

Movilidad de interfaces sometidas a campos externos

G.M.Buendía¹, P.A.Rikvold² y M.Kolesik³

¹Departamento de Física. Universidad Simón Bolívar, Caracas 1080

²Department of Physics, Florida State University, Tallahassee, FL 32306-4350

³Slovak Academy of Sciences, Bratislava y Optical Science Center, University of Arizona, Tucson, Arizona 85721

Resumen

En este trabajo estudiamos la estructura microscópica y la velocidad de propagación de una interfase sólido sobre sólido en un modelo de Ising, llevada fuera del equilibrio por un campo magnético. La interfase se estudia con una simulación de Monte Carlo y con una aproximación analítica no-lineal tipo campo medio. El sistema evoluciona con una dinámica estocástica que incluye una barrera de energía. Encontramos que la velocidad y la población de espines alrededor de la interfase dependen del campo aplicado y de la temperatura. El modelo teórico reproduce bastante bien el comportamiento general de la interfase. Sin embargo, los resultados de Monte Carlo indican que la simetría entre las poblaciones de espines enfrente y detrás de la interfase se rompe, especialmente a bajas temperaturas y altos campos, indicando que en estos límites las correlaciones de corto alcance, no incorporadas en la teoría, son particularmente relevantes.

Palabras clave: Interfase, dinámica estocástica, población de espines

Interface mobility in the presence of a external driven field

Abstract

In this work we study the microscopic structure and the stationary propagation velocity of a solid on solid interface in an Ising model, which is driven far from equilibrium by a magnetic field. The interface is analyzed by a Monte Carlo simulation and by an analytic nonlinear response approximation. The system evolves under a stochastic dynamic that includes a local energy barrier. We found that the velocity and the average spin population of the interface depend on the applied field and the temperature. The theoretical model reproduces quite successfully the general behavior of the interface. However, the Monte Carlo results indicate that the symmetry of the spin populations on the leading and trailing edges of the interface is broken, particularly at low temperatures and high fields, indicating that short range correlations, not included in the theory, are relevant in these limits.

Key words: Interface, stochastical dynamic, spin population

Introducción

Los procesos que ocurren en las superficies e interfaces de los materiales juegan un papel fundamental en la naturaleza y tienen innumerables aplicaciones tecnológicas en áreas tales como la electrónica, el diseño de dispositivos ópticos y magnéticos, procesos de catálisis, etc (1). Muchas de las propiedades más importantes de las

interfases, tales como la movilidad y la actividad química y catalítica, dependen de su estructura microscópica (2). Es crucial para el desarrollo de estas tecnologías ampliar nuestro conocimiento sobre la estructura y los procesos fundamentales que ocurren en las superficies e interfaces.

Debido a que, en la mayor parte de los casos, el mecanismo real de movimiento de una interfase es desconocido, un método estándar para obtener información sobre estos sistemas es construir un modelo estocástico que reproduzca de la forma más cercana posible las características esenciales del sistema real. Hasta hace poco se creía que, al igual que en los sistemas en equilibrio, todos los algoritmos dinámicos que respetan las mismas leyes de conservación y que satisfacen balance detallado, conducen esencialmente a los mismos resultados físicos. Sin embargo, estudios recientes indican que este no es el caso para sistemas fuera del equilibrio (3), y que la microestructura de interfaces sometidas a campos externos, depende fuertemente de la dinámica seleccionada para evolucionar el sistema (4). Estos estudios resaltan la necesidad de escoger la dinámica más apropiada de acuerdo a las características del sistema físico a analizar.

En este trabajo presentamos un estudio del crecimiento de una interfase en presencia de un campo externo. La interfase está descrita por el modelo de sólido sobre sólido (SOS) de Burton-Cabrera-Frank (5). La dinámica seleccionada para la evolución del sistema es la llamada aproximación dinámica de transición en dos pasos, TDA (6). Esta dinámica incluye una barrera de energía local, que representa un estado de transición insertado entre los estados inicial y final, y es apropiada para simulaciones de modelos de Ising o de gases en retículos, en los cuales los estados discretos representan configuraciones de alta probabilidad en un potencial continuo. Ejemplos de estos casos los constituyen modelos de difusión en potenciales corrugados y los procesos de relajación de sólidos moleculares biestables. (6).

Modelo y Dinámica

Las interfaces SOS están descritas por un Hamiltoniano de Ising,

$$= - \sum_{x,y} s_{x,y} (J_x s_{x+1,y} + J_y s_{x,y+1} + H) \quad (1)$$

La interfase se define fijando $s_{x,y}=+1$ y $s_{x,y}=-1$ para valores grandes negativos y positivos de y , respectivamente. Escogemos H positivo, tal que la interfase en promedio se mueve en el sentido de y positivo (ver Fig. 1). La interfase es descrita por una función entera, $h(x)$, tal que la altura de cada escalón se define como $\delta(x)=h(x+1/2) - h(x-1/2)$, evaluada en valores enteros de x . En la Fig.1 se muestra un segmento de una interfase SOS. Los espines del modelo de Ising en 2-d pueden clasificarse en 18 clases distintas identificadas por jks , donde j y k son los números de enlaces rotos entre los espines y sus vecinos cercanos en x e y respectivamente, y s es el valor del espin (± 1) (7). Cuando un espín cambia de $-1(+1)$ a $+1(-1)$ la columna correspondiente de la interfase avanza (retrocede) una unidad en la dirección y . Solo espines del tipo $01+$, $11+$, $21+$ pueden invertirse en una superficie SOS. La inversión de espines de otras clases da lugar a burbujas y a precipicios que no entran en la definición de SOS (4). La aproximación al equilibrio (la fase con todos los espines positivos con la interfase en el infinito) se logra a través de una dinámica no-conservativa que satisface balance detallado. La dinámica considerada en este caso es la TDA, que incluye una barrera de energía entre los estados final e inicial. La energía de transición es dada por $E_t = (E_f + E_i)/2 + \Delta$, donde E_f y E_i son las energías final e inicial, y Δ es la barrera microscópica de energía (6). Esta dinámica está definida por las transiciones de probabilidad $W(s_{x,y} \rightarrow -s_{x,y})$,

$$W_{TDA} = \left\{ 1 + \exp \left[\frac{\delta E(jk\pm)}{k_B T} \right] \right\}^{-1} \quad (2)$$

El sistema va a ser analizado mediante una aproximación no-lineal tipo campo medio, y por una simulación de Monte Carlo. La aproximación no-lineal asume que las alturas de los escalones individuales son estadísticamente independientes. El número promedio de espines pertenecientes a cada clase, la población de espines $\langle n(jks) \rangle$, se obtiene multiplicando las densidades (independientes) de probabilidad (pdf) de las alturas los escalones, $\delta(x)$ y $\delta(x+1)$. Las pdf se calculan a partir de la energía de interacción correspondiente a $|\delta(x)|$ ligaduras horizontales rotas entre los espines en las columnas centradas en $(x-1/2)$ y en $(x+1/2)$. En esta aproximación, $\langle n(jk+) \rangle = \langle n(jk-) \rangle$, es decir el número promedio de espines de cada tipo es igual en ambos lados de la interfase. Una descripción detallada de esta aproximación se encuentra en (4). La contribución a la velocidad promedio en la dirección y de los sitios con espines de tipo $jk+$ y del tipo $jk-$ es

$$\langle v_y(jk) \rangle = W(jk) \cos \phi \quad (3)$$

donde $\delta E(jk\pm)$ es el cambio de energía asociado a la inversión de un espín del tipo $jk\pm$. La velocidad promedio de propagación perpendicular a la interfase es

$$\langle v_p(T, H) \rangle = \cos \phi \quad (4)$$

donde ϕ es el ángulo promedio entre la interfase y el eje x , $\langle \delta(x) \rangle = \tan \phi$.

Resultados

Los cálculos numéricos se realizaron con el algoritmo “n-fold way” en tiempo continuo (4) con $L_x=10.000$ y $J_x=J_y=J$. Las mediciones se hicieron a dos temperaturas, $T=0.2T_c$ y a $T=0.6T_c$ (donde $T_c=2.269J$ es la temperatura crítica del modelo de Ising en una red cuadrada). Escogemos $\Delta=2J$, estudios previos han sido realizados con barreras microscópicas mucho menores (8), en este trabajo se quiere verificar que la teoría no-lineal funciona para barreras de mayor tamaño. En la Fig. 2 mostramos la velocidad promedio de propagación perpendicular a la interfase. El acuerdo entre los resultados de Monte Carlo y la teoría no-lineal es excelente, especialmente a la temperatura más alta. La dependencia de la velocidad con el campo es más suave a mayor temperatura. Como es típico en sistemas que evolucionan con este tipo de dinámica la velocidad no crece indefinidamente al aumentar el campo, si no que alcanza un valor límite (4,8).

En las Figs. 3 y 4 mostramos las poblaciones promedios de los distintos tipos de espines, a $T=0.2T_c$ y $0.6T_c$ respectivamente. Note que a medida que el campo aumenta, los resultados de Monte Carlo indican una clara diferencia entre las poblaciones enfrente y detrás de la interfase, diferencia que no está contemplada en la teoría. Esta diferencia es mas apreciable a bajas temperaturas, y está asociada a las correlaciones de corto alcance entre los escalones vecinos que no son tomadas en cuenta por la aproximación tipo campo medio. Este fenómeno es común en superficies sometidas a un campo externo (8, 9, 10).

Conclusiones

Hemos realizado un estudio de la microestructura de una superficie SOS llevada fuera del equilibrio por un campo constante. La dinámica utilizada incluye una barrera local de energía. El estudio se hizo de dos formas independientes: por simulaciones de Monte Carlo y por una teoría no-lineal de campo medio. Calculamos la velocidad de la interfase y las poblaciones promedio de las distintas clases de espines, en función del campo aplicado, para dos temperaturas distintas. Encontramos que la teoría utilizada reproduce con bastante éxito la velocidad de la interfase, que no crece indefinidamente si no que tiene un valor límite, y razonablemente bien el comportamiento de las poblaciones de espines. Los resultados de Monte Carlo muestran que el sistema presenta una asimetría entre las poblaciones enfrente y detrás de la interfase, efecto que no aparece en los resultados analíticos. Esta asimetría es más pronunciada a bajas temperaturas, y es un indicio de la existencia de correlaciones de corto alcance, que no son tomadas en cuenta por la aproximación tipo campo medio que no incluye interacciones entre los escalones vecinos en la superficie.

Referencias

1. DUKE C.B, Y PLUMIER E.W, Eds., *Frontiers in Surface and Interface Science* (North-Holland, Amsterdam) 2002.
2. CASTNER D.G Y RATNER B.D, *Surf. Sci.* 500, **28**, 2002.
3. PARK K, BUENDÍA G.M, RIKVOLD P.A, Y NOVOTNY M.A, *Phys.Rev.Lett* 2004; BUENDÍA G.M, RIKVOLD P:A, PARK K Y NOVOTNY M.A, *J.Chem.Phys.* 121, 4193, 2004.
4. RIKVOLD P.A. Y KOLESIK M, *J.Stat.Phys.* 100, 377, 2000; *Phys.Rev.E* 66, 066116 (2002)
5. BURTON W.K, CABRERA N, Y FRANK F.C, *Phil.Trans.Roy.Soc.* (London) Ser. A 243, 299 , 1951.
6. ALA-NISSILA T Y YING S.C, *Prog.Surf.Sci.* 39, 227 (1992); ALA-NISSILA T. FERRANDO R, Y YING S.C, *Adv.Phys.* 51, 949 (2002).
7. SPOHN H, *J.Stat.Phys.* 71, 1081, 1993.
8. BUENDÍA G.M, RIKVOLD P.A. Y KOLESIK M, enviado a publicación (2005).
9. NEERGAARD J Y DEN NIJS M, *J.Phys. A* 30, 1935, 1997.
10. PIERRE-LOUIS O, D'ORSOGNA M. R., Y EINSTEIN T. L, *Phys. Rev.Lett.* 82, 3661, 1999.

Figuras

Fig.1 Segmento de una interfase SOS, $y=h(x)$, entre una fase con magnetización positiva y una fase con magnetización negativa. Sitios representativos de las diferentes clases de espines están indicados con la notación jks descrita en el texto.

Fig.2 Velocidad perpendicular promedio $\langle v_p \rangle$ en términos de H/J para $\phi=0$. Los resultados de MC se muestran por símbolos, círculos para $T=0.2T_c$ y cuadrados para $T=0.6T_c$. Las curvas continuas muestran los resultados analíticos.

Fig.3 Población promedio de espines, $\langle n(jks) \rangle$ en términos de H/J para $\phi=0$. Los resultados de Monte Carlo se indican con símbolos, las curvas continuas muestran los resultados analíticos. a) $T=0.2T_c$ b) $T=0.6T_c$. La diferencia entre las poblaciones de espines $jk+$ y $jk-$ observada en los resultados de Monte Carlo es un indicio de la existencia de interacciones de corto rango no tomadas en cuenta por la teoría.