

COMPORTAMIENTO MICROMAGNÉTICO EN UNA PELICULA DELGADA DE Fe: ANÁLISIS TEORIO Y EXPERIMENTAL

Micromagnetic Behavior on an Fe Thin Film: Experimental and Theoretical Analysis

RESUMEN

Se presenta el análisis teórico mediante simulación del comportamiento micromagnético en películas delgadas de hierro puro, usando el software Object Oriented Micromagnetism Framework (OOMMF). Los resultados son comparados con datos obtenidos de manera experimental para una película de Fe crecida mediante la técnica Deposición por Laser Pulsado (PLD). Se realizaron medidas magnéticas mediante Efecto Kerr Magnetoóptico (MOKE) revelando comportamiento ferromagnético duro a temperatura ambiente acorde con las simulaciones. Los campos coercitivos tienen un error de tan solo el 9% debido posiblemente a consideraciones de temperatura. Los diagramas de magnetización, y curvas de energía evidencian la presencia de múltiples mecanismos de magnetización en este sistema

PALABRAS CLAVES: ferromagnético duro, micromagnético.

ABSTRACT

We present the theoretical analysis using simulation of micromagnetic behavior in an iron thin film, through the software Object Oriented Micromagnetism Framework (OOMMF). The results are compared with data obtained by experimental for Fe films grown by Pulsed Laser Deposition (PLD) Magnetic measures were carried out through Magneto-Optic Kerr Effect (MOKE) revealing hard ferromagnetic behavior of the film at room temperature consistent with the simulations. The coercive field have an error of only 9% possibly due to considerations of temperatura. The magnetization diagrams and energy curves show the precense of multiple mechanism of magnetization in this system

KEYWORDS: *hard ferromagnetic, micromagnetism*

ANDRES C. GARCIA CASTRO ¹

Estudiante XI semestre Ingeniería Física
Universidad Tecnológica de Pereira
a.c.garcia.castro@gmail.com

BEATRIZ CRUZ MUÑOZ ¹

Física, Ph.D.
Profesora asistente
Universidad Tecnológica de Pereira
bcruz@utp.edu.co

JAVIER TORRES OSORIO ¹

Ingeniero Electricista, M. Sc.
Profesor asistente
Universidad Tecnológica de Pereira
oscuro@utp.edu.co

HENRY RIASCOS L. ²

Física, Ph.D.
Profesora Titular
Universidad Tecnológica de Pereira
hriascos@utp.edu.co

JOSÉ FERNANDO GÓMEZ c. ²

Químico
Estudiante Maestría en Ciencias de Materiales
Universidad del Quindío
joquimfe@gmail.com

1. INTRODUCCION

Los materiales magnéticos han sido durante muchos años la base de nuevas tecnologías, que con el paso del tiempo requieren de desarrollos teóricos y experimentales de gran magnitud. Las películas delgadas han hecho parte de estos avances, ya que en virtud de sus dimensiones (en el orden de los nanómetros) las propiedades ópticas, mecánicas, eléctricas y por supuesto magnéticas cambian abruptamente.

Con el transcurso de estos desarrollos, ha surgido la necesidad de entender y explicar a fondo el comportamiento magnético de estos nuevos materiales a escala nanométrica, el micromagnetismo, así como la simulación de materiales, y específicamente el modelamiento de sistemas a estas escalas ha permitido investigaciones de carácter teórico con amplias facilidades de costo en desarrollo.

Las simulaciones micromagnéticas permiten un profundo entendimiento de los efectos que tienen los campos magnéticos aplicados en el material modelado a una longitud de escala intermedia entre los dominios magnéticos y distancias atómicas; que se deben tener en cuenta para un correcto análisis y obtención de valores teóricos, así como para la visualización aproximada de los procesos presentes en la dinámica de magnetización.

Las películas delgadas magnéticas han sido empleadas en sensores basados en variaciones de la magnetorresistencia presente en el material y dispositivos electrónicos de grabación, que usan la característica de magnetización perpendicular a la superficie en materiales ferromagnéticos [1-4]. Los antecedentes muestran que investigaciones, modelaciones y simulaciones han sido realizadas en conos ferromagnéticos [5], nano-hilos [6], uniones de nano-magnetos [7] y películas delgadas,

arrojando resultados acordes con los reportados experimentalmente, y que aportan explicaciones físicas a dichos valores numéricos, corroborando que esta es una herramienta poderosa en el entendimiento del magnetismo a esta escala de desarrollo.

En este trabajo hemos estudiado detalladamente la dinámica de la magnetización de películas delgadas de hierro, siendo comparados estos resultados con mediciones obtenidas de manera experimental para este tipo de sistema reproducido mediante la técnica PLD (Pulsed Laser Deposition), analizando la influencia de los diferentes términos de la energía en la dinámica de la magnetización representada en el proceso de histéresis.

2. METODO

2.1 Simulación

Para realizar las simulaciones usamos la discretización de diferencia finita (FD en el cual el espacio es discretizado en celdas rectangulares idénticas) que es la base del programa para simulación micromagnética Object Oriented Micromagnetism Framework (OOMMF), software desarrollado por el National Institute of Standards and Technology (NIST) Donahue y Porter [8].

El método para resolver la dinámica de magnetización dependiente del tiempo es llevado a cabo implementando una solución a la ecuación diferencial de Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG)

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{ef} - \frac{\gamma\alpha}{M_s} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{ef}) \quad (1)$$

$$\mathbf{H}_{ef} = \mathbf{H}_{ex} + \mathbf{H}_k + \mathbf{H}_d + \mathbf{H}_{app} \quad (2)$$

Donde \mathbf{M} representa la magnetización, \mathbf{H}_{ef} el campo efectivo (que es la superposición del campo externo aplicado \mathbf{H}_{app} , contribuciones de anisotropía \mathbf{H}_k , intercambio \mathbf{H}_{ex} , y campos de desmagnetización \mathbf{H}_d) y la razón giromagnética de Gilbert, α la constante de amortiguamiento, y M_s la magnetización de saturación del material.

El primer término en la ecuación (1) describe la precesión del vector de magnetización \mathbf{M} alrededor del campo efectivo, el segundo término representa su disipación, hasta alcanzar el estado de equilibrio en un estado de mínima energía.

En la Tabla 1 se presentan los parámetros de entrada necesarios para simular el material (Fe) [6,8].

Para la modelación, se eligió una geometría cuadrada, para una película de Fe puro. Las configuraciones

vectoriales son obtenidas para una discretización de 120000 celdas. En este caso por limitaciones en la velocidad de cálculo, la película fue simulada a un tercio de su espesor real, teniendo en cuenta que para este rango, las variaciones en el espesor no afectan de manera apreciable los valores nominales de los campos coercitivos para este tipo de películas [9]

Propiedad	valor
Constante de Anisotropía (K_1)	48 kJ/m ³
Tipo de Anisotropía	Cúbica
Planos Cristalinos	[100]/[010]
Coefficiente de intercambio (A_x)	21 pJ/m
Constante de amortiguamiento (α)	0.5
Magnetización de Saturación (M_s)	1.7 MA/m
Celda de Discretización	5 nm

Tabla 1. Parámetros de entrada para Fe.

Se conservó una lateral de 1.0 μm para todas las simulaciones manteniendo un intervalo de tiempo entre iteración de 0.1 μs . La magnetización es inicialmente dispuesta en modo aleatorio y luego el campo es aplicado en la dirección x perteneciente al plano de la película (eje fácil), así el campo aplicado es llevado hasta $\mu_0 H = \pm 110$ mT en pasos de 5 mT hasta obtener varios ciclos de histéresis.

Fueron usados 2 equipos en serie, con un procesador Intel dual core, y una velocidad en RAM de 1 GHz, cada uno, con un tiempo por simulación aproximado de 48 horas.

2.2 Experimental

Con el fin de validar el análisis teórico se realizó mediante la técnica Deposición por Láser Pulsado (PLD), el crecimiento de una película delgada de Fe. En el proceso se utilizó un láser Nd:YAG Spectra Physics Quanta Ray con longitud de onda $\lambda = 1064$ nm, energía de 500 mJ por pulso de duración 7 ns, tasa de repetición de 10 Hz y una fluencia de 7 J/cm²; sobre sustratos mono-cristalinos de Si/Si₃N₄ con orientación cristalográfica (100) y una temperatura constante de 523 K. La distancia blanco-sustrato utilizada para garantizar una adecuada deposición fue 56 mm.

La caracterización estructural de la película obtenida fue realizada mediante Difracción de Rayos X (DRX) con un difractorómetro Bruker D8 Advance dotado de un goniómetro vertical, tubo de ánodo de Cu y detector de centelleo de NaI (con filtro de Ni). Para analizar la morfología se empleó un Perfilómetro Dektak 8000. El comportamiento ferromagnético de las muestras se analizó mediante Efecto Kerr Magneto-Óptico (MOKE). Las medidas se hicieron a temperatura ambiente utilizando la geometría longitudinal, con un tiempo entre cada paso de campo magnético de 600 ms e incrementos

de 1,30 mT por paso para un campo máximo de ± 110 mT.

3. RESULTADOS Y ANALISIS

La muestra obtenida de manera experimental se creció a una presión de 4.0 μ Torr y una temperatura de 523 K, para la cual se midió un espesor aproximado de 45 nm mediante perfilometría. La película presenta un comportamiento ferromagnético duro con una alta permeabilidad magnética, también se observa una rápida saturación del sistema, siendo esta cercana a valores de campo magnético aplicado promedio de 30 mT, en acuerdo con valores reportados anteriormente [9].

En la figura 1 se presenta un ciclo de histéresis obtenido mediante simulación (OOMMF), en contraste con el obtenido de manera experimental mediante MOKE.

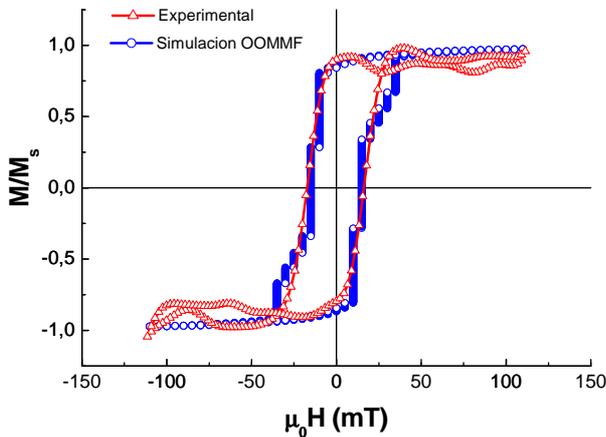


Figura 1. Comparación del comportamiento histérico para la película delgada obtenida de manera experimental (MOKE) y teórica (OOMMF)

El campo coercitivo obtenido fue de $\mu H_c = 15$ mT presentando una diferencia con el experimental de tan solo 9 % lo que puede deberse a consideraciones de temperatura que no son tenidas en cuenta, ya que para este caso, la energía total, responsable del campo efectivo no contiene términos de agitación térmica.

Otro de los factores que puede influir en la diferencia, es la anisotropía, ya que esta característica para sistemas con alto porcentaje en hierro presenta un comportamiento cúbico [10], sin embargo, este comportamiento no fue observado en mediciones previas realizadas a la película delgada de Fe, que exhibe una anisotropía débil.

Uno de los grandes aportes a este tipo de análisis, es la posibilidad de visualizar los diagramas de magnetización, siendo posible entender los fenómenos de evolución de los dominios magnéticos a lo largo del ciclo, responsables de este comportamiento histérico. Se

presentan el ciclo de histéresis (figura 2) y los diagramas de magnetización (figura 3) para este sistema.

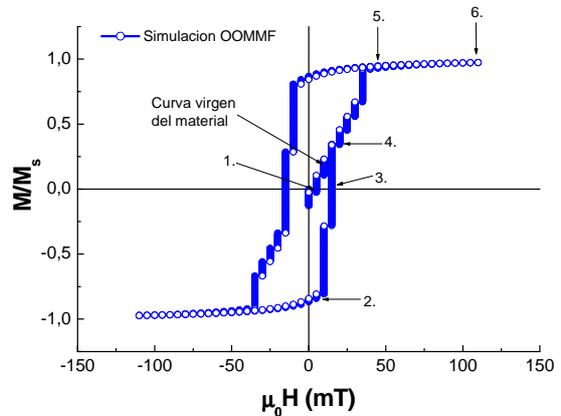


Figura 2. Ciclo de histéresis obtenido para la película delgada de Fe mediante OOMMF

Las configuraciones vectoriales de magnetización son presentadas para seis pasos específicos en el ciclo de histéresis. El paso 1. (Figuras 2 y 3) evidencia una magnetización aleatoria al iniciar en la curva virgen del material como es de esperarse, ya que este gran número de dominios minimiza la energía de desmagnetización del sistema encontrando el estado de equilibrio [11]. Luego el campo es llevado hasta 110 mT, valor en el cual el material está completamente magnetizado. Al llegar a este estado, para una magnetización inversa, comenzamos a tomar los snap shots de la magnetización, luego de observar el comportamiento ferromagnético del sistema.

Los diagramas son tomados desde el valor de magnetización remanente negativo, hasta el punto de cierre del ciclo.

Visualizando las figuras 2 y 3 podemos apreciar que en el proceso de magnetización se evidencian varios mecanismos, entre estos, el proceso de magnetización mediante movimiento de las paredes de dominio (1-2) posteriormente, se aprecian procesos de rotación de espín en forma de estado de vórtice (3), luego se aprecia nuevamente el movimiento de las paredes de dominio (4) y por último, como es de esperarse, el proceso será determinado por la rotación coherente de los dominios con ayuda del movimiento de las paredes de dominio (5-6) llegando finalmente a un estado de dominio simple en el estado de saturación.

Teniendo en cuenta el espesor de la película y la longitud de las paredes de dominio, así como el tamaño de los dominios magnéticos en películas tan delgadas, las diferencias detectables y considerables entre las propiedades magnéticas cerca de la superficie (medidas por ejemplo mediante sistema MOKE) y las propiedades del volumen (medidas por ejemplo mediante Magnetómetro de Muestra Vibrante VSM) de películas

delgadas de Fe [10] tienen un efecto despreciable en este estudio.

Sin embargo estas diferencias son explicadas en el marco de la existencia de concepciones de estructura con comportamiento de carácter micromagnético de las películas delgadas, en particular, distinciones en las estructuras de dominio del volumen, además de la presencia de rugosidad en la superficie de las películas [10] que afecta las mediciones de superficie como las realizadas en este trabajo. Sabemos además, que el comportamiento magnético de películas delgadas depende en gran parte de la competencia entre varios factores tales como tamaño de grano, orientación cristalográfica, y comportamiento de los dominios magnéticos en las interfaces de películas multicapas y/o interfaces película-sustrato.

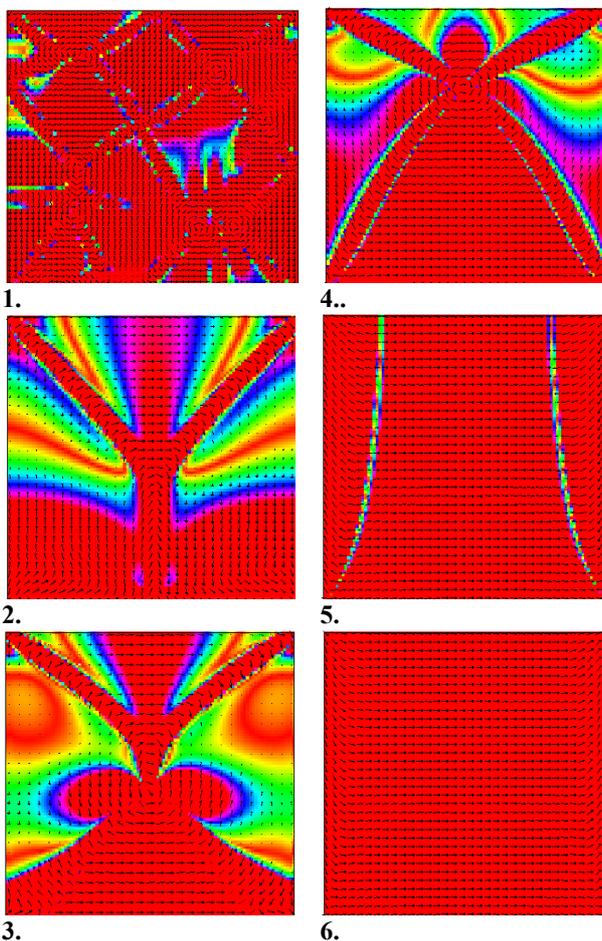


Figura 3. Diagramas de magnetización evidenciando dominios y paredes de dominio del material.

Con el fin de clarificar los sucesos responsables de este ciclo histerético se presenta en la figura 4 las curvas de energía en función del campo aplicado. Se evidencian

puntos de suma importancia, por ejemplo el punto de coercitividad ($\mu_0 H = 15$ mT), en el cual la energía de desmagnetización se hace mínima por la existencia de estados de vórtice, además de varios monodominios, sin embargo es inevitable el aumento de la energía de intercambio por la diferencia en la orientación de los espines del sistema, no obstante, se experimento un aumento en la energía de anisotropía debido a la desviación de los vectores de magnetización de la dirección de los ejes fáciles en el material.

Otro punto de suma importancia se presenta en el valor de $H = 35$ mT en el cual los procesos de magnetización cambian desde los modos de movimiento de las paredes de dominio, a rotación coherente, así en este punto se evidencia altas energías de intercambio debido a la transición de estados, sumando además, altos valores de la energía de anisotropía, lo que indica nuevamente alejamiento de los vectores de magnetización de la orientación magnetocristalina preferencial.

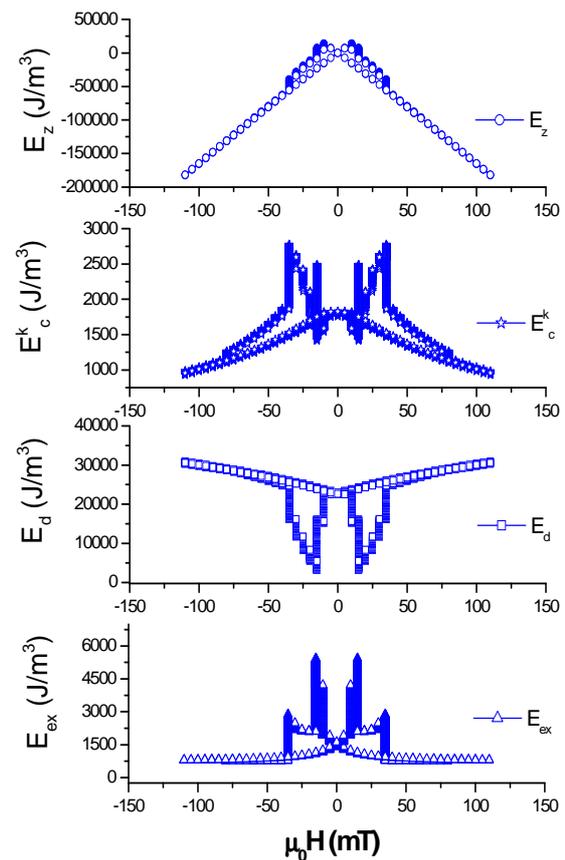


Figura 4. Grafica de Energías del sistema en función del campo aplicado a lo largo del ciclo de histéresis.

Finalmente se puede observar que para valores de magnetización superiores, la energía de intercambio

disminuye abruptamente debido al estado de paralelismo de los vectores de magnetización del material debido al alto campo magnético aplicado que los obliga a alinearse en una sola dirección. Se presenta también disminución abrupta de la energía de anisotropía debido al alineamiento de los vectores de magnetización con el eje fácil del material, que fue dispuesto en esta simulación, paralelo al campo magnético aplicado, por último se observa el aumento máximo de la energía de desmagnetización debido a la presencia de un dominio simple, siendo esta energía la generadora del campo que se opone a la magnetización del material, cabe anotar que debida a la diferencia entre los máximos para las energías tenidas en cuenta en el proceso de simulación, se hace evidente que la energía de desmagnetización juega un papel fundamental en el proceso de magnetización y con este el ciclo de histéresis, sin embargo la formación de las paredes de dominio contiene altos aportes de la energía de intercambio, así como de la energía de anisotropía magnetocristalina.

La energía de Zeeman permanece aproximadamente con un comportamiento lineal durante el proceso, sin embargo presenta una disminución en su valor para los estados de previos a la magnetización total, presentando diferencia con los valores de magnetización remanente debido a la mayor alineación de los vectores de magnetización en este punto del proceso.

4. CONCLUSIONES

Simulaciones de micromagnetismo en películas delgadas de Fe fueron realizadas. El comportamiento magnético en este sistema de escala nanométrica fue analizado, encontrando resultados acordes con los reportados por otros autores, y con los medidos en α -Fe de manera experimental para nuestra película que presenta un ferromagnetismo duro para esta configuración. Se encontró además que tipos de mecanismos de magnetización responden a este tipo de sistema y como la energía de desmagnetización juega un papel primordial en el proceso de histéresis.

5 AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue apoyado por los proyectos “Fabricación y Caracterización de Películas Delgadas Magnéticas Obtenidas por Deposición de Láser Pulsado (PLD)” No.3-07-02 y “Efecto de la Composición de Carbono Sobre las Propiedades Estructurales en Películas Delgadas de Fe-C Producidas por Deposición Por Laser Pulsado (PLD)” No. E6-08-5

6 REFERENCIAS

[1] P. Grunberg, R. Schreiber, P. Yang, M.B. Brodsky, H. Sowers, *Phys. Rev. Lett.* 57 (1986), 2442.

- [2] M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friedrich, J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* 61 (1988), 2472.
- [3] J. Unguris, R. J. Celotta, D. T. Pierce, *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991) 140.
- [4] S.T. Purcell, W. Folkerts, M.T. Johnson, N.W.E. Mc Gee, K. Jager, J. aan de Stegge, W.B. Zeper, W. Honig, *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991) 903.
- [5] Richard P. Boardman, Hans Fangohr, Matthew J. Fairman, Jurgen Zimmermann, Simon J. Cox, Alexander A. Zhukov, Peter A.J. de Groot. *J. Magn. Mater.* 2007; 312 (5): 234-238.
- [6] Boboc A. Rahman I. Z. Rahman M. A. *J. Mater. Proces. Tech.* 2004; 153-154 (6) 785-790.
- [7] Adeyeye A. O. Welland M. E. *J. App. Phys. Lett.* 80 (3) 2002
- [8] Donahue M. J. Porter D. G. OOMMF User's Guide, National Institute of Standards and Technology Gaithersburg, MD, 1999, interagency Report NISTIR 6376.
- [9] Kim Y. K. and Oliveria M., *J. App. Phys.* 74. (2) (1993) 1233-1241.
- [10] S. Cusenza, M. Seibt, P. Schaaf, *J. Appli. Su. Sc.* 254 (2007), 955-960.
- [11] B.D. Cullity, “Introduction to Magnetic Materials”, Addison Wesley Publishing Company Inc, 1972.