obtener un buen acuerdo con resultados experimentales. En este sentido, el modelo permite reproducir correctamente el comportamiento del momento magnético promedio como función del diámetro y de la magnetización de la NP vs la temperatura.

Referencias:

[1] G. Dos Santos *et al.*, Phys. Rev. B **102**, 184426 (2020).