

Efecto de la rugosidad interfacial en el comportamiento magnético de nanopartículas *core/shell*

Juan David Alzate Cardona*

2 de noviembre de 2016



Universidad Nacional de Colombia,
Sede Manizales

*jdalzatec@unal.edu.co

Índice

1. Introducción	3
2. Antecedentes y justificación	5
3. Marco teórico y estado del arte	7
4. Planteamiento del problema	9
5. Objetivos	11
5.1. Objetivo general	11
5.2. Objetivos específicos	11
6. Metodología	11
7. Cronograma de actividades	13
8. Presupuesto	13

1. Introducción

Los materiales magnéticos han atraído interés por parte de la comunidad científica por sus innumerables aplicaciones. El desarrollo de nuevas tecnologías y métodos ha permitido explorar sistemas nanométricos, dando al magnetismo nuevas oportunidades desde aplicaciones potenciales como grabación magnética de alta densidad hasta aplicaciones biomédicas [1, 2, 3, 4, 5]. Desde entonces, ha surgido una nueva tecnología conocida como *espintrónica*.

El dominio de nuevas técnicas experimentales ha permitido la construcción de nanomateriales heteroestructurados, en los que la interfaz que separa los diferentes tipos de materiales aporta ventajosas propiedades al sistema. Para controlar dichas propiedades, es necesario aprender a manipular su comportamiento magnético. A esta escala, los efectos de superficie comienzan a ser notorios debido al incremento de la relación superficie-volumen [6]. Otra característica interesante de estos sistemas es la anisotropía magnetocristalina, la cual favorece la alineación de la magnetización a lo largo de una o unas direcciones cristalográficas [7].

Una de las más interesantes interfaces de estudio es aquella que se forma entre un ferromagneto y un antiferromagneto [8, 9, 10, 11, 12, 13, 14]. Un ferromagneto, por naturaleza, posee un intercambio magnético alto y baja anisotropía magnetocristalina [15].

El alto intercambio magnético establece un orden, haciendo que los momentos magnéticos permanezcan alineados paralelamente. Sin embargo, debido a que la anisotropía magnetocristalina es baja, la magnetización neta es máxima pero no tiene una dirección preferencial. Por otro lado, un antiferromagneto posee una anisotropía grande y, por lo tanto, direcciones preferenciales bien definidas [2]. Es así que una heteroestructura formada por un ferromagneto y un antiferromagneto puede tener un comportamiento ferromagnético con una dirección definida [15]. En este tipo de estructuras surge un fenómeno conocido como *Exchange bias*, el cual consiste en que el ciclo de histéresis asociado al sistema puede estar centrado en un campo magnético diferente de cero, produciendo dos valores diferentes para el campo coercitivo en las direcciones positiva y negativa del eje del campo magnético [16]. Este fenómeno fue encontrado por primera vez por Meiklejohn y Bean en 1956 y se debe a que la combinación estructural de diferentes materiales trae consigo una compleja interacción energética. Por otra parte, otro aspecto que puede estar relacionado con el surgimiento de *Exchange bias* es el desorden de magnetos en la interfaz de las heteroestructuras. Esta rugosidad, junto con el intercambio entre las interfaces, son el núcleo de la teoría propuesta por Malozemoff en 1986, como explicación al fenómeno de *Exchange bias* [17].

El avance de la física computacional y, en especial, del magnetismo computacional ha traído consigo la explicación de fenómenos físicos que mediante experimentación es difícil, o imposible, concluir. La explicación del *Exchange bias* en películas y multicapas ha sido estudiado durante varios años por gran cantidad de científicos [13, 18, 19, 9, 20, 21]. A pesar de que el fenómeno de *Exchange bias* puede verse afectado por impurezas, fronteras de grano, efectos colectivos, formación de dominios, rugosidad interfacial, entre otros, se han propuesto diversos mecanismos causantes del surgimiento de este fenómeno, que se pueden considerar en dos categorías. La primera consiste en la formación de paredes de dominio en la interfaz. Estas paredes de dominio se anulan mediante una rotación uniforme debida al campo magnético aplicado y a la interacción de intercambio del sistema ferromagnético [22, 23, 24, 25, 26, 27]. La segunda consideración es la formación, movimiento y fijación de paredes de dominio durante la inversión del sistema ferromagnético por la acción del campo magnético externo [28, 29, 30]. Sin embargo, los mecanismos mediante los cuales se produce *Exchange bias* en nanopartículas no han sido lo suficientemente estudiados y analizados. Algunos científicos han realizado estudios en nanopartículas *core/shell* y concluyen que los mecanismos mediante los cuales se produce *Exchange bias* son diferentes a los encontrados para el caso de películas delgadas y multicapas. Esto se debe a que la interfaz en una nanopartícula por naturaleza no está compensada, como se puede apreciar en la figura 1. Esto incorpora una rugosidad intrínseca en la nanopartí-

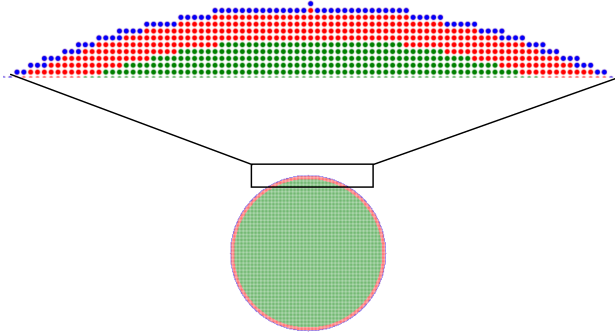


Figura 1: Ilustración de una nanopartícula core/shell. La región azul corresponde a la superficie, mientras que las regiones verde y roja corresponden al core y al shell, respectivamente. Es posible identificar la rugosidad intrínseca cuando se hace un acercamiento en la superficie. Esta rugosidad también se puede apreciar en la interfaz.

cula [31]. Es así como los mecanismos del *Exchange bias* en nanopartículas pueden llegar a ser más complejos. Por otro lado, en imágenes espectroscópicas tomadas de nanopartículas sintetizadas experimentalmente, se puede detectar rugosidad extra que depende de las condiciones de síntesis y de los materiales. Incluso esta rugosidad podría llegar a ser controlada experimentalmente, con el fin de manipular propiedades que surgen como consecuencia de la mezcla de los diferentes sistemas en una heteroestructura [32].

Por lo anterior, en el presente proyecto se plantea estudiar la influencia de la rugosidad interfacial en el comportamiento magnético de nanopartículas core/shell, en el marco de física computacional, por medio de simulaciones Monte Carlo. Con este fin se plantea proponer un método para construir las muestras con rugosidad interfacial y un Hamiltoniano acorde al sistema, que refleje los diferentes fenómenos físicos que puedan ocurrir en dicho sistema.

2. Antecedentes y justificación

Las nanopartículas core/shell han despertado gran interés en los últimos años debido a su interesante acoplamiento en la interfaz. Estas heteroestructuras pueden ser construidas tal que sean estables térmicamente y presenten alta anisotropía, y por lo tanto, ciclos de histéresis bien definidos. De esta forma, se podrían emplear estos sistemas como magnetos permanentes [33]. Además, uno de los requerimientos para poder aumentar la densidad

de grabación magnética consiste en la disminución del tamaño de grano. Una limitación de esta reducción es la inestabilidad magnética debida a las fluctuaciones térmicas, conocido como límite superparamagnético. Por medio de nanopartículas core/shell, se pueden obtener estructuras con una anisotropía lo suficientemente alta como para aumentar la estabilidad térmica del material, sin necesidad de aumentar la coercitividad. Estas estructuras se conocen como medios *Exchange bias* [34]. Skumryiev et al. [35] propusieron superar al límite superparamagnético usando el fenómeno de *Exchange bias*, demostrando un incremento en la temperatura de bloqueo en un sistema de nanopartículas core/shell Co/CoO.

Resultados experimentales han mostrado la viabilidad de estos sistemas para ser empleados en numerosas aplicaciones [12]. Por otra parte, gran cantidad de simulaciones se han llevado a cabo para estudiar los diferentes efectos que surgen en las diferentes configuraciones, es decir, que incluye un core y un shell con diferente orden magnético [3, 36, 37]. Por otro lado, se ha estudiado el efecto que tiene la forma de las nanopartículas [38, 39] y el acople entre el core y el shell [10, 16]. Sin embargo, son pocos los trabajos que han dedicado esfuerzo al estudio de la rugosidad interfacial en nanopartículas [40, 41, 42]. Esta rugosidad ha sido estudiada computacionalmente en películas delgadas y multicapas, llegando a la conclusión que la rugosidad interfacial puede modificar el comportamiento del *Exchange bias* y del campo coercitivo [43, 44, 45, 46].

Evans et al. [40] estudiaron computacionalmente un sistema de nanopartículas aisladas core/shell con orden magnético ferro/antiferro. Ellos propusieron un método para construir la muestra con rugosidad interfacial, tal que se minimice el entremezclado de las estructuras (iones del core con todos sus vecinos tipos shell y viceversa). Este método consiste en dividir la esfera en pequeñas pirámides con un grado de amplitud y asignarles a estas pirámides un radio aleatorio de una distribución de probabilidad Gaussiana, siendo la media de la distribución el radio del core. El estudio concluyó que existe una correlación fuerte entre el campo de *Exchange bias* y la magnetización neta del shell que corresponde a la interfaz. Esto implica que la interfaz puede modificar fuertemente el comportamiento del *Exchange bias*. Un problema de la construcción de la muestra es que no se cuantifica la rugosidad y, por lo tanto, no puede proponerse una relación entre el valor de rugosidad y el valor del campo de *Exchange bias*. Otra dificultad de este modelo consiste en que para los mismos valores de desviación estándar en la distribución Gaussiana puede darse una distribución de diferentes perfiles de rugosidad.

Dimitriadis et al. [42] emplean el método de Evans et al. para realizar el estudio de la influencia de la rugosidad interfacial en nanopartículas core/shell con diferentes morfologías. Para ese estudio, se emplearon nanopartículas cúbicas y esféricas. Como nuevo

resultado, ellos encontraron que diferentes valores de desviación estándar producen diferentes valores de rugosidad y que por lo tanto modifican los valores del campo coercitivo y del campo de *Exchange bias*. Sin embargo, no se puede tomar la desviación estándar como una medida para cuantificar la rugosidad, puesto que dos nanopartículas generadas con la misma desviación estándar pueden poseer diferente valor de rugosidad.

Por lo anteriormente mencionado, es necesario esclarecer la relación entre la rugosidad interfacial de las nanopartículas core/shell y los valores de campo de *Exchange bias* y campo coercitivo. Por lo tanto, surge la necesidad de considerar nuevos métodos para generar la rugosidad interfacial, tal que dichos métodos sean acordes con los resultados experimentales y, así mismo, permitan cuantificar la misma.

3. Marco teórico y estado del arte

El método de Monte Carlo ha sido extensamente usado en física estadística para estudiar diferentes tipos de sistemas físicos. Su rango de aplicación es amplio e incluye simulaciones de propiedades magnéticas de materiales usando tres clases de Hamiltonianos: Ising, Potts y Heisenberg. A menudo, estos Hamiltonianos son complementados con otros términos energéticos como el término Zeeman, para tener en cuenta la interacción con un campo magnético externo, y términos anisotrópicos, con el fin de incluir la anisotropía causada por la red cristalina o la forma del material [47, 48, 49].

Uno de los algoritmos más usados en simulaciones Monte Carlo de materiales magnéticos es el algoritmo de Métropolis, propuesto por Métropolis en 1953 [50]. Este algoritmo consiste en generar nuevos estados a partir de un estado previo usando una probabilidad de transición que depende de la diferencia de energía entre el estado inicial y el final. La secuencia de estados producida sigue una ruta de tiempo, pero en este caso, el tiempo es medido por pasos Monte Carlo, lo que no es un tiempo determinista [47]. Después de una cantidad suficientemente grande de pasos Monte Carlo, el sistema alcanza el equilibrio, a una temperatura constante, y se puede calcular estadísticas de las cantidades termodinámicas [48].

Para nuestro sistema core/shell, se plantea emplear el modelo de Heisenberg con el fin de proporcionarle al sistema mayor grado de libertad magnética. El Hamiltoniano de este modelo, para la energía de intercambio, está dado por

$$\mathcal{H}_{ex} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j \quad (1)$$

donde $\langle i, j \rangle$ indica que la sumatoria recorre las parejas de vecinos cercanos, $\vec{\mu}_i$ y $\vec{\mu}_j$ son

los momentos magnéticos en los sitios i y j , respectivamente y J_{ij} es la constante de intercambio entre los sitios i y j . Esta constante es la encargada de asignar el orden magnético; es decir, si $J_{ij} < 0$, entonces los sitios i y j se ordenarán antiferromagnéticamente, mientras que si $J_{ij} > 0$, se ordenarán ferromagnéticamente. Cabe mencionar que bajo este modelo, los momentos magnéticos pueden tomar cualquier dirección en una esfera.

Sin embargo, el Hamiltoniano del sistema debe estar compuesto por varios términos energéticos, tal que el sistema sea modelado de una forma más realista. Usualmente, para el modelado de nanopartículas core/shell, se deben tener en cuenta los términos energéticos para la anisotropía en la superficie, en el core y en el shell. Estos términos, en general, son diferentes. Dependiendo del sistema, o de la región que se tome, se tienen diferentes Hamiltonianos [51]. Para una anisotropía uniaxial, el Hamiltoniano está dado por

$$\mathcal{H}_{an}^{uni} = - \sum_i K_i^{an} (\vec{\mu}_i \cdot \hat{n})^2 \quad (2)$$

donde K_i^{an} es la constante de anisotropía para el sitio i y \hat{n} es el eje fácil unitario de anisotropía. Si $K_i^{an} > 0$ se propone un eje fácil de anisotropía como se puede observar en 2a, mientras que si $K_i^{an} < 0$ se obtiene una anisotropía de plano fácil, el cual es perpendicular al eje \hat{n} como se puede apreciar en 2b.

Por otro lado, si la anisotropía que se considera es cúbica, el Hamiltoniano está dado por

$$\mathcal{H}_{an}^{cub} = - \sum_i K_i^{an} (\mu_{i,x}^2 \mu_{i,y}^2 + \mu_{i,y}^2 \mu_{i,z}^2 + \mu_{i,x}^2 \mu_{i,z}^2) \quad (3)$$

Con este Hamiltoniano se pueden obtener anisotropías como las de la figura 2c y 2d, que corresponden a los casos en que $K_i^{an} > 0$ y $K_i^{an} < 0$, respectivamente.

Por otro lado, el término energético aportado por la presencia de un campo magnético se debe incluir. Este término es conocido como término Zeeman y el Hamiltoniano está dado por

$$\mathcal{H}_{ze} = -H \sum_i \vec{\mu}_i \cdot \hat{h}_i \quad (4)$$

donde H es la intensidad del campo magnético aplicado y \hat{h}_i es el vector unitario correspondiente a la dirección en la que se aplica el campo magnético externo.

Finalmente, el Hamiltoniano del sistema estaría compuesto de todos estos términos energéticos

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ex} + \mathcal{H}_{an} + \mathcal{H}_{ze} \quad (5)$$

En este tipo de sistemas se puede desprestigiar la energía magnetostática (dipolar) debido a que el tamaño de las nanopartículas estudiadas es menor que el límite de mono-dominio

[42].

Si consideramos la rugosidad interfacial, el core con anisotropía cúbica, el shell con anisotropía uniaxial y la superficie con anisotropía uniaxial, el Hamiltoniano final está dado por

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = & -J_{cc} \sum_{\langle i,j \rangle}^{core} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j - J_{ss} \sum_{\langle i,j \rangle}^{shell} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - J_{cs} \sum_{\langle i,j \rangle}^{interface} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{S}_j \\
& - K_c \sum_i^{core} (\sigma_{i,x}^2 \sigma_{i,y}^2 + \sigma_{i,y}^2 \sigma_{i,z}^2 + \sigma_{i,x}^2 \sigma_{i,z}^2) \\
& - K_{sh} \sum_i^{shell} (\vec{S}_i \cdot \hat{z})^2 - K_s \sum_i^{surface} (\vec{S}_i \cdot \hat{n})^2 \\
& - H \left(\sum_i \vec{\sigma}_i \cdot \hat{z} + \sum_j \vec{S}_j \cdot \hat{z} \right)
\end{aligned} \tag{6}$$

donde J_{cc} , J_{ss} y J_{cs} corresponden a las constantes de intercambio entre dos iones core-core, shell-shell y core-shell, respectivamente, K_c , K_{sh} y K_s hacen referencia a las constantes de anisotropía para el core, el shell y la superficie, respectivamente. Para el shell se propone una anisotropía uniaxial en el eje z, puesto que esta parte corresponde a la región más estable. Para el core se propone anisotropía cúbica favorecida por la estructura cristalina. Para la superficie se propone una anisotropía uniaxial, cuyo eje fácil está orientando en una dirección perpendicular a la superficie en ese punto, conocido como modelo de Néel [52]. El campo magnético se aplicará en el eje z (positivo y negativo).

4. Planteamiento del problema

La rugosidad interfacial en nanopartículas core/shell puede llegar a ser un factor importante para el comportamiento del *Exchange bias*. Hasta el momento, y a mi conocimiento, sólo dos trabajos han sido enfocados en el estudio de la rugosidad interfacial en nanopartículas core/shell. Sin embargo, estos trabajos cuentan con dificultades al momento de cuantificar la rugosidad, construir las muestras y en la reproducibilidad de los resultados. En el presente proyecto se pretende tratar los siguientes planteamientos a partir del estudio de la rugosidad interfacial en nanopartículas core/shell:

- La relación entre la magnetización neta en la región interfacial para la sección antiferromagnética y la rugosidad interfacial no se tiene clara aún. Por lo tanto es de interés comprender esta relación con el fin de plantear una dependencia de

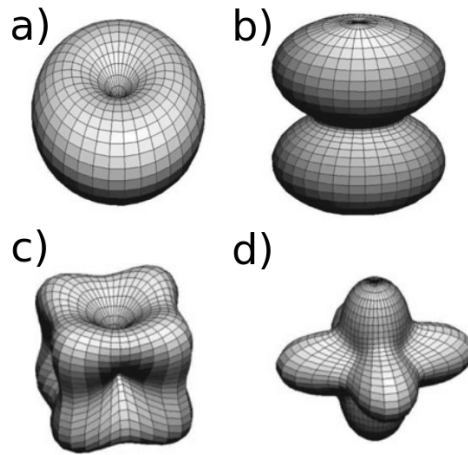


Figura 2: Superficies de energía anisotrópica. a) y b) corresponden a anisotropía uniaxial con constante de anisotropía positiva y negativa, respectivamente. c) y d) corresponden a anisotropía cúbica con constante de anisotropía negativa y positiva, respectivamente [51].

dicha magnetización. Por otro lado, la construcción de las muestras puede afectar significativamente el comportamiento de la magnetización neta en la interfaz. Por lo tanto, se incrementa el nivel de complejidad al momento de relacionar las dos cantidades mencionadas anteriormente.

- El campo coercitivo es una propiedad de los materiales que tiene varias aplicaciones en la industria, principalmente en el campo de grabación magnética. Los valores del campo coercitivo pueden llegar a depender del grado de rugosidad interfacial y, por ende, la rugosidad podría manipularse con el fin de obtener propiedades específicas en un material.
- El *Exchange bias* es un fenómeno de interés actual por las múltiples aplicaciones. Una de las posibles aplicaciones es superar el límite superparamagnético con el fin de aumentar la densidad de grabación magnética en dispositivos. Se ha encontrado que el *Exchange bias* depende de la magnetización neta de la región interfacial de la sección antiferromagnética. Sin embargo, no se ha relacionado el valor del *Exchange bias* con el valor de la rugosidad interfacial. Si se lograra entrelazar esas cantidades, podría modificarse la rugosidad con el fin de modificar los valores del campo de *Exchange bias*.
- La rugosidad interfacial es una rugosidad intrínseca debida a la estructura cristalina

y, de hecho, es una rugosidad *atómica*. En este orden de ideas, se debe tener una relación o analogía con la rugosidad desde el punto de vista macroscópico. Por lo tanto, se podría cuantificar y dar valores estimados comparados con los reportados en la literatura.

5. Objetivos

5.1. Objetivo general

- Desarrollar una metodología para determinar el efecto de la rugosidad interfacial en el comportamiento magnético e hysterético de nanopartículas core/shell mediante simulaciones computacionales.

5.2. Objetivos específicos

1. Elaborar un método para la construcción de las muestras con el fin de representar la rugosidad interfacial en nanopartículas core/shell.
2. Determinar el efecto de la rugosidad interfacial en las propiedades magnéticas de nanopartículas core/shell, especialmente en el campo coercitivo y el *Exchange bias*.
3. Determinar el comportamiento magnético de nanopartículas core/shell al considerar diferente ordenamiento magnético.

6. Metodología

Con el fin de lograr los objetivos planteados, se propone la siguiente metodología

▪ Para el objetivo 1:

- Construir, con base en el método de Evans et al. [40] para generar la rugosidad interfacial, un método realista que minimice el entremezclado de iones y, a su vez, minimice los cambios abruptos en la superficie.
- Estudiar y plantear una analogía entre la rugosidad macroscópica y atómica con el fin de cuantificar la rugosidad en la interfaz de las nanopartículas.
- Calcular la distribución de rugosidad interfacial con base en los parámetros de la distribución de números aleatorios que se emplee para modelar la aleatoriedad de la interfaz.

▪ Para el objetivo 2:

- Una vez el método con el que se genere la rugosidad interfacial sea definido, se debe implementar un software para modelar el comportamiento magnético, que permita obtener ciclos de enfriamiento y ciclos de histéresis.
 - Seleccionar constantes físicas y estructuras cristalinas acordes a materiales reales. Para esto, es necesario estudiar diferentes materiales magnéticos y sus propiedades.
 - Fortalecer los conocimientos de la teoría de *Exchange bias* y anisotropía de intercambio.
 - Construir un esquema de almacenamiento masivo de datos en binario para minimizar el tamaño de almacenamiento y maximizar la velocidad de escritura de datos. Se almacenará toda la historia de simulación para calcular tiempos de relajación y tiempos de correlación y así realizar una estadística con datos estadísticamente independientes.
 - Realizar los ciclos de histéresis para nanopartículas con diferentes valores de rugosidad interfacial, por medio de simulaciones Monte Carlo.
 - Relacionar la magnetización neta de la interfaz antiferromagnética con la rugosidad.
 - Analizar y explicar el comportamiento y mecanismos mediante los cuales se producen los ciclos de histéresis.
 - Calcular el campo coercitivo y el campo de *Exchange bias* a partir de los datos de las simulaciones. Por lo tanto, es necesario elaborar un software para la decodificación y análisis de resultados, preferiblemente en Python.
 - Relacionar el campo coercitivo con la rugosidad interfacial.
 - Relacionar el campo de *Exchange bias* con la rugosidad interfacial.
- **Para el objetivo 3:**
- Estudiar el comportamiento magnético de la nanopartícula core/shell considerando diferente ordenamiento magnético, es decir, antiferro/ferro o ferri/ferro, entre otros. Para esto, se debe seguir una metodología similar a la desarrollada para el objetivo 2, pero considerando diferentes sistemas magnéticos.

7. Cronograma de actividades

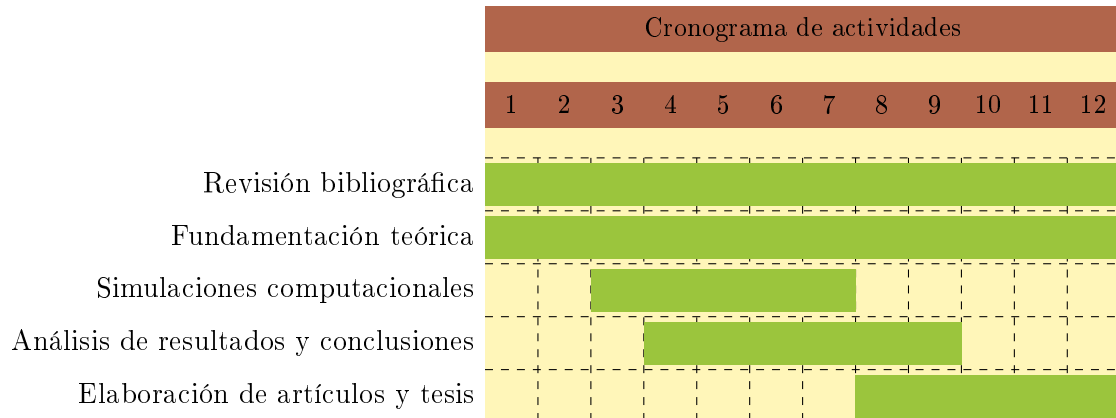


Figura 3: Esquema del cronograma de actividades

8. Presupuesto

Elemeto	Descripción	Valor (COP)
Pago mensual	Beca de grado de honor de pregrado otorgada por la UN.	23.951.628
Pago Universidad	El 50 % de derechos académicos es aportado por la UN gracias a la beca de grado de honor de pregrado. El valor adicional es aportado por el estudiante.	1.723.575
Viajes	Asistencia a eventos y pasantías. Este recurso será gestionado por el grupo PCM Computational Applications a través de la participación en convocatorias para apoyo a proyectos de investigación.	10.000.000
Compra de libros	Compra de libros para el fortalecimiento del conocimiento. Parte de estos recursos serán puestos por el estudiante y el restante por el grupo de investigación PCM Computational Applications.	1.000.000
Equipo de cómputo	Servidor, computadores y dispositivos. Existentes en el grupo PCM Computational Applications.	10.000.000
Total		46.675.203

Cuadro 1: Presupuesto

Referencias

- [1] S. D. Bader, “Colloquium: Opportunities in nanomagnetism,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 78, no. 1, pp. 1–15, 2006.
- [2] R. M. Velasco and F. J. Uribe, “Physics Reports,” *Physics Reports*, vol. 465, pp. 149–189, 2008.
- [3] M. Vasilakaki, K. N. Trohidou, and J. Nogués, “Enhanced Magnetic Properties in Antiferromagnetic-Core/Ferrimagnetic-Shell Nanoparticles,” *Scientific Reports*, vol. 5, p. 9609, 2015.
- [4] Q. A. Pankhurst, J. Connolly, J. S. K, and J. Dobson, “Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine,” *Journal of physics D: Applied Physics*, vol. 36, pp. R167–R181, 2003.
- [5] J. F. Bobo, L. Gabillet, and M. Bibes, “Recent advances in nanomagnetism and spin electronics,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 16, no. 5, pp. S471–S496, 2004.
- [6] Y. Labaye, O. Crisan, L. Berger, J. M. Greneche, and J. M. D. Coey, “Surface anisotropy in ferromagnetic nanoparticles,” *Journal of Applied Physics*, vol. 91, no. 10, p. 8715, 2002.
- [7] N. A. Spaldin, *Magnetic materials: fundamentals and applications*, vol. 7. New York: Cambridge University Press, 2 ed., 2010.
- [8] Y. Ru, N. Jia, G. Wu, Y. Liu, A. Du, and R. Wu, “Angular dependencies of exchange bias and coercivity in the ferromagnetic/antiferromagnetic bilayers not subjected to field-cooling treatments,” *Solid State Communications*, vol. 168, pp. 56–59, 2013.
- [9] Y. Hu, F. Shi, X. Wang, N. Jia, G. Wu, Y. Liu, and A. Du, “Monte Carlo simulation of exchange bias and training effects in ferromagnetic/antiferromagnetic bilayers with different Néel temperatures,” *Thin Solid Films*, vol. 550, pp. 608–615, 2014.
- [10] L. Jiang, S. Shen, J. M. Zhang, Q. Feng, and Z. Huang, “Monte Carlo study on exchange bias and coercivity properties in coupled ferromagnetic/antiferromagnetic films,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 478, pp. 22–26, 2015.
- [11] Y. Hu, Y. Liu, H. N. Wu, A. Du, and F. Shi, “Size-dependent exchange bias in ferromagnetic (core)/antiferromagnetic (shell) nanoparticles,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 449, pp. 214–219, 2014.

- [12] M. Estrader, A. López-Ortega, S. Estradé, I. V. Golosovsky, G. Salazar-Alvarez, M. Vasilakaki, K. N. Trohidou, M. Varela, D. C. Stanley, M. Sinko, M. J. Pechan, D. J. Keavney, F. Peiró, S. Suriñach, M. D. Baró, and J. Nogués, “Robust anti-ferromagnetic coupling in hard-soft bi-magnetic core/shell nanoparticles.,” *Nature communications*, vol. 4, p. 2960, 2013.
- [13] E. Restrepo-Parra, J. Restrepo, J. F. Jurado, C. Vargas-Hernandez, and J. C. Riano-Rojas, “Monte carlo simulation of the FM layer thickness influence on the exchange bias in FM/AFM bilayers,” *IEEE Transactions on Magnetism*, vol. 45, no. 11, pp. 5180–5183, 2009.
- [14] E. Eftaxias and K. N. Trohidou, “Numerical study of the exchange bias effects in magnetic nanoparticles with core/shell morphology,” *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 71, no. 13, pp. 1–6, 2005.
- [15] R. L. Stamps, “Mechanisms for exchange bias,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 34, no. 3, pp. 444–444, 2001.
- [16] M. Kiwi, “Exchange bias theory,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 234, no. 3, pp. 584–595, 2001.
- [17] A. P. Malozemoff, “Random-field model of exchange anisotropy at rough ferromagnetic-antiferromagnetic interfaces,” *Physical Review B*, vol. 35, no. 7, pp. 3679–3682, 1987.
- [18] K. O’Grady, L. E. Fernandez-Outon, and G. Vallejo-Fernandez, “A new paradigm for exchange bias in polycrystalline thin films,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 322, no. 8, pp. 883–899, 2010.
- [19] Y. Hu, F. Shi, N. Jia, Y. Liu, H. Wu, A. Du, Y. Hu, F. Shi, N. Jia, Y. Liu, H. Wu, and A. Du, “Exchange bias and its propagation in ferromagnetic / antiferromagnetic / ferromagnetic trilayers,” *J. Appl. Phys.*, vol. 153901, no. 114, 2013.
- [20] S. K. Mishra, F. Radu, S. Valencia, D. Schmitz, E. Schierle, H. A. Dürr, and W. Eberhardt, “Dual behavior of antiferromagnetic uncompensated spins in NiFe/IrMn exchange biased bilayers,” *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 81, no. 21, pp. 1–4, 2010.
- [21] A. N. Dobrynin and D. Givord, “Exchange bias in a Co/CoO/Co trilayer with two different ferromagnetic-antiferromagnetic interfaces,” *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 85, no. 1, pp. 1–5, 2012.

- [22] D. Mauri, H. C. Siegmann, P. S. Bagus, and E. Kay, “Simple model for thin ferromagnetic films exchange coupled to an antiferromagnetic substrate,” *Journal of Applied Physics*, vol. 62, no. 7, pp. 3047–3049, 1987.
- [23] N. Koon, “Calculations of Exchange Bias in Thin Films with Ferromagnetic/Antiferromagnetic Interfaces,” *Physical review letters*, vol. 78, no. 25, pp. 4865–4868, 1997.
- [24] T. Schulthess and W. Butler, “Consequences of Spin-Flop Coupling in Exchange Biased Films,” *Physical Review Letters*, vol. 81, no. 20, pp. 4516–4519, 1998.
- [25] M. Stiles and R. McMichael, “Temperature dependence of exchange bias in polycrystalline ferromagnet-antiferromagnet bilayers,” *Physical Review B*, vol. 60, no. 18, pp. 12950–12956, 1999.
- [26] R. E. Camley, B. V. McGrath, R. J. Astalos, R. L. Stamps, J.-V. Kim, and L. Wee, “Magnetization dynamics: A study of the ferromagnet/antiferromagnet interface and exchange biasing,” *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, vol. 17, no. 4, p. 1335, 1999.
- [27] M. Kiwi, J. Mejia-Lopez, R. D. Portugal, and R. Ramirez, “Exchange-bias systems with compensated interfaces,” *Applied Physics Letters*, vol. 75, no. 25, pp. 3995–3997, 1999.
- [28] W. H. Meiklejohn, “Exchange Anisotropy: A Review,” *Journal of Applied Physics*, vol. 33, no. 3, p. 1328, 1962.
- [29] C. Schlenker and D. Paccard, “Couplages ferromagnétiques-antiferromagnétiques: étude des contractions de cycles d’hystérésis à l’aide d’un traceur de cycle très basses fréquences,” *Journal de Physique*, vol. 28, no. 7, pp. 611–616, 1967.
- [30] C. Schlenker, “Couplage ferro-antiferromagnétique et traînage magnétique dans des couches minces multiples Co-CoO et Ni-NiO,” *Physica Status Solidi (B)*, vol. 28, no. 2, pp. 507–517, 1968.
- [31] Y. Hu, Y. Liu, A. Du, and F. Shi, “Dependence of exchange bias on core/shell relative dimension in ferromagnetic/antiferromagnetic nanoparticles,” *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, vol. 378, no. 22-23, pp. 1667–1674, 2014.

- [32] A. Juhin, A. López-Ortega, M. Sikora, C. Carvallo, M. Estrader, S. Estradé, F. Peiró, M. D. Baró, P. Sainctavit, P. Glatzel, and J. Nogués, “Direct evidence for an interdiffused intermediate layer in bi-magnetic core-shell nanoparticles,” *Nanoscale*, vol. 6, no. 20, pp. 11911–20, 2014.
- [33] E. Lottini, A. López-Ortega, G. Bertoni, S. Turner, M. Meledina, G. V. Tendeloo, C. De Julián Fernández, and C. Sangregorio, “Strongly Exchange Coupled Core|Shell Nanoparticles with High Magnetic Anisotropy: A Strategy toward Rare-Earth-Free Permanent Magnets,” *Chemistry of Materials*, vol. 28, no. 12, pp. 4214–4222, 2016.
- [34] R. F. L. Evans, R. Yanes, O. Mryasov, R. W. Chantrell, and O. Chubykalo-Fesenko, “On beating the superparamagnetic limit with exchange bias,” *Epl*, vol. 88, no. 5, p. 57004, 2009.
- [35] V. Skumryev, S. Stoyanov, Y. Zhang, G. Hadjipanayis, D. Givord, and J. Nogue^ÀŽs, “Beating the superparamagnetic limit with exchange bias,” *Nature*, vol. 423, no. 19, pp. 850–853, 2003.
- [36] C. Liu, J. Cui, X. He, and H. Shi, “Large exchange bias with remarkable thermostability in an inverted quasi core/shell CoO/y-Fe₂O₃ granular system,” *Journal of Nanoparticle Research*, vol. 16, no. 3, p. 2320, 2014.
- [37] Y. Hu and A. Du, “Surface-anisotropy and training effects of exchange bias in nanoparticles with inverted ferromagnetic-antiferromagnetic core-shell morphology,” *Journal of Applied Physics*, vol. 110, no. 3, p. 033908, 2011.
- [38] C. G. O. Lemos, W. Figueiredo, and M. Santos, “Exchange bias for core/shell magnetic nanoparticles,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 433, pp. 148–160, 2015.
- [39] J. C. Riaño-Rojas, E. Restrepo-Parra, G. Orozco-Hernández, J. Restrepo, F. F. Jurado, and C. Vargas-Hernández, “Geometry Influence on the Hysteresis Loops Behavior in La Ca MnO,” *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 45, no. 11, pp. 5196–5199, 2009.
- [40] R. F. L. Evans, D. Bate, R. W. Chantrell, R. Yanes, and O. Chubykalo-Fesenko, “Influence of interfacial roughness on exchange bias in core-shell nanoparticles,” *Physical Review B*, vol. 84, no. 9, p. 092404, 2011.

- [41] R. F. L. Evans, R. W. Chantrell, and O. Chubykalo-Fesenko, “Surface and interface effects in magnetic core-shell nanoparticles,” *MRS Bulletin*, vol. 38, pp. 909–914, 2013.
- [42] V. Dimitriadis, D. Kechrakos, O. Chubykalo-Fesenko, and V. Tsiantos, “Shape-dependent exchange bias effect in magnetic nanoparticles with core-shell morphology,” *Physical Review B*, vol. 92, no. 6, p. 064420, 2015.
- [43] V. P. Nascimento, E. C. Passamani, A. D. Alvarenga, F. Pelegrini, A. Biondo, and E. Baggio Saitovitch, “Influence of the roughness on the exchange bias effect of NiFe/FeMn/NiFe trilayers,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 320, no. 14, pp. 272–274, 2008.
- [44] A. Maitre, D. Ledue, and R. Patte, “Interfacial roughness and temperature effects on exchange bias properties in coupled ferromagnetic/antiferromagnetic bilayers,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 324, no. 4, pp. 403–409, 2012.
- [45] Y. Li, J.-h. Moon, and K.-j. Lee, “Effect of Interface Roughness on Exchange Bias of an Uncompensated Interface: Monte Carlo Simulation,” *Journal of Magnetism*, vol. 16, no. 4, pp. 323–327, 2011.
- [46] M. Vafae, S. Finizio, H. Deniz, D. Hesse, H. Zabel, G. Jakob, and M. Kläui, “The effect of interface roughness on exchange bias in La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃-BiFeO₃ heterostructures,” *Applied Physics Letters*, vol. 108, no. 7, pp. 1–5, 2016.
- [47] D. P. Landau and K. Binder, *A guide to Monte-Carlo simulations in statistical physics*. New York: Cambridge University Press, 2 ed., 2009.
- [48] M. Newman and G. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. New York: Oxford University Press, 1 ed., 1999.
- [49] J. Thijssen, *Computational Physics*. New York: Cambridge University Press, 1 ed., 2007.
- [50] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, “Equation of state calculations by fast computing machines,” *Journal Chemical Physics*, vol. 21, no. 6, pp. 1087–1092, 1953.
- [51] R. Skomski, *Simple Models of Magnetism*. New York: Oxford University Press, 1 ed., 2010.

- [52] L. Néel, “Anisotropie magnétique superficielle et surstructures d’orientation,” *J. Phys. Radium*, vol. 15, no. 4, p. 225, 1954.