

Formato para la elaboración del informe de avance de investigación

El Informe de avance en formato **PDF**, debe enviarse vía correo electrónico al coordinador de investigación de la Facultad, al líder del grupo de investigación, al decano de la Facultad y a la Unidad de Investigación.

Contenido del informe de avance del proceso investigativo

Información general de proyecto

Código Interno	(no es necesario diligenciar este espacio)	Supervisor/ Director Centro de Investigación	Jairo Andres Coral Campaña
Nombre del proyecto de investigación	Simulación Monte Carlo de propiedades magnéticas en nanoestructuras 2D tipo core/shell	Fecha de inicio del proyecto.	Febrero de 2017
Nombre del Investigador principal	Claudia Milena Bedoya Hincapié	Fecha de finalización del proyecto.	Noviembre de 2017
Nombre de los co-investigadores		Fecha de presentación del informe de avance.	30 de Junio de 2017
Nombre de los auxiliares de investigación /estudiantes de semillero vinculados		Fecha de presentación del informe de cierre	30 de Noviembre de 2017
Grupo de Investigación/Semillero	Ciencia e ingeniería de materiales	Centro de costos asignado	(no es necesario diligenciar este espacio)
Nombre de la línea activa de investigación	Ciencia, tecnología y medio ambiente	Facultad y programa	Departamento de Ciencias Básicas

Contenido

El informe de avance es un documento académico en el cual debe plasmarse el proceso de investigativo que se ha desarrollado. Entre otros, para la elaboración del informe se debe tener en cuenta los siguientes aspectos orientadores:



**INFORME DE AVANCE DE PROYECTO DE INVESTIGACIÓN:
“SIMULACIÓN MONTE CARLO DE PROPIEDADES MAGNÉTICAS
EN NANOESTRUCTURAS 2D TIPO CORE/SHELL”**

✓ **Resumen**

Las nanoestructuras magnéticas core/shell son sistemas de dimensionalidad reducida con interesantes propiedades magnéticas que le confieren aplicaciones en el campo del almacenamiento de información y en la biomedicina; estas propiedades se modifican en función de parámetros dimensionales y de interacción de los átomos que conforman la estructura. En este proyecto se pretende simular a través del método de Monte Carlo las propiedades magnéticas de una nanoestructura core/shell con geometría 2D mediante la variación de las dimensiones del core y shell, la temperatura y las constantes de interacción entre partículas, (core, shell e interfase core/shell) tenidas en cuenta en el Hamiltoniano que describe al sistema.

✓ **Palabras clave**

Nanoestructura, core/shell, magnetismo, interacción magnética, simulación Monte Carlo.

✓ **Problema de investigación con ajustes pertinentes**

Con el propósito de incentivar y fortalecer las actividades de investigación en el Departamento de Ciencias Básicas de la Universidad Santo Tomás, y promover su visibilidad a nivel nacional, se plantea el estudio de las propiedades magnéticas de sistemas nanoestructurados tipo core/shell utilizando la técnica de simulación Monte Carlo. Estos sistemas presentan variaciones en sus propiedades magnéticas cuando ciertos parámetros como la energía de interacción de las partículas, la temperatura y dimensiones del core/shell se modifican, por tanto se pretende dar solución a la pregunta de investigación: ¿Cómo varían las propiedades magnéticas que exhibe una nanoestructura core/shell al modificar sus dimensiones espaciales, la temperatura y la energía de interacción entre sus partículas (core, shell e interfase core/shell)?

✓ **Objetivos de investigación con ajustes pertinentes**

Objetivo general

- Estudiar las propiedades magnéticas de sistemas nanoestructurados 2D tipo core/shell mediante simulaciones Monte Carlo.

Objetivos específicos

- Implementar un código computacional utilizando el método Monte Carlo, por medio del cual se evalúen los valores promedio de los observables físicos de energía, magnetización en función de la temperatura.
- Evaluar la capacidad calorífica y la temperatura de Curie de cada estructura.
- Determinar el comportamiento magnético de nanoestructuras core/shell variando parámetros geométricos.
- Establecer el efecto de las constantes de intercambio del core, shell y la interfase core/shell en las propiedades magnéticas de estas nanoestructuras.

✓ **Marco teórico y ajustes pertinentes (teorías y conceptos abordados)**

Simulación numérica

El uso de herramientas computacionales para la simulación numérica constituyen un camino alternativo y complementario al experimental, para estudiar a un bajo costo las propiedades físicas de un sistema. En una simulación numérica se observa computacionalmente como evoluciona el sistema sometido a interacciones mutuas ya sean magnéticas, ferroeléctricas, mecánicas, eléctricas, etc. El sistema puede ser ideal o tan complejo como se quiera para aproximarle al comportamiento real, comprometiendo en tal caso un mayor costo computacional. Los dos tipos más importantes de técnicas de simulación numérica son los métodos de Dinámica Molecular y los métodos de Monte Carlo. En una simulación de Dinámica Molecular la evolución temporal del sistema es determinista y esta dado por la integración numérica de las ecuaciones de movimiento de Newton o de Lagrange. En los métodos de Monte Carlo se asume que los procesos físicos involucrados son procesos estocásticos cuya evolución permite llegar a una condición de equilibrio del sistema [10].

Método de Monte Carlo

El método de Monte Carlo (MC) surgió originalmente como una técnica para el cálculo de integrales en forma numérica, utilizando para ello números aleatorios en problemas como la evaluación de π . Por esto, el nombre de Monte Carlo proviene de la capital del Principado de Mónaco en la que se usan juegos de azar. Sin embargo, el desarrollo del método como herramienta computacional ocurrió durante la segunda guerra mundial, por influencias de Jhon Von Neumann, Enrico Fermi, Stanislaw Ulam y Nicolás Metrópolis en el Laboratorio Nacional de Los Alamos (EE.UU.), en conjunto a los inicios de las computadoras digitales, para simular la explosión de una bomba atómica. A principios de 1950, aunque hubo un gran interés en la solución de problemas estadísticos, de transporte de radiación, modelamiento económico y otros campos, solo fue posible hasta el incremento de potencia de las computadoras para llevar a cabo cálculos más ambiciosos. A la vez, avances teóricos y la práctica de métodos de reducción de error significaron técnicas más eficaces al emplear una alta velocidad de computo [11]. El desarrollo que más influencio el método MC fue la invención del **Algoritmo Metrópolis** [12], en el cual el cambio entre los múltiples estados de un sistema está determinado por una función de distribución.

Los procesos simulados por MC son estocásticos ya que la secuencia de estados esta determinada por eventos cuya probabilidad de ocurrencia está determinada por números aleatorios generados al azar [11], y la finalidad es el cálculo de las propiedades físicas en el estado de equilibrio termodinámico. Por *equilibrio termodinámico* nos referimos a la invariabilidad, dentro las fluctuaciones estadísticas propias, de las variables termodinámicas que describen el estado de un sistema, y está relacionado con la condición de mínima energía del sistema. Desde el punto de vista de la mecánica estadística, los sistemas simulados por MC describen *ensambles Canónicos*, que por definición, son sistemas cerrados en los que se conserva el número de partículas N y la temperatura T para cada uno de los estados. Los estados calculados cumplen con el *muestreo por importancia* en donde la generación de números aleatorios está condicionado a ciertas funciones de distribución.

Para cada uno de los estados se calcula la energía a través de un Hamiltoniano que describe el sistema e involucra las principales contribuciones energéticas del mismo. El cambio en la energía establece la evolución entre los diferentes estados del sistema por medio de cadenas de Markov. En las *cadenas de Markov* la probabilidad de que el sistema esté en un estado dado depende solamente del estado previo y es independiente de la historia de dicho sistema.



Algoritmo Metrópolis

Es un proceso en el cual se construye la trayectoria aleatoria (cadena de Markov) de un sistema dado, de tal modo que la probabilidad de que el sistema se encuentre en un punto en particular del espacio de configuraciones es proporcional al factor de Boltzmann $e^{-\Delta E/k_B T}$, donde ΔE corresponde a la diferencia de energía entre dos estados, k_B es la constante de Boltzmann y T es la temperatura absoluta. El algoritmo de Metrópolis para un sistema de N puntos de red involucra los siguientes pasos elementales [13]:

1. Se asigna una configuración inicial al sistema.
2. Se determina una configuración transitoria.
3. Se calcula el cambio de energía $\Delta E = E_2 - E_1$ entre el estado transitorio e inicial.
 - Si $\Delta E \leq 0$ se acepta el estado transitorio, y se regresa al paso 2.
 - Si $\Delta E > 0$, se calcula la probabilidad de Boltzmann $W = \exp(-\Delta E/k_B T)$
 - Se genera un número aleatorio r en el intervalo (0,1).
 - Si $r \leq W$ se acepta la nueva configuración, de lo contrario, se mantiene el estado inicial.
4. Luego de recorrer los N puntos, se guarda la configuración obtenida y se regresa al paso 1.
5. Se repiten los pasos 1 a 4 de acuerdo al número de pasos de Monte Carlo (mcs), que permitirán un número de configuraciones suficientes para llegar al equilibrio del sistema.
6. Se calculan los promedios de las propiedades u observables de interés.

Magnetismo

El magnetismo se explica por el hecho de que un electrón en un átomo no solo se mueve en su órbita, sino que además gira alrededor de un eje propio (modelo clásico), lo cual da lugar a la propiedad conocida como espín (ver figura 1).

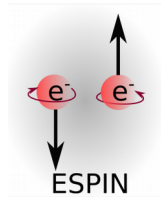


Figura 1. Modelo clásico del concepto de espín

El magnetismo en los materiales se clasifica en las siguientes categorías:

- **Ferromagnetismo.** Se produce un fuerte acoplamiento entre átomos vecinos para formar grandes grupos de átomos cuyos espines están alineados, incluso con aplicación de campos magnéticos externos débiles, formándose zonas con concentraciones de espines uniformemente en una misma dirección y sentido conocidas como dominios magnéticos (ver figura 2). Existe una temperatura a la cual los materiales ferromagnéticos pierden sus propiedades pasando a un estado paramagnético, conocida como **temperatura de Curie**.
- **Ferrimagnetismo.** En este fenómeno los espines están ordenados en la misma dirección y en sentido opuesto, reduciendo la magnetización que presentan (ver figura 2).
- **Antiferromagnetismo.** Los materiales que muestran este fenómeno presentan una baja respuesta magnética o nula a causa la disposición de los espines en la misma dirección y



en sentido opuesto (figura 2). La temperatura por encima de la cual desaparece el estado antiferromagnético pasado a uno paramagnético es llamada **temperatura de Neel**.

- **Paramagnetismo.** Es un estado en el que interacción entre los espines es pequeña mostrando espines orientados al azar. En presencia de un campo magnético externo, los espines exhiben un alineamiento parcial en la dirección y sentido del campo (ver figura 2).

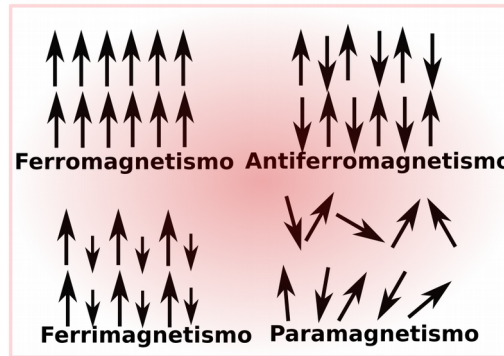


Figura 2. Tipos de magnetismo: ferrimagnetismo, antiferromagnetismo, ferrimagnetismo, y antiferromagnetismo (fuente propia)

- **Diamagnetismo.** Estado en el cual la magnetización es débil y ocurre en sentido opuesto al campo magnético aplicado, generando la repulsión del material.
- **Superparamagnetismo.** Es una forma de magnetismo que ocurre en nanopartículas ferromagnéticas o ferrimagnéticas, y es observado por debajo de la temperatura de Curie. En ausencia de un campo magnético externo las nanoestructuras presentan un espín cero.

La **magnetización** se define en la cantidad de espines por unidad de volumen. Es indica que los materiales antiferromagnéticos no presentan una magnetización neta a diferencia de los materiales ferromagnéticos.

Las aplicaciones de los materiales magnéticos en tecnologías del almacenamiento de información emplean dos intervalos de temperatura: el primero comprende desde temperatura ambiente a un punto de compensación magnética, el cual es conocido como **temperatura de compensación**, y el otro desde el punto de compensación a la temperatura de Curie. La temperatura de compensación es aquella en la cual la magnetización total desaparece por debajo de la temperatura crítica [14].

Modelos teóricos para la simulación de las propiedades magnéticas

✓ Metodología (instrumentos diseñados o empleados, población o muestra)

- A. Revisión bibliográfica. Comprende la búsqueda de información en bases de datos, de artículos internacionales y locales, tesis y libros en relación a la temática: nanoestructuras core/shell.
- B. Construcción de muestras core-shell con geometría 2D y del código para la simulación de las propiedades magnéticas.



C. Variación del tamaño de la muestra y estimación del número mínimo de pasos Monte Carlo (Mcsmax) para determinar la condición de equilibrio basados en consideraciones de energía.

D. Simulación de muestras de diferentes tamaños y de la temperatura para analizar su efecto en el comportamiento de las propiedades magnéticas.

E. Variación de las constantes de intercambio del core (J_c), del shell (J_s) y de la interfase core/shell (J_{int}) en el Hamiltoniano para analizar su efecto en el comportamiento de las propiedades magnéticas.

F. Análisis de los resultados obtenidos de la simulaciones comparándolos con los disponibles en la literatura.

G. Escritura y redacción de un artículo científico producto de la investigación.

H. Divulgación de los resultados de la investigación con la participación en un evento científico.

✓ **Avance alcanzado con respecto al cronograma inicial y ajustes pertinentes**

Las actividades realizadas hasta la fecha están en concordancia con el cronograma de actividades planteado, según la Tabla 1.

Tabla 1. Cumplimiento de actividades planteadas en el cronograma de proyecto

Actividad	Mes	Actividades desarrolladas	Porcentaje de cumplimiento
1. Revisión bibliográfica.	Febrero-Octubre	✓	70 %
2. Construcción de muestra core-shell con geometría 2D.	Febrero-Marzo	✓	100 %
3. Validación del modelo computacional empleado.	Abril-Mayo	✓	100 %
4. Variación del tamaño de la muestra y de la temperatura en las simulaciones computacionales.	Junio-Julio	✓	70 %
5. Variación de las constantes de intercambio en el Hamiltoniano.	Julio-Agosto		
6. Análisis de resultados.	Junio-Septiembre	✓	40 %
7. Redacción de artículo.	Septiembre-Octubre		
8. Divulgación de resultados.	Octubre		

En la actividad 3 se realizó el siguiente ajuste: se cambió "Variación del tamaño de la muestra para el cálculo del número mínimo de pasos Monte Carlo" a una actividad planteada de forma más general a "validación del modelo computacional empleado". De igual manera, se



modificaron los meses desplazándolos un mes respecto a los planteados inicialmente, ya que la ejecución del proyecto inicio en Febrero y no en Enero.

✓ **Logros generales de la investigación hasta la fecha**

Los resultados obtenidos hasta la fecha frente a las actividades mostradas en la tabla 1 se pueden sintetizar en lo siguiente:

1. *Revisión bibliográfica.* Se realizó la búsqueda bibliográfica de los artículos comprendidos en el tema de “nanoestructuras core/shell”, principalmente de los últimos cinco años. Esta revisión permitió identificar que el tema de nanoestructuras core/shell es de gran interés actual por sus potenciales aplicaciones en dispositivos de almacenamiento y en biomedicina.
2. *Construcción de muestra core-shell con geometría 2D.* La construcción de la muestra y su simulación se llevaron a cabo empleando el lenguaje de programación C++. Para la construcción de la muestra bidimensional se consideró que los espines únicamente describen dos posibles direcciones a lo largo del eje z, es decir arriba o bajo, en un modelo llamado *modelo de Ising*. Por tanto, a cada punto de la red se le asignó un espín de valor 1 o -1, de manera aleatoria. Cabe anotar que la muestra presentada en la figura 2 únicamente presenta una dimensión del core de 10 y del shell de 20 en unidades de parámetro de red, ya que se estudiaron diferentes dimensiones a lo largo de las simulaciones.

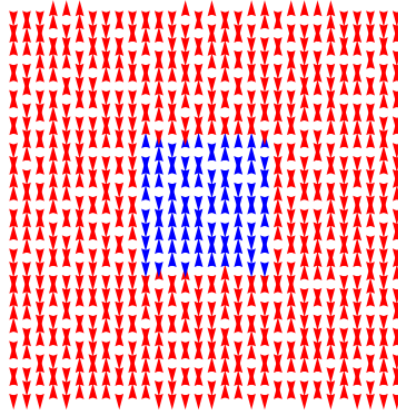


Figura 2. Muestra core/shell bidimensional construida para la simulación computacional, en la cual el core (zona azul) tiene una dimensión de 10 y el shell (zona roja) de 20 en unidades de parámetro de red

3. *Validación del modelo computacional empleado.*

Para la obtención de las propiedades magnéticas en función de parámetros físicos como la temperatura, se aplicó al sistema el método Monte Carlo. Este consistió en que a partir de una configuración inicial de espines generada aleatoriamente, se recorren todos los sitios de la red (uno a la vez) y se define una configuración de espín transitoria para cada uno, posteriormente a través del cálculo de la energía inicial E_i , transitoria E_t y la variación de la energía $\Delta E = E_t - E_i$ se acepta o no el cambio en la configuración de espín, si esto involucra



un estado de energía más estable (de menor energía). Este proceso se repite cierta cantidad de veces conocido como “pasos Monte Carlo”, en cada paso se acumulan observables físicos como la energía, la magnetización del core, magnetización del shell, la magnetización total, entre otras cantidades. Por último, a consecuencia de la que energía del sistema varía en función del número de pasos Monte Carlo, se estableció un valor de corte a partir del cual se considera que la energía del sistema alcanza su equilibrio termodinámico (ver figura 3), siendo posible desde ese momento acumular los observables antes mencionados para obtener su promedio termodinámico.

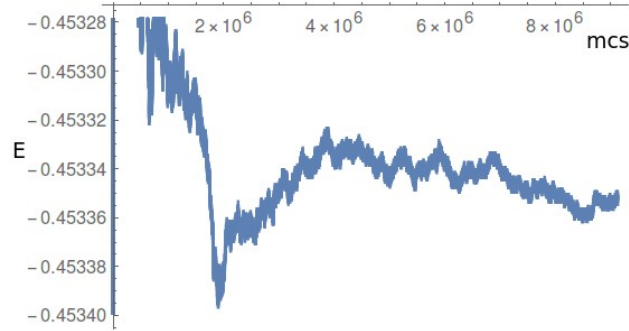


Figura 3. Minimización de la energía del sistema en función del numero de pasos Monte Carlo para una temperatura fija

La energía inicial y transitoria se calculó mediante el Hamiltoniano del sistema, que es una expresión matemática que incluye las contribuciones básicas de este a las propiedades magnéticas:

$$H = -J_c \sum_{ij} s_i s_j - J_s \sum_{kl} \sigma_k \sigma_l - J_i \sum_{ik} s_i \sigma_k \quad (\text{Ecuación 1})$$

donde los términos s y σ representan los espines del core y del shell, respectivamente. Las sumatorias se realizan sobre los primeros vecinos, de forma que el primer término consta de las interacciones entre los espines del core, el segundo de las interacciones del shell y el último de los ubicados en la interfase (core-shell). Las constantes J_c , J_s y J_i indican las constantes de intercambio para los espines del core, shell y de la interfase, respectivamente. El valor de estas constantes determina el tipo de interacción entre los espines, si su valor es negativo determina una interacción antiferromagnética, al contrario, si es positiva, la interacción es ferromagnética. Para las simulaciones los espines s y σ asumen valores de 1 y -1, mientras que las constantes de interacción se fijaron 1 ($J_c=J_s=J_i=1$), indicando una interacción ferromagnética para la muestra core/shell.

4. Variación del tamaño de la muestra y de la temperatura en las simulaciones computacionales.

El estudio de las propiedades magnéticas se realizó variando el tamaño del core de la muestra en valores de 6, 10, 14, 18, 22 y 26, para un tamaño de la muestra fijo en 30 en unidad de parámetro de red, según se observa en la figura 4. Como resultado se obtuvieron curvas de energía promedio (figura 5), magnetización del core y del shell y magnetización total (figura 6).

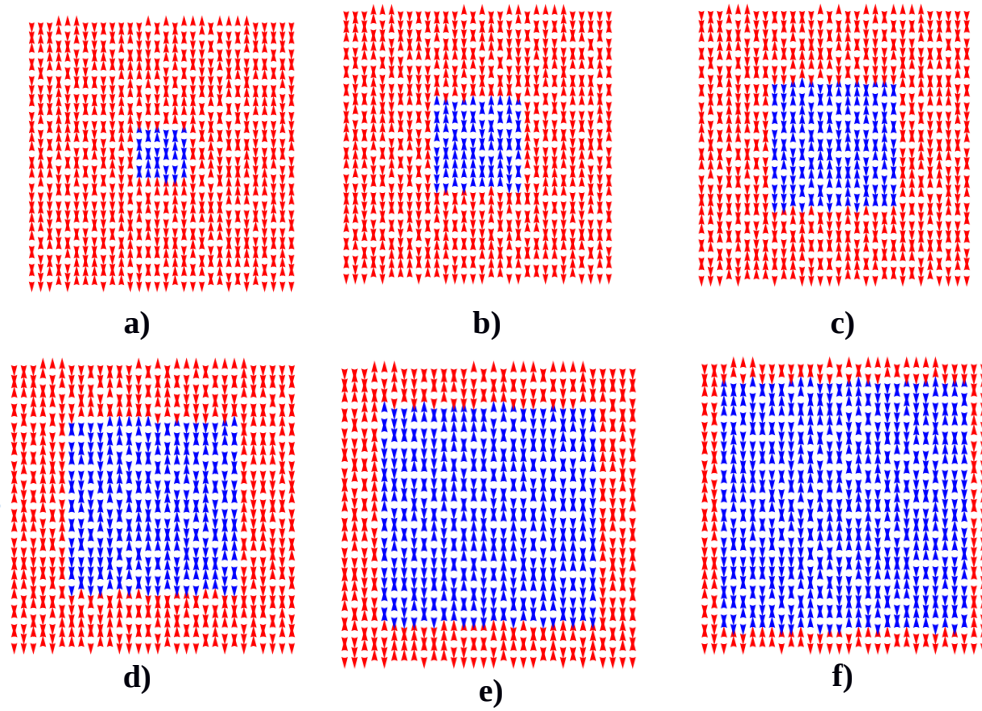


Figura 4. Variación del tamaño del core de la muestra: a) 6, b) 10, c) 14, d) 18, e) 22, f) 26 en unidades de parámetro de red

En la figura 5 se presenta la variación de la energía por sitio (es decir la energía total promediada en el número de pasos de corte, se dividió entre el total de sitios de la muestra) en función de la temperatura para diferentes tamaños del core L_c . En esta figura la temperatura, se muestra en términos del producto de la constante de Boltzmann k por la temperatura T cuya unidad es de energía. En la simulación se empleó $k=1$ en unidad adimensional, así que T tiene unidades de energía reducida.

En la figura 5 se observa a altas temperaturas que la energía por sitio es alta, lo cual se debe a que ocurre una configuración orientada aleatoriamente por el desorden causado por la temperatura, mientras que a baja temperatura el ordenamiento de los espines ocurre por el mayor efecto de la interacción magnética frente a la térmica, llevando a una minimización de la energía hasta el valor aproximado de -2. El cambio en concavidad de la curva se presenta debido a transición de fase magnética, conocida como *temperatura crítica* o *temperatura de Curie*.

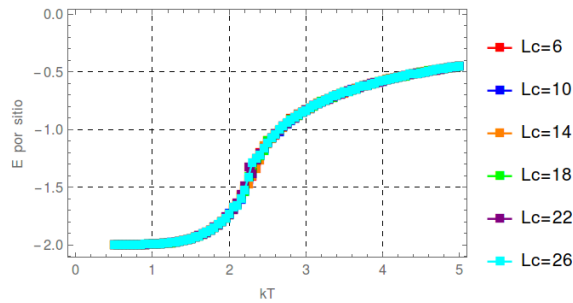


Figura 5. Variación de la energía por sitio en función del tamaño del core L_c de la muestra para un tamaño de la muestra (30 en unidades de parámetro de red)



En la figura 6 se puede observar que las propiedades magnéticas se ven fuertemente mas influenciadas por la variación del tamaño del core que del shell. Esto se puede evidenciar en la figura 6 a) en la cual al incrementar el tamaño del core y existir por tanto mayor cantidad de espines en esta ubicación, la magnetización también aumenta, siendo más pronunciada y abrupta la caída en la temperatura de Curie.

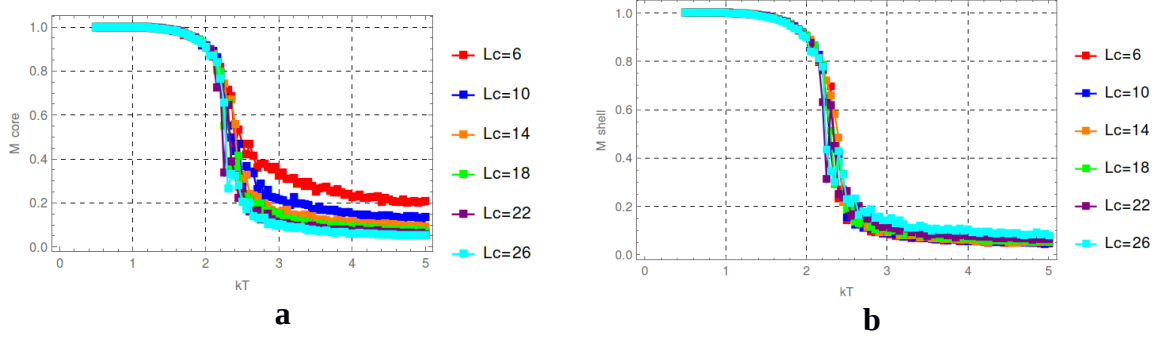


Figura 6. Variación de la magnetización: **a)** del core (M core) y **b)** del shell (Mshell), en función del tamaño del core Lc de la muestra para un tamaño de la muestra fijo (30 en unidades de parámetro de red)

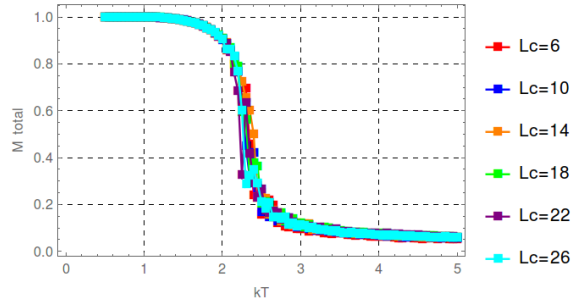


Figura 7. Variación de la magnetización total en función del tamaño del core Lc de la muestra para un tamaño de la muestra fijo (30 en unidades de parámetro de red)

Para la zona crítica es de interés mencionar que el modelo empleado para la orientación de los espines corresponde al modelo de Ising, cuya solución fue propuesta por el químico-físico noruego Lars Onsager, definiendo que en la transición de fase, la temperatura crítica se comporta de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$T_c = \frac{2J}{k \log(\sqrt{2} + 1)} \quad (\text{Ecuación 2})$$

donde al evaluar la ecuación 2 para los parámetros empleados en la simulación: $J=1$ y $k=1$, se obtiene $T_c \approx 2.26$, el cual es el valor en el que se presenta la transición de fase en las simulaciones realizadas. De las figuras 6 y 7 se puede observar que esta temperatura de crítica no se desplaza por el efecto de variación en la dimensión del core, lo cual se podría atribuir a que toda la muestra tiene propiedades ferromagnéticas, por tanto un cambio en la dimensión del shell



o del core para un tamaño de muestra constante no mostrará cambios en sus propiedades magnéticas. Así mismo en estas figuras, la forma de la gráfica sugiere en todas una transición a bajas temperaturas de un estado ferromagnético a un estado de pequeña o nula magnetización que corresponde al estado paramagnético.

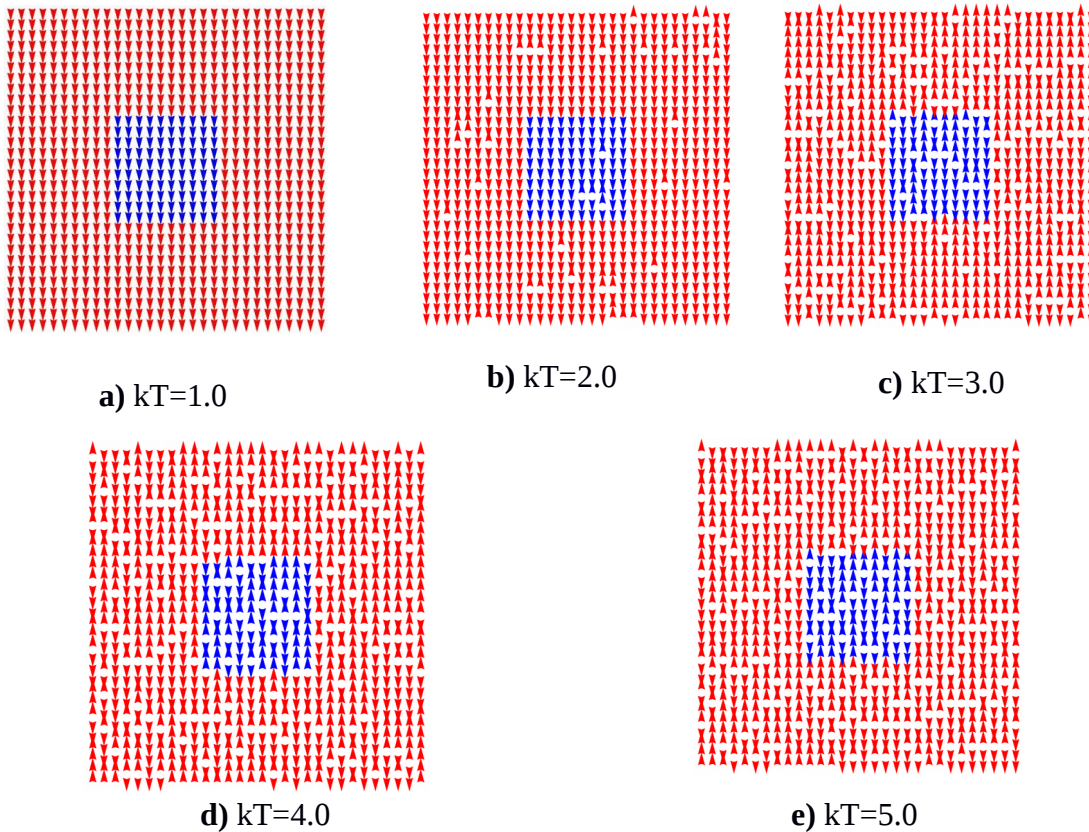


Figura 8. Variación de la orientación del espín en función de la temperatura kT **a)** 1.0, **b)** 2.0, **c)** 3.0, **d)** 4.0 y **e)** 5.0

Por último, en la figura 8 se presenta la orientación de los espines para diferentes temperaturas kT . En estas se puede apreciar que a bajas temperaturas por debajo de la temperatura crítica, es decir para kT igual a 1 y 2, los espines presentan un alto orden referido a un estado ferromagnético. Mientras que para temperaturas superiores (kT de 3, 4 y 5) se observa un estado de desorden referido como un estado paramagnético, el cual es favorecido por la temperatura que tiene un mayor efecto que la interacción magnética.

✓ **Dificultades enfrentadas en la realización del proyecto hasta la fecha**

En el desarrollo de este proyecto de investigación ha enfrentado a la dificultad del tema planteado, ya que este abarca un modelo básico, será necesario para borrador del artículo a someter a publicación, realizar modificaciones al este para que sus resultados sean publicables.

✓ **Observaciones de los supervisores**

Informe de producción investigativa

Tipo de productos derivados del avance del proyecto a la fecha de acuerdo a los compromisos adquiridos: movilidades (movilidades, publicaciones, alianzas /redes establecidas, otro tipo de productos.

Se debe diligenciar la siguiente tabla de relación de productos y relacionar los anexos correspondientes:

Tipo de producto (Artículo, ponencia, evento, libro, capítulo de libro, etc.)	Nombre de producto (Indique título del artículo, ponencia, evento, libro, capítulo de libro, etc.)	Fecha de revisión, publicación o presentación (Indique fechas de publicación, revisión o presentación en evento del producto. Si aún no se tiene el producto final, indique la fecha de entrega)	Nombre de la revista/libro o evento en que se presenta el producto. (Si el producto no se ha finalizado indicar el medio en el que se proyecta la publicación o divulgación)	Modo de verificación (ISSN, ISBN, página web, etc. Si el producto no se ha finalizado, escribir "no se ha finalizado" en esta columna.)	Número de anexo (Incluya en los anexos, de manera ordenada el soporte escaneado que demuestre la existencia del producto o el envío a revisión -asigne un número a cada anexo y relaciónelo en esta columna. Si el producto no se ha finalizado, escribir "no se ha finalizado" en esta columna)
Ponencia de póster	Simulación de propiedades magnéticas de nanoestructuras core/shell mediante el método Monte Carlo	Mayo 26 de 2017	Cuarto Coloquio Doctoral	Certificado de asistencia	1

*Tenga en cuenta la tipología de productos de Colciencias.

Contenido del informe financiero

Por favor relacione los rubros que le fueron asignados y lo que se ha ejecutado hasta la fecha

Horas nómina	Investigador	Número de horas asignadas	Escalafón
	Claudia Milena Bedoya Hincapié	180	Dos
Otros rubros	Especifique el concepto	Valor del concepto aprobado	Valor del concepto ejecutado
	Publicaciones o productos de investigación	400.000	0



	Movilidad académica	2.000.000	0