1.Título

Modelación micromagnética de nanoestructuras y Propiedades magnéticas de nuevos sistemas atómicos.

2.Resumen

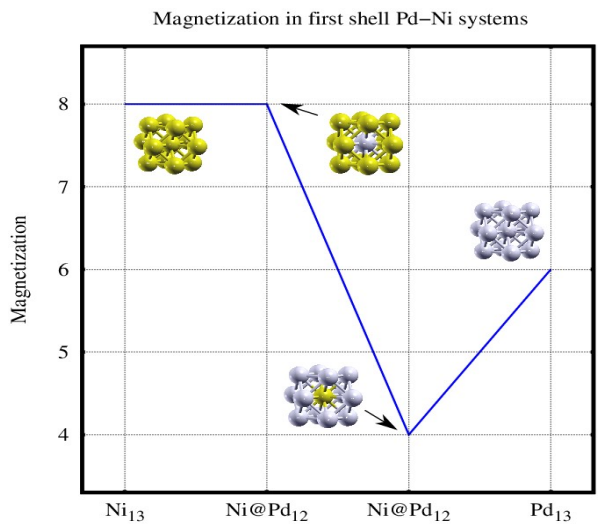
Modelación micromagnética de nanoestructuras. Se estudió el efecto de la microestructura y la geometría en las propiedades magnéticas de nanoestructuras magnéticas (nanotubos, nanocilindros, nanopartículas y microestructuras). Se calcularon las distribuciones de magnetización de equilibrio termodinámico así como los procesos de magnetización que determinan la reversibilidad magnética en nanoestructuras.

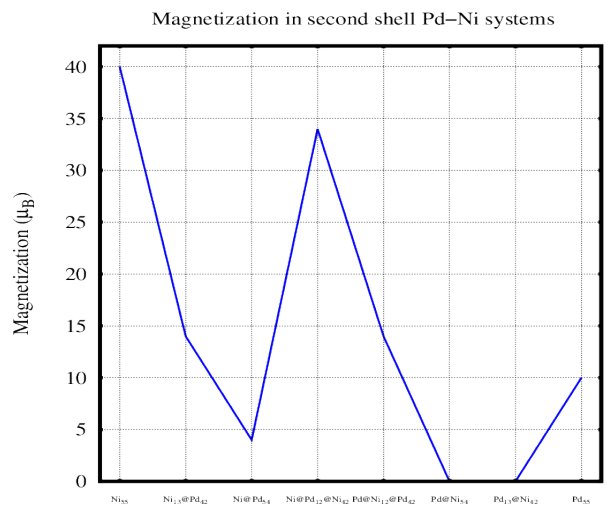
Propiedades magnéticas de nuevos sistemas atómicos. Se estudiaron las propiedades magnéticas de sistemas atómicos novedosos, en particular de nanocúmulos de aleaciones Pd-Ni desde 13 hasta 561 átomos. Se determinaron sus propiedades electrónicas y magnéticas.

3.Breve descripción de avances

Se determinaron los factores morfológicos y estructurales que determinan la magnetización de equilibrio en nanolambres de cobalto, asi como la formación de dominios magnéticos. Los resultados obtenidos hasta el momento indican que la distribución de la orientación de la anisotropía magnética es fundamental para la formación de monodominios y vórtices de flujo magnético, sobre todo en los extremos de los nanoalambes. Por su parte, se analizaron los sistemas Pd y Ni como sistemas aislados, posteriormente se construyeron los modelos de nanocúmulos con 13, 55, 147, 309 y 561 átomos puros. Debido al tipo de asignación de recursos y número de procesadores, en este primera etapa de investigación sólo tomamos en cuenta los primeros dos nanocúmulos (13 y 55) mediante una serie de corridas de 4 modelos que a continuación se describen. Cúmulo Pd13, conjunto de 13 átomos de Pd, donde el centro esta rodeado por 12 átomos en una simetría cúbica centrada en las caras. Análogamente, definimos el cúmulo Ni13. Ahora bien, la combinación de tener en el centro a un átomo de Ni rodeado de 12 átomos de Pd se designó como Ni@Pd12 y análogamente se designó el cúmulo Pd@Ni12. Para los modelos de 55

átomos se construyeron un conjunto de 8, los cuales se definen en función de la esfera de coordinación. La primera esfera de coordinación es igual a 12 átomos y para la segunda esfera de coordinación es de 42 átomos.De esta forma, los modelos generados fueron: Pd55, Ni55 Pd@Ni54, Ni@Pd54, Ni@Pd13@Ni42, Pd@Ni13@Pd42, Ni13@Pd42 y Pd13@Ni42. A continuación se muestran dos gráficas que resumen el trabajo hecho a lo largo de esta etapa:





4. Cálculos realizados.

Se calculó de la energía de Gibbs en modelos de nanoestructuras discretizados mediante elementos finitos, partiendo de la distribución inicial de los momentos magnéticos en cada nodo. El estado de equilibrio de la estructura magnética coincide con el mínimo de G, el cual se calcula respecto a J sujeto a la restricción $|\overline{J}| = J_s$ mediante el método de gradiente conjugado. Debido al proceso de discretización por medio de elementos finitos en el modelo de material, la integral de la energía de Gibbs se hace como una suma sobre todos los elementos de la red. Calculo de la curva de histéresis para los modelos generados de nanoestructuras con propiedades intrínsecas J_s, A, K_1 conocidas, mediante la repetición del proceso de minimización de le energía de Gibbs G de cada modelo para diferentes valores de campo magnético externo.

Se calculó la relajación de la estructura en diversos nanocúmulos Pd, Ni y Pd-Ni. Para aquellos modelos donde se logre la estructura de mínima energía, se calcularon sus propiedades electrónicas y posteriormente sus propiedades magnéticas en función del espín.

5.Software utilizado

Código micromagnético propio, compilado en versión ejecutable desde el servidor principal y código Quantum Espresso ejecutado en versión paralela con 16 procesadores

6. Recursos utilizados

Se utilizaron 7544 hrs de computo.

7.Lista de colaboradores

Dr. José Angel Reyes Retana, Facultad de Ciencias, UNAM.

8. Lista de artículos publicados. Ninguno

9. Lista de alumnos graduados. Ninguno

10. Lista de congresos nacionales e internacionales y participantes: Ninguno